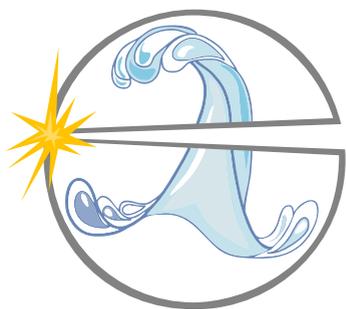




**ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ**



ЕНИСЕЙСКАЯ ФОТОНИКА — 2024

**ТЕЗИСЫ
ДОКЛАДОВ**

ТОМ 2

**Красноярск
16–20 сентября 2024 года**

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Сибирский федеральный университет
Институт инженерной физики и радиоэлектроники

Национальный исследовательский университет ИТМО
Научно-образовательный центр фотоники и оптоинформатики

Российская академия наук
Сибирское отделение
Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр»
Институт физики им. Л. В. Киренского

ЕНИСЕЙСКАЯ ФОТОНИКА – 2024

Всероссийская научная конференция
с международным участием

тезисы докладов

том 2

16 – 20 сентября 2024 г.

Красноярск
2024

УДК 535
ББК 22.34
Е 63

Енисейская Фотоника – 2024. Всероссийская научная конференция с международным участием. Тезисы докладов. 16–20 сентября 2024 года, Красноярск. Т.2. – Изд-во ИФ СО РАН, 2024.– 223 с.

В сборнике представлены тезисы докладов всероссийской научной конференции с международным участием «Енисейская Фотоника – 2024» проходившей в г. Красноярске с 16 по 20 сентября 2024 г. Сборник предназначен для научных сотрудников, аспирантов, преподавателей и студентов, интересующихся проблемами фотоники, оптики и спектроскопии. Печатаются по решению Программного комитета конференции в авторской редакции.

ISBN 978-5-6050879-2-2

ISBN 978-5-6050879-2-2



© Коллектив авторов, 2024
© Сибирский федеральный университет, 2024
© Университет ИТМО, 2024
© Институт физики им. Л. В. Киренского, 2024



DIAMOND I

АЛМАЗНЫЙ КВАНТОВЫЙ КОМПЬЮТЕР ДЛЯ ОБУЧЕНИЯ

О приборе

Первый в мире двух-кубитный образовательный квантовый компьютер основан на спиновом магнитном резонансе азотно-вакансионного (NV) центра в алмазе.

- Настольное устройство с модульной конструкцией.
- Работает при комнатной температуре.
- Множество обучающих функций.
- Помогает открывать и/или оптимизировать курсы физических экспериментов в области квантовой информатики.

Ваш дистрибьютор

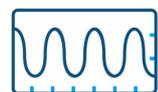
- ✓ «Специальные Системы. Фотоника» - специализированный поставщик и интегратор научного оборудования, систем различного назначения.
- ✓ Более 10 лет на рынке России и ЕАЭС.
- ✓ Работая с нами вы получаете оригинальное оборудование напрямую от производителя.
- ✓ Окажем техническую поддержку и гарантийный сервис.

Доступные эксперименты на базе компьютера Diamond I



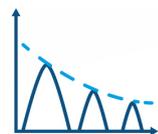
Калибровка прибора

Настройте и отрегулируйте прибор под свой проект на основе принципа оптически детектируемого магнитного резонанса, NV-центра, генерации микроволн и управления импульсами.



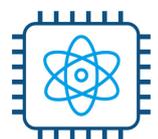
Осцилляции Раби

Оцените осцилляцию Раби NV центра и получите длину микроволнового импульса, соответствующую квантовому логическому элементу.



T2 измерения

Проводите эксперимент T2, чтобы увидеть эволюцию состояния квантовой суперпозиции и измерять время декогеренции спина NV центра.



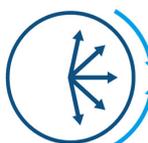
Алгоритм Дойча — Йожи

Применяйте двухкубитный квантовый алгоритм Дойча-Йожи, который реализован на квантовом процессоре NV центра.



Динамическая развязка

Узнайте время декогеренции, которое увеличивается за счет разработки последовательности динамической развязки для усреднения связи между кубитом и окружающей средой.



Непрерывная волна

Измеряйте спектр магнитного резонанса оптического обнаружения NV центра для определения частоты микроволнового резонанса, понимания кубита.



Спиновое эхо

Используйте метод «Спиновое эхо» для подавления связи между кубитом и окружающей средой, чтобы продлить время когерентности.



Узнайте больше о возможностях компьютера.

Получите любую дополнительную информацию, обратившись к нашим специалистам удобным для вас способом:

info@sphotonics.ru | 8 (800) 550-72-97 | www.sphotonics.ru
194044, Санкт-Петербург, Б. Сампсониевский пр., д. 64, лит.Е



СИБИРСКИЙ
ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ

SIBERIAN
FEDERAL
UNIVERSITY

ИТМО



ИНСТИТУТ ФИЗИКИ им. Л.В. КИРЕНСКОГО
Сибирского отделения Российской академии наук

ФИЦ КНЦ СО РАН

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ

Председатель:

- *Шабанов Василий Филиппович* — д-р физ.-мат. наук, проф., академик РАН, научный руководитель ФИЦ КНЦ СО РАН (г. Красноярск)

Ученый секретарь:

- *Ципотан Алексей Сергеевич* — канд. физ.-мат. наук, доц., доцент баз. кафедры фотоники и лазерных технологий, ИИФиРЭ СФУ (г. Красноярск)

Состав комитета:

- *Архипкин Василий Григорьевич* — д-р физ.-мат. наук, проф., заведующий лабораторией когерентной оптики, ИФ СО РАН (г. Красноярск)
- *Вайнштейн Илья Александрович* — д-р физ.-мат. наук, проф., заведующий кафедрой физических методов и приборов контроля качества, ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» (г. Екатеринбург)
- *Ветров Степан Яковлевич* — д-р физ.-мат. наук, проф., ведущий научный сотрудник лаборатории нанотехнологий, спектроскопии и квантовой химии баз. кафедры фотоники и лазерных технологий, ИИФиРЭ СФУ (г. Красноярск)
- *Втюрин Александр Николаевич* — д-р физ.-мат. наук, ст. науч. сотр., заведующий баз. кафедрой фотоники и лазерных технологий, ИИФиРЭ СФУ (г. Красноярск)
- *Вьюнышев Андрей Михайлович* — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник лаборатории когерентной оптики, ИФ СО РАН (г. Красноярск)
- *Зырянов Виктор Яковлевич* — д-р физ.-мат. наук, проф., руководитель научного направления "Фотоника", заведующий лабораторией молекулярной спектроскопии, ИФ СО РАН (г. Красноярск)
- *Калитеевский Михаил Алексеевич* — д-р физ.-мат. наук, проф., научный сотрудник факультета физики и астрономии, Манчестерский университет (Великобритания)
- *Карнов Сергей Васильевич* — д-р физ.-мат. наук, проф., ведущий научный сотрудник лаборатории когерентной оптики, ИФ СО РАН (г. Красноярск)
- *Козлов Сергей Аркадьевич* — д-р физ.-мат. наук, проф., профессор НОЦ Фотоники и оптоинформатики, руководитель, ведущий научный сотрудник международного научного Центра оптической и квантовой информатики, биофотоники, сотрудник лаборатории фемтосекундной оптики и фемтотехнологий, Университет ИТМО (г. Санкт-Петербург)
- *Кратасюк Валентина Александровна* — д-р биол. наук, проф., заведующий кафедрой биофизики, ИФБиТ СФУ (г. Красноярск)
- *Мартынович Евгений Федорович* — д-р физ.-мат. наук, проф., научный руководитель базовой темы, Иркутский филиал Института лазерной физики СО РАН (г. Иркутск)
- *Милёхин Александр Германович* — д-р физ.-мат. наук, заведующий лабораторией ближнепольной оптической спектроскопии и наносенсорики, зам. директора, Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН (г. Новосибирск)
- *Минаков Андрей Викторович* — д-р физ.-мат. наук, директор, ИИФиРЭ СФУ (г. Красноярск)
- *Молокеев Максим Сергеевич* — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник, Лаборатория кристаллофизики, Институт Физики им. Л.В. Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН (г. Красноярск)
- *Наумов Андрей Витальевич* — д-р физ.-мат. наук, доц., член.-корр. РАН, заведующий кафедрой теоретической физики им. Э.В. Шпольского. руководитель

лаборатории физики перспективных материалов и наноструктур, МПГУ (г. Троицк)

- *Непомнящих Александр Иосифович* — д-р геол.-минерал. наук, проф., главный научный сотрудник лаборатории физики монокристаллов, ФГБУН Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН (г. Иркутск)
- *Садреев Алмаз Фаттахович* — д-р физ.-мат. наук, проф., заведующий лабораторией теории нелинейных процессов, ИФ СО РАН (г. Красноярск)
- *Светличный Валерий Анатольевич* — канд. физ.-мат. наук, доц., заведующий лабораторией новых материалов и перспективных технологий, ТГУ (г. Томск)
- *Слабко Виталий Васильевич* — д-р физ.-мат. наук, проф., профессор баз. кафедры фотоники и лазерных технологий, ИИФиРЭ СФУ (г. Красноярск)
- *Слюсарева Евгения Алексеевна* — д-р физ.-мат. наук, доц., заместитель директора по научной работе, профессор баз. кафедры фотоники и лазерных технологий, ИИФиРЭ СФУ (г. Красноярск)
- *Тимофеев Иван Владимирович* — д-р физ.-мат. наук, зам. директора по научной работе, заведующий лабораторией фотоники молекулярных систем, ИФ СО РАН (г. Красноярск)
- *Цыпкин Антон Николаевич* — д-р физ.-мат. наук, доц., руководитель лаборатории квантовых процессов и измерений, директор НОЦ Фотоники и оптоинформатики, Университет ИТМО (г. Санкт-Петербург)
- *Чиркин Анатолий Степанович* — д-р физ.-мат. наук, проф., профессор кафедры общей физики и волновых процессов, МГУ им. М.В. Ломоносова (г. Москва)
- *Шамирзаев Тимур Сезгирович* — д-р физ.-мат. наук, доц., ведущий научный сотрудник лаборатории молекулярно-лучевой эпитаксии соединений АЗВ5, ФГБУН Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН (г. Новосибирск)
- *Шандаров Станислав Михайлович* — д-р физ.-мат. наук, проф., главный научный сотрудник НОЦ "Нелинейная оптика, нанофотоника и лазерные технологии", ТУСУР (г. Томск)

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ

Председатель:

- *Минаков Андрей Викторович* — д-р физ.-мат. наук, директор института инженерной физики и радиоэлектроники СФУ

Заместитель председателя:

- *Втюрин Александр Николаевич* — д-р физ.-мат. наук, ст. науч. сотр., зав. базовой кафедрой фотоники и лазерных технологий ИИФиРЭ СФУ, главный научный сотрудник ИФ СО РАН

Ученый секретарь:

- *Ципотан Алексей Сергеевич* — канд. физ.-мат. наук, доцент базовой кафедры фотоники и лазерных технологий ИИФиРЭ СФУ

Состав комитета:

- *Слюсарева Евгения Алексеевна* — д-р физ.-мат. наук, доц., профессор базовой кафедры фотоники и лазерных технологий, заместитель директора по научной работе ИИФиРЭ СФУ
- *Цыпкин Антон Николаевич* — д-р физ.-мат. наук, доц., директор НОЦ фотоники и оптоинформатики ИТМО
- *Бикбаев Рашид Гельмединевич* — канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник лаборатории фотоники молекулярных систем ИФ СО РАН
- *Вьюнышев Андрей Михайлович* — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник лаборатории когерентной оптики ИФ СО РАН
- *Жукова Мария Олеговна* — канд. физ.-мат. наук, доц., инженер лаборатории квантовых процессов и измерений НОЦ фотоники и оптоинформатики ИТМО
- *Мельник Максим Владимирович* — канд. физ.-мат. наук, доц., заместитель директора НОЦ фотоники и оптоинформатики ИТМО
- *Слюсаренко Нина Викторовна* — канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник базовой кафедры фотоники и лазерных технологий ИИФиРЭ СФУ
- *Семина Полина Николаевна* — канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник международного научно-исследовательского центра спектроскопии и квантовой химии СФУ
- *Пясталова Юлия Валентиновна* — канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник лаборатории молекулярной спектроскопии ИФ СО РАН
- *Пятнов Максим Владимирович* — канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник лаборатории фотоники молекулярных систем ИФ СО РАН
- *Шебелева Анна Андреевна* — научный сотрудник лаборатории физико-химических технологий разработки трудноизвлекаемых запасов углеводородов СФУ
- *Баранова Ирина Антоновна* — старший преподаватель кафедры общей физики ИИФиРЭ СФУ
- *Давлетишин Николай Николаевич* — младший научный сотрудник лаборатории космических систем и технологий КНЦ СО РАН
- *Парфенова Екатерина Валерьевна* — инженер-исследователь лаборатории нанотехнологий, спектроскопии и квантовой химии ИИФиРЭ СФУ
- *Лаппо-Данилевская Анастасия Константиновна* — инженер Лаборатории Квантовых процессов и измерений

Спонсоры и партнеры конференции

Генеральный спонсор:



ООО «Специальные Системы. Фотоника»

Титульные спонсоры:



ООО «Активная фотоника»

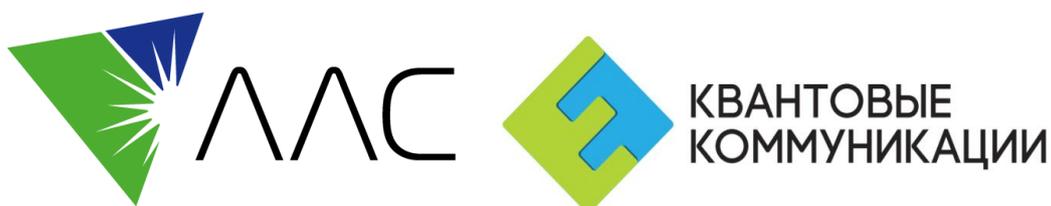
ООО НТЦ «ЭМТИОН»



PRIME TECHNOLOGY

ЗАО «СЛС Прайм Технолоджи»

Спонсоры:



АО «ЛЛС»

ООО «Квантовые Коммуникации»

Партнеры:



Журнал «ФОТОНИКА»
(PHOTONICS RUSSIA)



НТИ Фотоника

СОДЕРЖАНИЕ

секция 3	ФОТОННЫЕ КРИСТАЛЛЫ, МЕТАМАТЕРИАЛЫ и ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ФАЗЫ	10
секция 4	БИОФОТОНИКА	82
секция 5	ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ В ФОТОНИКЕ	149
секция 6	КВАНТОВЫЕ КОММУНИКАЦИИ	175
секция 7	КРЕАТИВНЫЕ ИНДУСТРИИ ФОТониКИ	201

Секция 3

ФОТОННЫЕ КРИСТАЛЛЫ, МЕТАМАТЕРИАЛЫ и ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ФАЗЫ

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ НАНОФОТОНИКА, МЕТАПОВЕРХНОСТИ И БЛОХОВСКИЕ ПОВЕРХНОСТНЫЕ ВОЛНЫ

А. А. Федянин^{1*}

¹*Физический факультет, МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2*

**E-mail: fedyanin@nanolab.phys.msu.ru*

Современные фотонные интегральные платформы должны сочетать в себе управление светом с низкими потерями, спектральную гибкость и плотную упаковку оптических компонентов. Одна из известных платформ представляет собой диэлектрические наноструктуры с фотонной запрещенной зоной, которые поддерживают генерацию поверхностных электромагнитных блоховских волн с низкими оптическими потерями. Блоховские волны являются полностью диэлектрическим аналогом поверхностных плазмон-поляритонов, но имеют преимущества большой длины распространения (до см в видимом диапазоне) и широкого спектрального диапазона возбуждения (от УФ до среднего ИК и ТГц). Пространственная локализация электромагнитного поля блоховских волн делает их применимыми для создания перспективных устройств фотоники, сенсорики и других областей. В докладе рассмотрено несколько способов направленного высокоэффективного возбуждения блоховских волн с использованием диэлектрических наноструктур различной конструкции на поверхности фотонных кристаллов, а также новые физические явления, возникающие при генерации и распространении блоховских поверхностных волн. Также будут рассмотрены современные применения нового класса наноструктур – метаповерхностей.

НЕОБЫЧНАЯ МАГНИТООПТИКА ПУЧКОВ С ОРБИТАЛЬНЫМ УГЛОВОМ МОМЕНТОМ И НАНОСТРУКТУР

В.И. Белотелов^{a,b*}

^aМосковский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
119991, Ленинские горы, 1, Москва, Россия

^bРоссийский квантовый центр, Сколково, Московская область, 143025, Россия
*belotelov@physics.msu.ru

Магнитооптические эффекты позволяют получать изображения магнитных структур и управлять светом на гигагерцовых и даже терагерцовых частотах. Эффект Фарадея - наиболее известный магнитооптический эффект, который представляет собой поворот плоскости линейной поляризации света при его распространении через намагниченную среду. Как правило, эффект Фарадея рассматривается для плоских волн и нечетен по намагниченности. Однако свойства эффекта Фарадея изменяются, если свет распространяется через магнитофотонную структуру (магнитофотонный кристалл, магнитную нанорешетку, магнитоплазмонную структуру) или если свет несет орбитальный угловой момент.

В докладе будет рассказано про недавно открытые разновидности данного эффекта: топологический эффект Фарадея, асимметричный эффект Фарадея и интенсивный эффект Фарадея [1-3]. Данные особенности взаимодействия света с магнитным материалом открывают новые возможности для применения магнитооптики для наблюдения антиферромагнитных структур, магнитных текстур и коротких спиновых волн, длина которых меньше дифракционного предела света. С другой стороны, рассматриваемые явления интересны и в отношении управления спинами и намагниченностью с помощью света, т.к. приводят к особенностям обратного эффекта Фарадея.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-42-02008).

1. M.A. Yavorsky, M.A. Kozhaev, A.Yu. Fedorov, D.V. Vikulin, E.V., Barshak, V.N. Berzhansky, S.D. Lyashko, P.O. Kapralov, and V.I. Belotelov "Topological Faraday effect for optical vortices in magnetic films", *Physical Review Letters* 130, 166901 (2023).

2. D.O. Ignatyeva, T.V. Mikhailova, P.O. Kapralov, S.D. Lyashko, V.N. Berzhansky, and V.I. Belotelov "Asymmetric Faraday Effect in a Magnetophotonic Crystal", arXiv:2211.14355.

3. T.V. Mikhailova, D.O. Ignatyeva, S.D. Lyashko, V.N. Berzhansky, and V.I. Belotelov, "Odd Magneto-Optical Linear Dichroism in a Magnetophotonic Crystal", *Photonics* 10, no. 11: 1237 (2023).

О ЧИСЛЕ ПАРАМЕТРОВ, НЕОБХОДИМЫХ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ В КОНТИНУУМЕ

Д. А. Быков^{1,2*}, Е. А. Безус^{1,2}, А. А. Мингазов^{1,2}, Л. Л. Досколович^{1,2}

¹Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва
443086, Россия, г. Самара, Московское шоссе, д. 34

²Институт систем обработки изображений, НИЦ «Курчатовский институт»
443001, Россия, г. Самара, ул. Молодогвардейская, д. 151

*E-mail: bykovd@gmail.com

Связанные состояния в континууме (ССК) чаще всего изучают в симметричных структурах с одним или двумя открытыми каналами рассеяния. Простейшие ССК, обусловленные симметрией, можно найти, подобрав единственный параметр — частоту света. Другой вид ССК — т. н. “случайные” — может быть получен путем подстройки двух параметров. Для более сложных структур, лишенных определенных симметрий или имеющих несколько открытых каналов рассеяния, может потребоваться большее число параметров. Для определения числа параметров, необходимых для получения ССК, предложен алгебраический подход, сводящийся к задаче вычисления размерностей двух алгебраических многообразий. Вычисление указанных размерностей позволяет связать необходимое количество параметров с количеством открытых каналов рассеяния, не решая уравнения Максвелла. Полученные теоретические результаты подтверждены результатами строгого электромагнитного моделирования.

В фотонике всегда существует компромисс между симметрией структуры и количеством параметров, необходимых для получения желаемых оптических свойств. Как правило, чем больше симметрий у структуры, тем меньше параметров приходится точно подстраивать. В настоящей работе исследуется связь между симметрией структуры и количеством параметров, которые необходимы для получения связанных состояний в континууме (ССК).

ССК — это моды структуры, имеющей открытые каналы рассеяния, в которые мода, однако, не вытекает [1]. В непоглощающих структурах это приводит к бесконечной добротности; в реальных же структурах добротность мод неизбежно становится конечной из-за неточностей изготовления, конечных размеров и наличия ненулевого поглощения. Однако добротность может оставаться весьма высокой, что приводит к появлению так называемых квази-ССК, которые важны для ряда приложений, включая разработку спектральных фильтров, сенсоров и лазерных резонаторов [1].

Наиболее часто встречающимися типами ССК являются ССК, обусловленные симметрией (т. е. антисимметричные собственные моды симметричных структур). Для поиска таких ССК достаточно подобрать один параметр, а именно частоту света. Обусловленные симметрией ССК хорошо изучены [1, 2]. Другой тип ССК, часто называемый случайными ССК, требует подстройки двух параметров [1, 2]. Хотя про такие ССК не говорят как про обусловленные симметрией, они обычно появляются в высокосимметричных структурах с одним независимым каналом рассеяния [3].

Для менее симметричных структур как правило требуется больше параметров, при этом определение количества параметров, необходимых для получения ССК в структуре с заданной симметрией, является непростой задачей. В работе [3] был предложен подход к её решению на основе теории возмущений. В настоящей работе предлагается более общий алгебраический подход, который может быть применен к широкому кругу структур фотоники [4].

Рассмотрим как пример структуры фотоники, в которой может существовать ССК, дифракционную решётку, показанную на врезке к рис. 1(а). Пусть \mathbf{S}_1 — матрица рассеяния, описывающая верхнюю половину структуры, то есть эта матрица связывает комплексные амплитуды порядков дифракции и комплексные амплитуды мод, распространяющихся внутри структуры (т. е. мод одномерного фотонного кристалла). Для непоглощающих структур данная матрица является унитарной: $\mathbf{S}_1 \mathbf{S}_1^* = \mathbf{I}$, где звёздочка обозначает эрмитово сопряжённую матрицу.

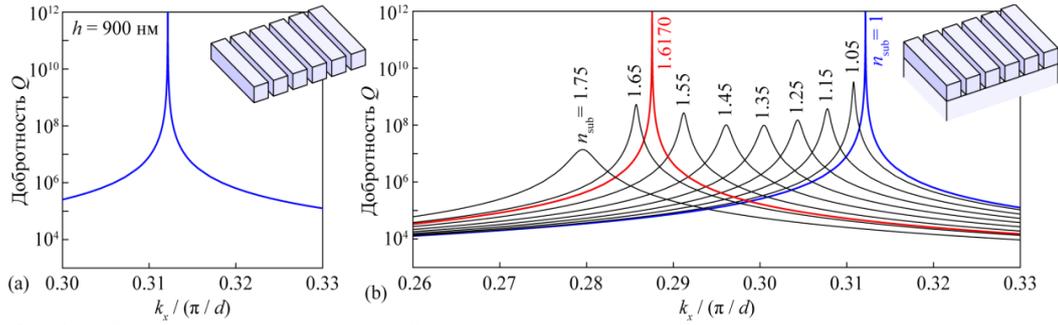


Рис. 1. Добротность мод дифракционной решётки с горизонтальной плоскостью симметрии (а) и такой же структуры на подложке при разных значениях показателя преломления последней (б)

Рассмотрим элементы матрицы рассеяния \mathbf{S}_1 как неизвестные x_1, \dots, x_n и запишем множество всех значений (x_1, \dots, x_n) , удовлетворяющих условию унитарности:

$$\mathcal{D}_1 = \{(x_1, \dots, x_n) \mid \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_1^* = \mathbf{I}\}. \quad (1)$$

Такое множество можно рассматривать как алгебраическое многообразие некоторой размерности $\dim \mathcal{D}_1$. Добавляя в систему уравнений (1) условие формирования ССК [2, 4], получим второе многообразие

$$\mathcal{D}_2 = \{(x_1, \dots, x_n) \mid \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_1^* = \mathbf{I}, \det(\mathbf{R}_1 - \mathbf{I}) = 0\},$$

имеющее меньшую размерность и описывающее структуры, в которых могут существовать ССК. Здесь \mathbf{R}_1 — матрица, полученная из матрицы \mathbf{S}_1 вычёркиванием последних столбца и строки. С учётом введённых обозначений число параметров, необходимых для получения ССК, может быть найдено как

$$N = \dim \mathcal{D}_1 - \dim \mathcal{D}_2, \quad (2)$$

где под размерностью понимается *действительная* размерность алгебраического многообразия, то есть размерность пространства решений, в котором действительная и мнимая части элементов матрицы рассеяния рассматриваются как отдельные действительные переменные [4].

В качестве примера на рис. 1(а) приведён график добротности мод резонансной дифракционной решётки, показывающий, что ССК может быть получено подбором двух параметров: x -компоненты волнового вектора k_x и частоты ω . Расчёт по формуле (2) также даёт $N = 2$. На рис. 1(б) показано, как изменяется добротность мод при нарушении горизонтальной плоскости симметрии. Видно, что ССК пропадает, но потом появляется вновь лишь при определённом значении показателя преломления подложки. Следовательно, для получения ССК в такой структуре необходима подстройка трёх параметров: k_x, ω, n_{sub} . Данный факт подтверждается расчётом по формуле, аналогичной формуле (2), которая даёт $N = 3$.

Работа выполнена за счёт гранта РФФИ №22-12-00120.

Список литературы

1. C. W. Hsu, B. Zhen, A. D. Stone, et. al. Bound states in the continuum // Nat. Rev. Mat., vol. 1, p. 16048, 2016.
2. D. A. Bykov, E. A. Bezus, L. L. Doskolovich Coupled-wave formalism for bound states in the continuum in guided-mode resonant gratings // Phys. Rev. A, vol. 99, p. 063805, 2019.
3. L. Yuan, Y. Y. Lu Parametric dependence of bound states in the continuum on periodic structures // Phys. Rev. A, vol. 102, p. 033513, 2020.
4. D. A. Bykov, E. A. Bezus, A. A. Mingazov, L. L. Doskolovich Algebraic approach to finding the number of parameters required to obtain a bound state in the continuum // Phys. Rev. A, to be published, 2024.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ В ОПТИКЕ И КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ: ОПЫТ РЕШЕНИЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ЗАДАЧ

О. Г. Романов

Белорусский государственный университет
220030, Республика Беларусь, Минск, пр. Независимости, 4
*E-mail: romanov@bsu.by

На основе прямого численного решения нестационарного уравнения Шредингера и уравнений Максвелла анализируются и сравниваются закономерности распространения волновых пакетов (импульсов) для различных пространственных конфигураций потенциальной функции и пространственного распределения диэлектрической проницаемости среды, а также для различных законов дисперсии диэлектрической проницаемости.

С математической точки зрения стационарное уравнение Шредингера – это уравнение, известное в математике как уравнение Гельмгольца. Однако традиционно обозначение "уравнение Гельмгольца" сохраняется для описания классических волн (не только электромагнитных, но и, например, акустических), в то время как термин "уравнение Шредингера" используется только для квантовых объектов. Это подчеркивает тот факт, что эти уравнения описывают разные объекты и относятся к разным разделам физики. Совпадение по форме стационарного уравнения Шредингера и уравнения Гельмгольца часто формулируется как изоморфизм данных уравнений. Эти уравнения ясно указывают на то, что изменения показателя преломления в пространстве могут приводить к тем же результатам, что и изменения потенциала пространства, точнее, значений разницы полной энергии частицы и потенциальной энергии. Можно отметить, что обе величины (как показатель преломления, так и разница между полной энергией частиц и потенциальной энергией) характеризуют скорость волны. Можно показать, что существуют пары сходных оптических и квантовых явлений, которые являются следствием трех основных факторов: 1) волновая природа света и квантовых частиц; 2) существование неоднородных (затухающих) волн в так называемых "классически запрещенных" областях; 3) интерференция волн, рассеянных скачками показателя преломления или потенциала.

В данной работе приводятся результаты прямого численного решения нестационарного уравнения Шредингера на примерах задач о туннелировании квантового волнового пакета через потенциальные барьеры различной геометрии. А также методами прямого численного решения уравнений Максвелла анализируется распространение электромагнитных импульсов в задачах нанофотоники и электродинамики (метаматериалы, нелинейно-оптические задачи, плазма). Особое внимание уделяется задачам нестационарной электродинамики, решаемых на основе модели нестационарных уравнений Максвелла с учётом материальной дисперсии (временной и пространственной). Проводятся и анализируются аналогии квантовомеханических и электродинамических задач, анализируются закономерности нестационарных режимов эффектов туннелирования.

Работа поддержана грантом БРФФИ № Ф23ИКР-002.

ДИФРАКЦИОННЫЕ И ИНТЕРФЕРОМЕТРИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИЗУЧЕНИЯ НЕКОТОРЫХ ФИЗИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ В КРИСТАЛЛАХ НИОБАТА И ТАНТАЛАТА ЛИТИЯ

С. М. Шандаров

*Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники
634050, Российская Федерация, Томск, пр. Ленина, д. 40
E-mail: stanislav.m.shandarov@tusur.ru*

Рассмотрены возмущения оптических свойств одноосных сегнетоэлектрических кристаллов ниобата и танталата лития и регулярных доменных структур (РДС) на их основе, вызываемые изменениями температуры, а также электрическими и упругими полями, создаваемыми доменными стенками и приложенным напряжением. Основное внимание уделяется возмущениям, позволяющим изучать дифракционными и интерферометрическими методами такие физические эффекты, как фотопроводимость РДС с наклонными стенками в ниобате лития, вырожденная дифракция света на РДС в танталате лития, пироэлектрическая генерация электрических разрядов в образцах полярных срезов.

Постоянный интерес к разнообразным физическим явлениям в одноосных сегнетоэлектрических кристаллах ниобата и танталата лития связан с их широким применением для реализации устройств фотоники [1] и в других приложениях, таких как пироэлектрическая генерация потоков заряженных частиц и рентгеновского излучения [2,3]. В настоящем докладе рассматриваются возмущения оптических свойств монокристаллических образцов ниобата и танталата лития и РДС на их основе, позволяющие изучать реализуемые в них различные физические эффекты дифракционными и интерферометрическими методами.

Возмущения диэлектрического тензора РДС определяются пространственным распределением электрической поляризации и упругих полей, создаваемых доменными стенками вследствие электрострикции и обратного флексоэлектрического эффекта, а также прикладываемым внешним электрическим напряжением. При их рассмотрении принимаются во внимание фотоупругость и электрооптические эффекты, как квадратичный по электрической поляризации, так и линейный по напряженности приложенного электрического поля [4]. Для РДС с наклонными стенками представлено создаваемое ими распределение диагональных компонент диэлектрического тензора в виде Фурье-разложения по пространственным гармоникам [5].

Как для одноосных монокристаллических кристаллов, так и для образцов с РДС, вариации температуры приводят к изменениям показателей преломления для распространяющихся в них обыкновенной и необыкновенной волн вследствие термооптического эффекта [6, 7]. Кроме того, для монокристаллических образцов ниобата и танталата лития, являющихся пироэлектриками, на полярных гранях Z^+ и Z^- при изменении температуры появляются электрические заряды противоположных знаков, создающих электрическое поле, которое благодаря линейному электрооптическому эффекту также возмущает показатели преломления обыкновенной и необыкновенной волн [7].

Проявляющиеся в кристаллах ниобата и танталата лития и в РДС на их основе возмущения диэлектрического тензора позволили экспериментально изучить особенности некоторых физических эффектов дифракционными и интерферометрическими методами с использованием лазерного излучения с длинами волн 457, 532, 633, 657 и 980 нм. В докладе представлены методика и результаты исследования с использованием дифракции Брэгга фотоиндуцированной проводимости для РДС с наклонными стенками Y -типа в кристаллах $5\%MgO:LiNbO_3$, по релаксации дифракционной эффективности после приложения к образцам постоянного электрического напряжения [8]. Получено, что для излучения с длиной волны 457 нм и интенсивностью 315 мВт/мм^2 величина эффективной фотоиндуцированной проводимости для РДС с углом наклона доменных стенок к полярной оси $\pm 0,31^\circ$ более чем на пять порядков превышает значение темновой проводимости монокристаллического образца $5\%MgO:LiNbO_3$.

Описаны эксперименты по наблюдению эффектов вырожденной дифракции света на РДС с ненаклонными стенками в кристалле 1%MgO:LiTaO₃ на длине волны 632,8 нм в температурном диапазоне от 30 до 110 °С. Из измеренных максимальных значений эффективности для процессов двукратного типа при необыкновенном и обыкновенном зондирующем пучке получена оценка $|f_{1132} + f_{3131}| \approx 18$ В для компонент тензора флексоэлектрической связи исследованного образца 1%MgO:LiTaO₃. Представлены результаты анализа экспериментальных температурных зависимостей для мощности прошедшего через данный кристалл с РДС и скрещенный анализатор зондирующего пучка с вектором поляризации, ориентированным под углом 45° к оси Z, из которого определена температура изотропной точки $T_i = 69,31$ °С.

Рассмотрены результаты экспериментов по пьезоэлектрической генерации электрических разрядов в коаксиальной системе, состоящей из медного цилиндра, кристалла ниобата лития цилиндрической формы с параллельными Z-гранями, образующими интерферометр Фабри-Перо, и полупрозрачного анода. Отражение лазерного пучка с длиной волны 532 нм от данного кристалла позволило зарегистрировать в моменты генерации электрических разрядов между ним и анодом динамику ступенчатого изменения внутреннего электрического поля, с постоянной времени, составляющей менее 1 мкс, связанного со скачкообразным поведением возмущений диагональных компонент диэлектрического тензора $\Delta\epsilon_{11} = \Delta\epsilon_{22}$, в соответствии с эффектом Поккельса.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки и высшего образования Российской Федерации в рамках Госзадания FEWM-2023-012 на 2023 – 2025 гг.

Список литературы

1. Ferraro P., Grilli S., De Natale P. (ed.). *Ferroelectric crystals for photonic applications* / ed. P. Ferraro, S. Grili, P. De Natale. Berlin: Springer, 2009.
2. К.М. Mambetova, S.M. Shandarov, S.I. Arestov, et al. Registration of a pulsed generation of electron beam in the nanosecond range under heating and cooling cycles of a lithium niobate crystal at atmospheric pressure // *Journal of Instrumentation*, vol. 17, P. 04008, 2022.
3. М. Ali, P. Karataev, A. Kubankin, A. Oleinik. Stability of electrons and X-rays generated in a pyroelectric accelerator // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 1061, P. 169134, 2024.
4. S.M. Shandarov, E.N. Savchenkov, N.I. Burimov, et al. Perturbations of a dielectric tensor induced by domain walls of periodic domain structures in ferroelectric crystals: contribution to the Bragg diffraction of light waves // *Laser Physics*, vol. 30 (2), P. 025401, 2019.
5. Е.Н. Савченков, С.М. Шандаров, С.В. Смирнов и др. Дифракция света на регулярной доменной структуре с наклонными стенками в MgO: LiNbO₃ // *Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики*, т. 110 (3), с. 165–169, 2019.
6. C. Bäumer, D. Berben, K. Buse, et al. Determination of the composition of lithium tantalate crystals by zero-birefringence measurements // *Applied Physics Letters*, vol. 82 (14), pp.2248–2250, 2003.
7. J. Parravicini, J. Safioui, V. Degiorgio, et al. All-optical technique to measure the pyroelectric coefficient in electro-optic crystals // *Journal of Applied Physics*, vol. 109 (3), P. 033106, 2011.
8. E.N. Savchenkov, A.V. Dubikov, D.E. Kuzmich, et al. Photoinduced conductivity during sub-bandgap illumination in periodically poled MgO: LiNbO₃ with charged domain walls // *Optical Materials*, vol. 122, P. 111813, 2021.

«ТЁМНЫЕ» СОСТОЯНИЯ СПИН-ВОЛНОВОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ И АКУСТИКИ СЛОИСТЫХ МАГНИТНЫХ СТРУКТУР

О.С. Сухорукова^{1,2}, А.С. Тарасенко², С.В. Тарасенко², В.Г. Шавров³.

¹Физико-технический факультет, Донецкий государственный университет, 283001, Донецк, Россия

²Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина, 283048, Донецк, Россия

³Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, 125009, Москва, Россия

Для полукрытой волноведущей слоистой структуры (в том числе и для уединённой границы раздела сред) предложен критерий формирования связанных состояний в континууме («тёмных» состояний), в основе которого лежит введённое авторами представление об *особой поверхностной волне*. Адекватность этих представлений продемонстрирована на конкретных примерах спин-волновой электродинамики и акустики магнитных гетероструктур.

На примере слоя оптически прозрачного магнитного диэлектрика между двух идентичных анизотропно проводящих метаповерхностей (а также конечной одномерной сверхрешетки с таким элементарным периодом) изучены особенности резонансного фотонного прохождения, связанные с гибридизацией двух независимых механизмов формирования коллапса резонанса Фано: гиротропии и пространственной дисперсии. В частности показано, что возникновение в спектре излучения радиационных поляритонов интерференционного типа «тёмных» состояний с нулевой радиационной шириной может сопровождаться подавлением эффекта полной электромагнитной прозрачности слоя, который характерен для двухмодовой модели образования данного типа связанных состояний в континууме. При этом одновременно возникающая в слое радиационная поляритонная мода для фотонного кристалла рассматриваемого типа может стать сверхизлучательной, что приведет к практически полному фотонному отражению.

Гибридизация магнитоупругого и неоднородного обменного взаимодействий может приводить к формированию интерференционного типа связанных состояний в спектре излучения вытекающих поверхностных магнитных поляронов. В окрестности таких «тёмных» состояний их радиационная ширина может быть сколь угодно малой («суперрезонанс»), вследствие чего для падающей извне на магнитный слой квазиплоской (или квазигармонической) упругой волны неограниченно (в бездиссипативном приближении) увеличивается продольный эффект Шоха (или Вигнеровское запаздывание), подавляются эффекты нулевого рассеяния поля падающей и расщепления формы отраженной волн.

Финансирование

Исследование роли гибридизации эффектов пространственной дисперсии и гиротропии на электромагнитную прозрачность слоя с одним открытым каналом фотонного рассеяния выполнено при поддержке Минобрнауки РФ за счет государственного задания ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина», бюджетная тема. Исследование на примере конечной одномерной сверхрешетки возможности существования в этих условиях дополнительных механизмов формирования сверхизлучательных мод выполнено при поддержке РФФИ, грант номер 20-19-00745-П.

УПРАВЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМИ ПОЛЯМИ В ФОТОННЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ

Д.В. Жирихин^{1*}

¹Университет ИТМО, Физико-технический мегафакультет,
197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., д. 49 лит. А

*E-mail: d.zhirihin@metalab.ifmo.ru

Применение аппарата топологии для описания физических эффектов оказало существенное влияние на современную науку. В частности, в последние годы проводятся активные исследования в области топологической фотоники — раздела физики, изучающего топологические явления в электромагнитных структурах. Чаще всего топологические свойства проявляются в виде возникновения краевых состояний, устойчивых к некоторым типам структурных дефектов. В настоящем докладе приводятся экспериментальные исследования топологических краевых состояний, в том числе топологических состояний высокого порядка, в фотонных периодических структурах на основе метаматериалов и метаповерхностей.

Развитие топологической фотоники [1,2] – современной области исследований, возникшей на стыке фотоники, физики конденсированного состояния и метаматериалов, – сопровождалось открытиями удивительных топологических электромагнитных эффектов и изменением взглядов на управление электромагнитными волнами. Ключевым проявлением топологических свойств в фотонных структурах является появление топологических краевых состояний, возникающих на границах раздела топологически неэквивалентных областей и обладающие свойством устойчивого распространения, даже при наличии различного рода дефектов и неоднородностей. Подобные топологически защищенные состояния существуют в структурах различной размерности, локализуясь на поверхностях, одномерных границах или нульмерных краях [1,2].

Несмотря на относительную молодость направления, несколько лет назад произошел еще один прорыв в топологической физике – были предсказаны новый класс структур – топологические изоляторы высокого порядка [3,4], особенностью которых является возникновение топологических состояний, размерность которых на два и более порядков меньше размерности структуры (например, возникновение нульмерных состояний в вершинах трехмерных структур или волн, движущихся вдоль их ребер).

В данной работе рассмотрены экспериментальные исследования электромагнитных топологических структур различных размерностей. Продемонстрированы локализованные топологические состояния в одномерных системах, распространяющиеся краевые и поверхностные состояния в двумерных и трехмерных системах, а также топологические состояния высокого порядка в фотонных структурах на основе метаматериалов и метаповерхностей. Помимо этого, проиллюстрированы перестраиваемые топологические структуры с различными механизмами управления собственными состояниями.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект РНФ № 24-72-10069).

Список литературы

1. L. Lu, J. D. Joannopoulos, and M. Soljačić. Topological photonics // *Nat. Photon.*, vol. 8, pp. 821–829, 2014.
2. T. Ozawa, H.M. Price, A. Amo, et. al. Topological photonics // *Rev. Mod. Phys.*, vol. 91, pp. 015006, 2019.
3. W.A. Benalcazar, B.A. Bernevig, T.L. Hughes. Quantized electric multipole insulators // *Science*, Vol. 357, no. 6346, pp. 61–66, 2017.
4. W.A. Benalcazar, B.A. Bernevig, T.L. Hughes. Electric multipole moments, topological multipole moment pumping, and chiral hinge states in crystalline insulators // *Physical Review B*, Vol. 96, no. 24., pp. 245115, 2017.

КОМПЬЮТЕРНОЕ 2D-МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТАЛИНЗЫ

А.А. Ассад¹, Н.А. Агапов¹

¹ *Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, Россия, г. Томск, проспект Ленина, дом 30
E-mail: aa011@tpu.ru, anikolja@tpu.ru

Цель данной работы: смоделировать через скрипт PYTHON в формате 2D и объяснить основные этапы проектирования металинзы, работающей на длине волны 940 нм, на основе кремниевого нанокompозита, нанесенного на стеклянную подложку.

С 1984 по 2006 год развитие металинз шло медленно из-за ограничений в производственных технологиях и вычислительной мощности. В этот период металинзы работали в видимом диапазоне и представляли собой структуры с размерами, близкими к длине волны, и нанесенные на стеклянные подложки. Наноструктуры с высокой точностью формируются на поверхности подложки, чтобы управлять как фазой, так и амплитудой проходящих через них световых волн. Рассчитывая определенным образом положение и размеры наноструктур металинзы, можно вводить такие фазовые задержки, которые позволяют с требуемой точностью сфокусировать свет в заданные точки с коррекцией aberrаций. Металинзы имеют небольшие габариты (диаметр и толщину) и вес. Использование соответствующих материалов позволяет конструировать металинзы как в видимом, так и в ИК диапазонах. Изготовление осуществляется с использованием передовых методов нанofабрикации, таких как электронно-лучевая литография или нанoимпринтная литография.

Разработку металинзы можно разделить на два этапа:

- Оптимизация размеров ячейки.

В качестве примера для моделирования были использованы параметры линзы, уже изготовленной на подложке из стекла ($n = 1.5$) с цилиндрами из нанокompозита кремния (n превышает 2.2). В 2D-формате цилиндры представлены в виде прямоугольников. Мы рассчитываем разность фаз элементарной ячейки, симулируя длину волны без ячейки (рисунок 1a) и с ячейкой (рисунок 1b). Была исследована зависимость разности фаз и пропускания от радиусов и высот цилиндров, чтобы определить оптимальные размеры элементарной ячейки, которые обеспечивают малый угол наклона, высокий коэффициент пропускания (рисунки 1c и 1d) и разность фаз от 0 до 2π .

- Симуляция полной линзы:

После оптимизации размеров ячеек следует симулировать полный массив цилиндров, чтобы добиться полного сдвига фазы в 8 шагах. Мы симулируем их, чтобы убедиться, что падающая на ячейку волна после ее прохождения отклоняется от своего первоначального направления. На втором этапе необходимо определить числовую апертуру (NA) и фокусное расстояние линзы. В нашем примере NA составляет 0.14, а фокусное расстояние — 2 см. Затем рассчитываем разность фаз в каждой точке на линзе:

$$\varphi_{local} = \frac{2\pi}{\lambda_{center}} (f - \sqrt{(j * p)^2 + f^2}), \quad (1)$$

где f – фокусное расстояние линзы, j – номер ячейки, p – расстояние между соседними ячейками. И заключительный этап – расчет распределения энергии в фокусе.

Результаты и обсуждение.

Оптимальная высота для цилиндра составляет 940 нм (рисунки 1c и 1d), она соответствует длине волны. Диаметр блоков, представляющих цилиндры, варьируется от 21 нм до 600 нм для достижения разности фаз от 0 до 2π с малым углом наклона. Основное отличие нашей линзы от примера [3] заключается в размерах окружения и показателе преломления, которые реально влияют на результаты. Пропускание почти 30% (рисунок 2a).

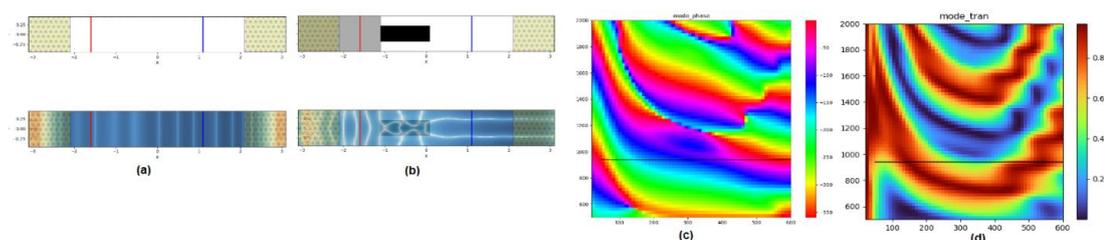


Рисунок .1. Иллюстрация процесса симуляции и оптимизации элементарной ячейки металлинзы (a) - показывает окружение без элементарной ячейки, где фоновым материалом является только стекло; (b) - показывает окружение с элементарной ячейкой, где фоновый материал окружения — воздух; (c) - демонстрирует сканирование высоты цилиндра и радиуса цилиндра, а также связанную с ними разность фаз; (d) - показывает изменения пропускания в зависимости от радиуса и высоты цилиндра. Черная линия на рисунках 2c и 2d указывает оптимальную высоту, при которой достигается полный сдвиг фаз.

Когда мы симулируем 8 шагов в каком-то месте линзы, образец показывает отклонение на 4 градуса (рисунок 2b), это зависит от положения ячейки. В примере [3] отклонение составляет 7 градусов, так что наша линза выполняет основную функцию отклонения волны в определенную точку в зависимости от положения ячейки (рисунок 2b). На (рис. 2c) изображены графики распределения энергии вдоль оптической оси при трех значениях радиуса линзы. Максимальное значение энергии получается в фокусе при максимальном значении радиуса.

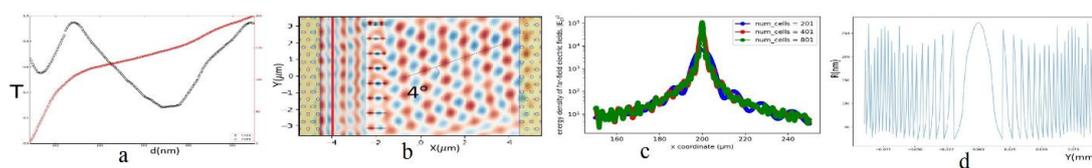


Рис. 2. Результаты моделирования клеток

(a) - показывает, как изменения радиуса влияют на пропускание ячеек (черная линия) и разность фаз (красная линия); (b) - демонстрирует влияние 8 ячеек на отклонение поля, которое в нашем случае составляет 4 градуса; (c) - показывает, как энергия распределяется в фокусной точке в дальней зоне; (d) - показывает изменение радиусов цилиндров ячеек.

Заключение

В наши дни можно рассчитать разность фаз с помощью таких программ, как ANSYS, COMSOL или Virtual Lab Fusion. Мы симулируем 2D-линзу и объясняем основные шаги по проектированию металлинзы с высококачественной фокусировкой. Фокусное расстояние исследуемой линзы $f = 200$ мкм с разной длиной боковой стороны (201, 401, 801 ячейка). Результаты этой симуляции показывают высокую энергию в точке фокуса с возможностью отклонения поля на 4 градуса.

Список литературы

1. M. Khorasaninejad, F. Capasso. Metalenses: versatile multifunctional photonic components // Science, vol. 358, eaam8100, 2017.
2. P. Lalanne, S. Astilean, P. Chavel, E. Cambri, H. Launois. Design and fabrication of blazed binary diffractive elements with sampling periods smaller than the structural cutoff // Journal of the Optical Society of America A, vol. 16 (5), pp. 1143-1156, 1998.
3. G. Yoon, K. Kim, S. Kim, S. Han, H. Lee, J. Rho. Printable Nanocomposite Metalens for High-Contrast Near-Infrared Imaging // ACS Nano, vol. 15, pp. 698–706, 2021. DOI: 10.1021/acsnano.0c06968.

СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ В КОНТИНУУМЕ И ПОЛНОЕ ОТРАЖЕНИЕ СВЕТА В ДИФРАКЦИОННОЙ РЕШЕТКЕ НА ЗЕРКАЛЕ, РАБОТАЮЩЕЙ В ГЕОМЕТРИИ ЛИТРОВА

Е. А. Безус^{1,2*}, Д. А. Быков^{1,2}, Л. Л. Досколович^{1,2}

¹Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва
443086, Россия, г. Самара, Московское шоссе, д. 34

²Институт систем обработки изображений, НИЦ «Курчатовский институт»
443001, Россия, г. Самара, ул. Молодогвардейская, д. 151

*E-mail: evgeni.bezus@gmail.com

Исследуются оптические свойства структуры, состоящей из дифракционной решетки, работающей в геометрии Литрова, многослойного диэлектрического зеркала, полностью отражающего падающее на него излучение, и разделяющего их плоскопараллельного диэлектрического слоя. Получены условия, накладываемые на элементы матрицы рассеяния дифракционной решетки, при выполнении которых можно за счет выбора толщины диэлектрического слоя получить полное обратное отражение или полное зеркальное отражение, т.е. направить всю энергию падающей волны в -1 -ый или 0 -ый отраженные порядки дифракции, а также условие, при выполнении которого в структуре существуют связанные состояния в континууме. Результаты численного моделирования в рамках электромагнитной теории дифракции подтверждают полученные теоретические результаты.

Несмотря на более чем двухсотлетнюю историю [1], дифракционные решетки по-прежнему являются предметом интенсивных исследований [2, 3]. Это связано как с фундаментальным интересом, так и с различными практическими применениями решеток, в частности, в оптических системах для спектральной и пространственной фильтрации электромагнитного излучения, объединения и разделения оптических пучков, сжатия оптических импульсов [2, 3]. Одной из важных задач расчета и оптимизации дифракционных решеток является задача расчета структур, направляющих максимально возможную долю энергии падающей волны в некоторый рабочий порядок дифракции. Часто в качестве рабочего рассматривается -1 -ый отраженный порядок дифракции. Особый интерес в таких задачах представляет т.н. геометрия Литрова, в которой направление распространения -1 -го отраженного порядка противоположно направлению распространения падающей волны [4]. Также большой интерес представляет изучение резонансных свойств указанных структур и, в частности, исследование формирования в них связанных состояний в континууме.

Рассмотрим дифракционную структуру, состоящую из диэлектрической дифракционной решетки, работающей в геометрии Литрова, плоскопараллельного диэлектрического слоя и зеркала, полностью отражающего падающее на него излучение (рис. 1). В качестве такого зеркала может быть рассмотрен, в частности, многослойный брэгговский отражатель, состоящий из чередующихся четвертьволновых диэлектрических слоев. Оптические свойства такой структуры могут быть описаны в рамках формализма матрицы рассеяния. С учетом симметрии задачи дифракции матрица рассеяния дифракционной решетки (размерности 4×4) будет иметь лишь 6 уникальных элементов. Обозначим ρ и ρ' элементы, описывающие дифракцию падающей сверху волны I (см. рис. 1) в 0 -й и -1 -й отраженные порядки дифракции, а τ и τ' — элементы, описывающие дифракцию этой волны в 0 -й и -1 -й прошедшие порядки (распространяющиеся в диэлектрическом слое). В силу симметрии те же элементы будут описывать дифракцию волны с комплексной амплитудой I' (рассмотрение этой волны необходимо для применения формализма матрицы рассеяния). Наконец, элементы r и r' описывают отражение волн J и J' , падающих на решетку со стороны волноводного слоя (пропускание этих волн также описывается коэффициентами τ и τ' в силу взаимности). Анализируя коэффициенты отражения (комплексные амплитуды 0 -го и -1 -го порядков дифракции) всей структуры, состоящей из решетки, слоя и зеркала, можно показать, что при выполнении определенных условий, накладываемых на описанные выше элементы матрицы рассея-

ния дифракционной решетки, можно за счет выбора толщины диэлектрического слоя h (рис. 1) направить всю энергию падающей волны в -1 -й или в 0 -й отраженные порядки. В частности, необходимое и достаточное условие возможности получения полного отражения в -1 -м порядке дифракции имеет вид

$$|\rho| \geq |\rho r - (\tau^2 + \tau'^2)/2|. \quad (1)$$

Аналогичное необходимое и достаточное условие может быть также получено для полного отражения в 0 -м порядке дифракции.

С учетом свойств унитарности матрицы рассеяния дифракционной решетки можно показать, что оба описанных выше необходимых и достаточных условия выполняются при выполнении равенства $|\tau| = |\tau'|$, являющегося, таким образом, достаточным условием возможности направить всю энергию падающей волны в 0 -й или -1 -й отраженные порядки дифракции структуры. Более того, анализ свойств структуры показывает, что при выполнении более «сильного» равенства $\tau = \pm\tau'$ в ней также существуют связанные состояния в континууме (моды с бесконечной добротностью, не вытекающие из структуры несмотря на наличие открытых каналов рассеяния).

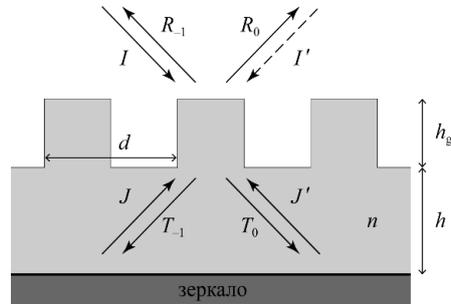


Рис. 1. Геометрия исследуемой структуры, состоящей из дифракционной решетки, диэлектрического слоя и зеркала, и волны, падающие на дифракционную решетку и рассеянные ей.

Результаты численного моделирования с помощью метода фурье-мод, являющегося одним из наиболее развитых методов численного решения уравнений Максвелла в задачах дифракции на периодических структурах (не приведены здесь для краткости), полностью подтверждают справедливость полученных условий для возможности получения полного обратного отражения, полного зеркального отражения и формирования связанных состояний в континууме за счет выбора толщины диэлектрического слоя, разделяющего дифракционную решетку и зеркало.

Работа выполнена за счёт гранта РФФИ № 22-12-00120.

Список литературы

1. D. Rittenhouse Explanation of an optical deception // Trans. Amer. Phil. Soc., vol. 2, p. 37, 1786.
2. S. Collin Nanostructure arrays in free-space: optical properties and applications // Rep. Prog. Phys., vol. 77, p. 126402, 2014.
3. N. Bonod, J. Neauport Diffraction gratings: from principles to applications in high-intensity lasers // Adv. Opt. Photon., vol. 8, p. 156, 2016.
4. L. Li Internal mechanism of perfect-reflector-backed dielectric gratings to achieve 100% diffraction efficiency // J. Opt. Soc. Am. A, vol. 41, p. 252, 2024.

ЭЛЕКТРОУПРАВЛЯЕМ ЛАЗ В МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОМ МИКРОРЕЗОНАТОРЕ

Д. С. Бузин^{1,2*}, П. С. Панкин^{1,2}, В. С. Сутормин^{1,2}, Г. А. Романенко³,
С. В. Неделин^{1,5}, Н. А. Золотовский^{1,5}, И.А. Тамбасов^{1,4,5}, С. Я. Ветров^{2,1}, И.В. Тимофеев^{1,2}

¹Институт физики им Л.В Киренского, ФИЦ КНЦ СО РАН
660036, Российская Федерация, Красноярск, ул. Академгородок, 50, строение № 38
*E-mail: d.buzin@iph.krasn.ru

²Сибирский федеральный университет
660074, Российская Федерация, Красноярск, ул. Киренского, д. 28
³Физико-технический факультет, Университет ИТМО,
197101, Российская Федерация, Санкт-Петербург, ул. Ломоносова, д. 9

⁴Сибирский государственный университет науки и технологий
660037, Российская Федерация, Красноярск, пр-кт им. газеты Красноярский рабочий, д. 31
⁵ООО "Научно-производственная компания "Спецтехнаука"
660043, Российская Федерация, Красноярск, ул. Чернышевского, 67

Микролазеры являются неотъемлемой частью оптоэлектронных устройств. Важным свойством микролазера является электрическое управление лазерной генерацией. В настоящей работе исследуется микролазер на основе металл-диэлектрического микрорезонатора с анизотропным дефектным слоем. Прикладывая напряжение к дефектному слою, можно управлять положением мод и тем самым управлять лазерованием такой структуры.

Микролазер является одним из основных устройств фотоники и оптоэлектроники. На данный момент были исследованы микролазеры на основе диэлектрического одномерного фотонного кристалла (ФК) с анизотропным дефектным слоем. Добавление красителя в дефектный слой позволяет такой структуре лазеровать на длине волны дефектной моды [1]. В данной работе исследован микролазер на основе металл-диэлектрического микрорезонатора.

Была изготовлена серия образцов микрорезонаторов с дефектным (резонаторным) слоем из жидкого кристалла (ЖК), допированного красителем. Для изготовления образцов использовались серебряное непрозрачное и ФК полупрозрачное зеркала. Толщина серебра составляла 200 нм. ФК-зеркало состояло из 5 пар чередующихся слоев нитрида кремния (Si_3N_4) и диоксида кремния (SiO_2), осажденных на стеклянные подложки методом плазменно-химического осаждения из газовой фазы (PECVD). Толщины слоев Si_3N_4 и SiO_2 составляли 60 и 86 нм, соответственно. Два зеркала были склеены с помощью УФ-клея, который содержал сферические спейсеры размером 5 мкм, для задания толщины дефектного слоя. Зазор между зеркалами заполнялся нематическим ЖК 4-н-пентил-4'-цианобифенил (5ЦБ) с добавкой красителя Ruyromethene 567. Весовая концентрация Ruyromethene 567 в 5ЦБ составляла 0,2%. Для ориентации молекул ЖК на зеркалах предварительно наносились полимерные пленки из поливинилового спирта методом центрифугирования с использованием установки Spin Coater HO-TH-05 (HOLMARC), а затем они однонаправленно натирались на установке Rubbing Machine HO-IAD-BTR-01 (HOLMARC) для задания оси легкого ориентирования.

На рисунке 2 показан спектр, соответствующий параллельной ориентации оптической оси ЖК и анализатора. Из спектра видно, что в области, соответствующей полосе испускания красителя (от 540 нм до 600 нм) происходит усиление выхода люминесценции на длинах волн, соответствующих микрорезонаторным модам. При достижении порогового значения мощности накачки, происходит лазерная генерация, сопровождающаяся характерным резким нелинейным усилением сигнала люминесценции только на определенной длине волны одной из мод.

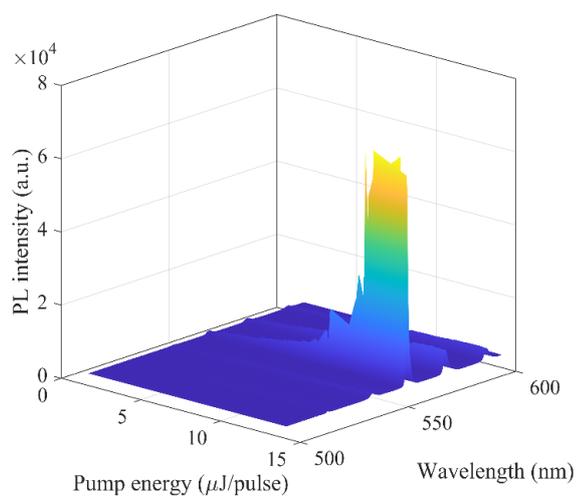


Рис. 2. Спектр фотолюминесценции (PL – photoluminescence) микрорезонатора в зависимости от энергии накачки (Pump energy).

Наличие жидкокристаллического слоя в такой структуре позволяет управлять лазерной генерацией, прикладывая к дефектному слою внешнее поле. Это дает возможность применения такой структуры в различных оптоэлектронных устройствах.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда в рамках гранта № 22-42-08003.

Список литературы

1. R. Ozaki, Y. Matsuhisa, M. Ozaki, et.al. Electrically tunable lasing based on defect mode in one-dimensional photonic crystal with conducting polymer and liquid crystal defect layer // Applied physics letters., vol. 84 (11), pp. 1844-1846., 2004.

МУЛЬТИСТАБИЛЬНОСТЬ ЭКСИТОН-ПОЛЯРИТОНОВ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОМ МИКРОРЕЗОНАТОРЕ

О. А. Дмитриева^{1,2}*, Н.А. Гиппиус², С. Г. Тиходеев^{1,2,3}

¹ *Московский государственный университета имени М.В.Ломоносова
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1*

² *Сколковский институт науки и технологий, 121205, Российская Федерация, Москва, Большой бульвар
д.30, стр.1*

*E-mail: dmitrieva.oa16@physics.msu.ru

² *Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, 119991 ГСП-1, Российская
Федерация, Москва, ул. Вавилова, д. 38*

В данной работе теоретически изучалось возникновение явлений би- и мультистабильности в хиральном полупроводниковом брэгговском микрорезонаторе с квантовыми ямами при воздействии сильной резонансной оптической накачки. Результаты исследования показали возможность наблюдения мультистабильности при высокой интенсивности резонансной оптической накачки и подтвердили допустимость анализа этой системы в приближении среднего поля.

Теоретически исследовано возникновение явлений би- и мультистабильности в полупроводниковом брэгговском микрорезонаторе с квантовыми ямами при воздействии сильной резонансной оптической накачки.

Объект исследования — брэгговский микрорезонатор с 12 квантовыми ямами в активной области. Для получения хиральной структуры на его верхнем зеркале был изготовлен фотонный кристалл, представляющий собой протравленную в зеркале квадратную решётку микропилларов с симметрией C_4 .

Ранее было установлено [1-3], что подобные микрорезонаторы с квантовыми ямами могут проявлять би- и мультистабильность при увеличении интенсивности оптической накачки из-за синего сдвига экситонной частоты в результате взаимодействия между экситонами. Известен подход для описания этих явлений с помощью кубического уравнения для экситонной плотности. С его помощью показано, что в случае хирального микрорезонатора наблюдается би- и мультистабильность степени циркулярной поляризации экситонной плотности [4].

В настоящей работе проведен самосогласованный расчёт, учитывающий неоднородность распределения поля и экситонной плотности в исследуемой системе. Для расчёта выбиралось некоторое начальное распределение экситонной плотности в системе и на его основе определялись значения синего сдвига экситонной частоты, которые задавали диэлектрическую проницаемость слоёв системы. По известным значениям диэлектрической проницаемости проводился расчёт распределения поля в системе с помощью Фурье-модального разложения и метода матрицы рассеяния [5,6]. Этот метод позволяет найти отклик системы в линейном случае, нелинейность же учитывается в изменённых значениях диэлектрической проницаемости. По распределению электрического поля в системе для каждой квантовой ямы находилась соответствующая экситонная плотность. Далее методом Ньютона минимизировалось отклонение полученной в результате этого расчёта экситонной плотности от начальной.

Было получено распределение экситонной плотности для различных уровней интенсивности накачки. Показано, что отклик, рассчитанный с учётом неоднородности поля в системе, хорошо соответствует приближению среднего поля с небольшим отличием порядка 4% (см. рис. 1).

Таким образом, исследование продемонстрировало возможность возникновения мультистабильности в полупроводниковом брэгговском микрорезонаторе с квантовыми ямами при увеличении интенсивности оптической накачки и показало, что анализ этой системы в приближении среднего поля является допустимым.

Работа поддержана грантом РФФ № 22-12-00351.

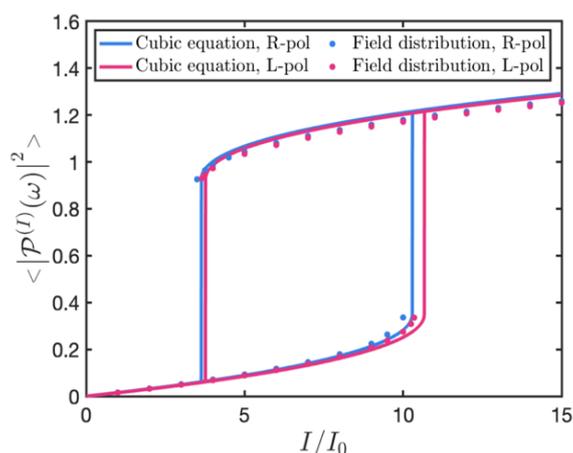


Рис. 1. Зависимость средней по объёму экситонной интенсивности от интенсивности накачки в правой (синим) и левой (красным) циркулярной поляризации, рассчитанная двумя методами: в приближении однородного поля — линии, с самосогласованным учётом неоднородности — точки.

Список литературы

1. N. A. Gippius, S. G. Tikhodeev, V. D. Kulakovskii et al. // *Europhys.Lett.*, vol. 67, p. 997 (2004)
2. N.A. Gippius, I. A. Shelykh, D. D. Solnyshkov et al. // *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98. p. 236401 (2007)
3. С.С. Гаврилов // *УФН*, т. 190, с. 137 (2020)
4. Дмитриева О.А., Гиппиус Н.А., Тиходеев С.Г. // *Доклады РАН. Физика. Технические науки*, т. 510, с. 10–15 (2023)
5. Whittaker D.M., Culshaw I.S. // *Phys. Rev. B*, vol. 60 (15), pp. 2610–2618 (1999)
6. Tikhodeev S.G., Yablonskii A.L., Muljarov E.A., Gippius N.A., Ishihara T. // *Phys. Rev. B*, vol. 66 (4), p. 045102 (2002)

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ДВУЛУЧЕПРЕЛОМЛЕНИЯ В КРИСТАЛЛЕ 1%MgO:LiTaO₃ С ПЕРИОДИЧЕСКОЙ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРОЙ

А.В. Дубиков, Д.Е. Бельская, Е.Н. Савченков

Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники 634050, Российская Федерация, Томск, пр. Ленина, 40
*E-mail: bigtriks@gmail.com

Представлены результаты исследования температурной зависимости двулучепреломления в стехиометрическом кристалле 1%MgO:LiTaO₃ для длины волны 632.8 нм в диапазоне температур от 30 до 110 °С. Разработанная экспериментальная установка обеспечивала цифровое отображение температуры образца с дискретностью 0.04 °С. Получено, что температура, при которой реализуется нулевое двулучепреломление (изотропная точка), $T_i=69.31$ °С, отличается от известного значения $T_i = (98.0 \pm 0.2)$ °С для нелегированного кристалла танталата лития.

С использованием методики, описанной в [1] для различающихся по стехиометрическому составу нелегированных кристаллов танталата лития, для образца 1%MgO:LiTaO₃ исследованы зависимости двулучепреломления от температуры в диапазоне от 30 до 110 °С.

Схема разработанной экспериментальной установки иллюстрируется рис. 1. Световой пучок He-Ne лазера 1 с длиной волны $\lambda = 632.8$ нм и вектором линейной поляризации, ориентированным под углом 45° к полярной оси Z исследуемого образца 3, фокусировался на его входной грани $y = 0$ линзой 2 с фокусным расстоянием $F = 290$ мм. Кристалл 1%MgO:LiTaO₃ со сформированной в нем периодической регулярной доменной структурой (РДС) с ненаклонными стенками Y-типа с пространственным периодом $\Lambda = 7.99$ мкм размещался на элементе Пельтье 10, управление током которого осуществлялось стабилизированным источником постоянного напряжения.

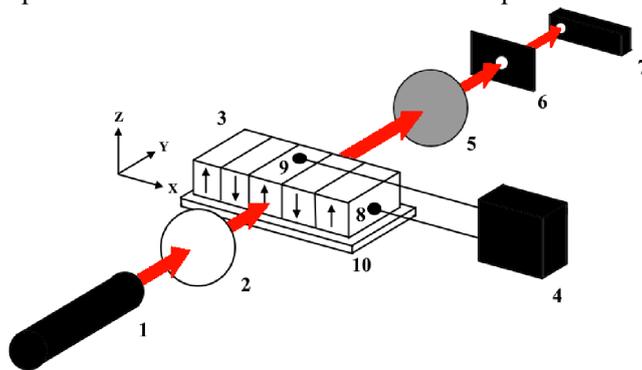


Рис. 1. Схема экспериментальной установки: 1 – He-Ne лазер; 2 – цилиндрическая линза; 3 – кристалл 1%MgO:LiTaO₃ с РДС с периодом 7,99 мкм; 4 – индикатор температуры; 5 – поляризатор; 6 – диафрагма; 7 – измеритель мощности; 8, 9 – датчики температуры; 10 – элемент Пельтье.

Температура образца отображалась с дискретностью 0.04 °С цифровыми индикаторами, расположенными в блоке 4, в котором также располагалась схема обработки токов от контактирующих с гранями кристалла двух полупроводниковых термодатчиков 8 и 9. Она регистрировалась как среднее значение для каждого измерения. После кристалла излучение проходило через скрещенный анализатор 5 и диафрагму 6, отсекающую рассеянное излучение, и его мощность отображалась измерителем 7 типа THORLABS-100D для каждого среднего значения температуры, как $P(T)$.

Зарегистрированные экспериментально 37 значений для $P(T)$ при температурах от 31.04 до 100.42 °С аппроксимировались теоретической зависимостью [1]

$$P(T) = P_0 \sin^2 \left[\frac{\pi d}{\lambda} \delta n(T) \right], \quad (1)$$

где $d = 1.9$ мм – толщина кристалла вдоль оси Y и $\delta n(T) = n_o(T) - n_e(T)$ – его двулучепреломление, определяемое температурными зависимостями обыкновенного (n_o) и необыкновенного (n_e) показателей преломления. При этом предполагалось, что сформированная в кристалле РДС не влияет на зависимость (1), характерную для монокристаллического образца. Для подгонки (1) под экспериментальные данные использовался метод наименьших квадратов и следующие два разложения в степенной ряд функции $\delta n(T - T_i)$ для температур $T < T_i$ и $T > T_i$, где T_i – температура изотропной точки, в которой обыкновенный и необыкновенный показатели преломления становятся равными: $n_o(T_i) = n_e(T_i)$:

$$\delta n_b(T) = A_{1b}(T - T_i) + A_{2b}(T - T_i)^2 + A_{3b}(T - T_i)^3 + A_{4b}(T - T_i)^4, \quad (2)$$

$$\delta n_u(T) = A_{1u}(T - T_i) + A_{2u}(T - T_i)^2 + A_{3u}(T - T_i)^3 + A_{4u}(T - T_i)^4. \quad (3)$$

Расчеты по формулам (2) и (3) показали, что для исследуемого образца 1%MgO:LiTaO₃ температура изотропной точки имеет значение $T_i=69.31$ °С, а также позволили определить коэффициенты $A_{nb,nu}$ (табл. 1), соответствующие в разложении степеням $n = 1, 2, 3$ и 4 и температурам ниже (индекс b) и выше (индекс u) изотропной точки.

Таблица 1

Коэффициенты разложения в (2) и (3) для температурной зависимости двулучепреломления

Коэффициенты разложения для $T < T_i$	$A_{1b}, 10^{-5} K^{-1}$	$A_{2b}, 10^{-8} K^{-2}$	$A_{3b}, 10^{-9} K^{-3}$	$A_{4b}, 10^{-11} K^{-4}$
		-5.33829	-2.074	1.62589
Коэффициенты разложения для $T > T_i$	$A_{1u}, 10^{-5} K^{-1}$	$A_{2u}, 10^{-8} K^{-2}$	$A_{3u}, 10^{-9} K^{-3}$	$A_{4u}, 10^{-11} K^{-4}$
	-5.68261	17.62	-11.1076	15.8229

Значение T_i для исследуемого образца 1%MgO:LiTaO₃ отличается от величины $T_i = (98.0 \pm 0.2)$ °С, приведенной в [1] для нелегированного кристалла LiTaO₃ с концентрацией Li₂O, составляющей 49.96 мол.%. Такое отличие может быть обусловлено другим значением содержания Li₂O в кристалле 1%MgO:LiTaO₃, которое из соотношений, представленных в [1], может быть оценено как 49.79 мол.%.

Работа выполнена в рамках Госзадания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации на 2023-2025 годы (задание FEWM-2023-0012).

Список литературы

1. C. Bäumer, D. Berben, K. Buse, H. Hesse, J. Imbrock. Determination of the composition of lithium tantalate crystals by zero-birefringence measurements // Appl. Phys. Lett., vol. 82, pp. 2248 (2003).

ПОДГОТОВКА ПОВЕРХНОСТИ Si(100) ДЛЯ МОЛЕКУЛЯРНО-ЛУЧЕВОЙ ЭПИТАКСИИ A3B5

М.Ю. Есин*, А.С. Дерябин, С.А. Тийс, А.В. Колесников, А.И. Никифоров

¹Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН
630090, Российская Федерация, Новосибирск, пр. ак. Лаврентьева, 13

*E-mail: yesinm@isp.nsc.ru

В данной работе проведены исследования попарного сближения ступеней поверхности при росте молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) Si и их релаксации на подложках Si(100) с отклонением до $0,5^\circ$. Представлены результаты временных зависимостей интенсивностей сверхструктурного рефлекса $I_{1 \times 2}$ дифракции быстрых электронов (ДБЭ) в диапазоне температур 350–650°C. По временным зависимостям интенсивностей ДБЭ была измерена интенсивность $I_{1 \times 2}$ на стационарном уровне, которая соответствует минимальной ширине T_A -террасы, и время выхода $I_{1 \times 2}$ на стационарный уровень. После прерывания потока атомов Si было измерено время релаксации ступеней или восстановление поверхности в исходное состояние. Полученные экспериментальные результаты минимальной ширины A-террасы, достигаемой при сближении моноатомных A- и B-ступеней, согласуются с моделью [Ю.Ю. Эрвье и др. Изв. Вуз. Физ. 66 4 2023] учитывающей наличие адсорбированных частиц в виде одиночных атомов при относительно небольших значениях энергии образования адатома кремния на террасе (0,8–0,85 эВ). Однако, как показывают результаты сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) атомной структуры излома, структурная единица в изломе имеет не отдельный атом, а два димера, что наводит на мысль о том, что атомы выходят из ступеней в виде димеров. Следует, что адсорбционный слой может содержать не только одиночные атомы (мономер), но и двухатомные молекулы (димеры), что необходимо учесть в дальнейшем развитии модели сближения ступеней.

Выращивание высококачественных полупроводников III-V на Si является ключевым путем к монолитной интеграции устройств III-V на фотонных интегральных схемах (ФИС) или традиционных интегральных схемах (ИС) на основе Si [1]. Для получения высококачественных слоев III-V на Si необходимо решить основную проблему – это высокая плотность различных дефектов, которая образуется по ряду различных причин [1]. Например, таких как большое несоответствие параметров решеток, рост полярного полупроводника на неполярной подложке и различный коэффициент теплового расширения. В результате роста полярного полупроводника на неполярной подложки формируются антифазные границы (АФГ) на моноатомных ступенях поверхности Si(100) [1]. Поэтому для гетероэпитаксии соединений III-V на кремнии используются подложки с углом отклонения $\theta > 2^\circ$, так как на таких поверхностях формируется стабильная однодоменная поверхность с двухслойными ступенями, которая позволяет избежать проблемы формирования АФГ на ступенях. Важно отметить, что в промышленных масштабах наиболее широко применяются подложки Si(100) с малым отклонением до $0,5^\circ$. В связи с этим есть необходимость исследований по формированию однодоменной поверхности Si(100) с двухслойными ступенями на подложках с отклонением до $0,5^\circ$.

Как известно, на поверхности Si(100), по причине анизотропной реконструкции (2×1) и впоследствии отличного тензора поверхностного натяжения на соседних террасах, существует отталкивающее упругое взаимодействие между ступенями [2]. В предположении достаточно сильного потенциала взаимодействия ступеней, полное попарное сближение ступеней маловероятно. Таким образом, при росте Si на Si(100) формируется некоторая минимальная ширина T_A -террасы, которая увеличивается с повышением температуры подложки. Такое поведение температурной зависимости минимальной ширины T_A -террасы объясняется увеличивающимся влиянием упругого отталкивающего взаимодействия на расположение ступеней. Упругое отталкивающее взаимодействие между ступенями, вероятно, реализуется через обменный поток атомов между ступенями. Обменный поток имеет термодинамическую природу и отражает стремление к энергетически выгодной двухдоменной структуре поверхности [3]. Его роль возрастает с уменьшением скорости роста и увеличением температуры, т.е. с уменьшением пере-

сыщения в адсорбционном слое и протеканием роста в условиях, более близких к равновесию [3]. Как следствие, стационарная ширина А-террасы увеличивается с уменьшением скорости роста и повышением температуры подложки [3].

В данной работе проведены исследования сближения ступеней поверхности при эпитаксиальном росте Si и их релаксации на подложке Si(100) методом дифракции быстрых электронов (ДБЭ). В процессе роста молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ) Si на Si(100) и после прерывания роста были записаны временные зависимости интенсивности $I_{2 \times 1}$ сверхструктурного рефлекса ДБЭ, которые позволили оценить состояние поверхности Si(100). Полученные экспериментальные результаты минимальной ширины А-террасы, достигаемой при сближении моноатомных А- и В-ступеней согласуются с моделью учитывающей наличие адсорбированных частиц в виде одиночных атомов [3]. Однако, как показывают результаты сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) атомной структуры излома, адсорбционный слой может содержать не только одиночные атомы (мономеры), но и двухатомные молекулы (димеры) на поверхности, что необходимо будет учесть в дальнейшем развитии модели сближения ступеней [3].

Список литературы

1. J.-S. Park, M. Tang, S. Chen et.al. Heteroepitaxial Growth of III-V Semiconductors on Silicon // Crystals, Vol. 10, Issue 12, 1163, 2020.
2. В.И. Марченко, А.Я. Паршин. Об упругих свойствах поверхности кристаллов // ЖЭТФ, Т. 79, Вып. 1(7), стр. 257-260, 1980.
3. Ю.Ю. Эрвье, М.Ю. Есин, А.С. Дерябин и др. Сближение ступеней на поверхности Si(100): эксперимент и моделирование // Изв. Вуз. Физ. Т. 66, №4, 2023.

ПАРАМЕТРЫ НАВЕДЕННОЙ ТЕРМОЛИНЗЫ В УСЛОВИЯХ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ГЕНЕРАЦИИ В ДИАПАЗОНЕ ОТ 3 ДО 5 МКМ

А.Ш. Габдрахманов¹, Е.С. Слюнько¹, С.Н. Подзывалов¹, А.Б.Лысенко¹, А.Ю. Кальсин¹

¹*Национальный исследовательский Томский государственный университет
634050, Российская Федерация, Томск, проспект Ленина, д. 36
E-mail: realist98937@mail.ru

Найдена зависимость пороговой мощности от длины резонатора для генерации ZnGeP_2 . Найдены зависимости значений фокусного расстояния термонаведённой линзы в кристалле ZnGeP_2 от мощности накачки. Определена зависимость мощности генерации от мощности накачки. Найдена зависимость параметра стабильности резонатора от фокусного расстояния наведенной термолинзы

Повышение мощности и эффективности лазерных систем среднего ИК-диапазона остается одной из основных проблем современной лазерной физики и технологии, что обусловлено потребностью в таких системах при решении множества научных и прикладных задач. К таким задачам относятся: дистанционный газовый анализ и мониторинг атмосферы [1], обработка материалов [2], исследование новых физических эффектов [3], генерация аттосекундных рентгеновских импульсов и ускорение частиц, и многие другие. Цель данной работы заключалась в получении информации о параметрах термолинзы, наводимой в монокристалле ZnGeP_2 при воздействии на него импульсно-периодического излучения накачки высокой мощности. Современные технологии роста монокристаллов ZnGeP_2 и пост-ростовые обработки материала позволяют создавать нелинейные кристаллы с низким коэффициентом поглощения на длине волны 2,1 мкм - всего $0,02 \text{ см}^{-1}$. Это объясняется высокой теплопроводностью монокристалла ZnGeP_2 , которая составляет $0,18 \text{ Вт}\cdot\text{см}^{-1}\text{К}^{-1}$. Благодаря этому, вероятность нагрева окружающей среды до температур, способных привести к деградации материала, является невысокой.

Общий и/или локальный нагрев кристалла при поглощении излучения накачки или генерации параметрических генераторов света (ПГС) может приводить к термонаведённым изменениям показателя преломления нелинейно-оптического элемента. В частности, возможно формирование термолинзы в кристалле ZnGeP_2 , которая влияет на пространственный профиль пучков накачки и генерации ПГС (фокусируя их с увеличением плотности энергии до критического значения). Другим проявлением локального тепловыделения и нагрева нелинейного элемента является формирование в объёме кристалла механически напряженных областей, служащих источниками свободных электронов.

С использованием разработанной оптической установки мы провели эксперимент по определению наводимой в кристалле термолинзы в процессе генерации параметрического излучения, результаты которого представлены далее. В первую очередь экспериментально были получены значения пороговой мощности $P_{\text{пг}}=4,15 \text{ Вт}$. На рис. 1 показана зависимость выходной мощности ПГС генерации и теплового фокусного расстояния от мощности накачки ZnGeP_2 .

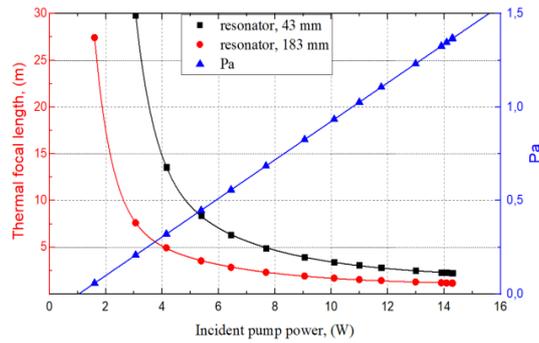


Рис. 1. Зависимость выходной мощности ПГС генерации и теплового фокусного расстояния от мощности накачки $ZnGeP_2$.

Полученная зависимость описывается сигмоидальным законом, пороговая мощность накачки, при которой наблюдалась генерация, составила $P_{th}=4,15$ Вт. При этом, в ходе эксперимента, наблюдалось насыщение выходной мощности ПГС генерации и при мощности накачки $P_p=14,3$ Вт, мощность переставала расти. Мы связываем это с эффектом термолинзы в кристалле. Далее система ПГС была использована для экспериментального определения значений наведенной в кристалле термолинзы.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-79-10193.

Список литературы

1. А.Б. Шигапов, Ш.Д. Ярхамов. К определению размеров дисперсных частиц путём изменения параметров рассеянного излучения // Известия ВУЗов / Авиационная Техника. № 4, с 58–60, 2004.
2. С.В. Половченко, П.В. Чартий. Восстановление функции распределения частиц по размерам с использованием методов лазерного зондирования // Безопасность в техносфере. Т. 3, № 6, С. 37–42, 2014.
3. О. А. Романовский. Методика и результаты поиска информативных длин волн зондирования газовых компонент атмосферы // Прикладная физика. № 1, С. 24-31, 2009.

СПЕКТРЫ ОТРАЖЕНИЯ ФОТОННОГО КРИСТАЛЛА СО СМЕЩЕННЫМ ОТНОСИТЕЛЬНО ЦЕНТРА ДЕФЕКТНЫМ СЛОЕМ В ВИДЕ ЭКСТРАКТА ПИГМЕНТОВ ВЫСШИХ РАСТЕНИЙ

Л.Е. Тырышкина^{1,2,3}, А.В. Шабанов^{1,3}, А.В. Каткова^{1,2}, А.И. Краснов^{1,2}, Н.В. Рудакова^{1,2},
П.С. Панкин^{1,2}, Т.А. Зотина⁴, С.Я. Ветров², И.В. Тимофеев^{1,2}

¹ИФ СО РАН – ФИЦ КНЦ СО РАН, 660036, Российская Федерация, Красноярск
KatAlenaV@iph.krasn.ru

²Сибирский федеральный университет, 660074, Российская Федерация, Красноярск, ул. Киренского,
д.28

³ФИЦ КНЦ СО РАН, 660036, Российская Федерация, Красноярск

⁴Институт биофизики СО РАН, 660036, Российская Федерация, Красноярск

В данной работе исследована асимметричная фотоннокристаллическая структура со смещенным относительно центра резонансным дефектным слоем в виде экстракта пигментов высших растений, демонстрирующая сходство с растительными биологическими структурами. Результаты численного моделирования спектральных характеристик такого микрорезонатора, согласуются с экспериментальными данными. Показано, что асимметрия структуры ФК-зеркал с дефектным слоем влияет на эффективность поглощения света в зависимости от стороны падения излучения. Полученные результаты могут быть применены для создания новых оптических устройств с улучшенными оптическими характеристиками.

Фотонный кристалл (ФК) – это материал с пространственно-периодической структурой, в которой показатель преломления изменяется периодически на масштабе длины волны света. Такие кристаллы за счет своих оптических свойств широко используются в современной фотонике и демонстрируют сходство с живыми биологическими структурами, такими как, стопки дисковидных тилакоидов в хлоропласте [1]. ФК позволяют локализовать электромагнитные волны на дефектах структуры даже при частичном разупорядочении слоев [2]. Возникающее резонансное поглощение света существенно зависит от положения дефекта внутри структуры ФК, представляющей собой микрорезонатор, причем асимметричные микрорезонаторы поглощают световую энергию более эффективно [3]. В данной работе получены экспериментальные спектры отражения асимметричного ФК-микрорезонатора с дефектным слоем в виде экстракта пигментов высших растений, хорошо согласующиеся с результатами численного моделирования с помощью метода матрицы переноса [4].

Экспериментальная установка представлена на рисунке 1: фотография (рис. 1а), схема (рис. 1б), а также показано изображение асимметричного ФК-микрорезонатора с дефектным слоем (рис. 1в). Можно увидеть, что свет от источника излучения (1) по оптоволокну поступает на первый коллиматор (2), далее через образец (3), излучение с помощью второго коллиматора (2) поступает через оптоволокну на спектрометр (4).

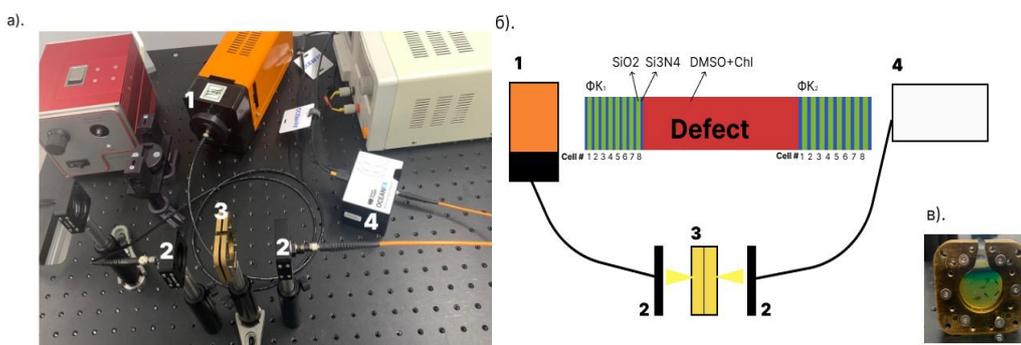


Рис. 1. Экспериментальная установка: а) фотография установки, источник – 1, коллиматор – 2, образец – 3, спектрометр – 4; б) схема установки (на вставке приведена структура асимметричного ФК-микрорезонатора); в) фотография асимметричного ФК-микрорезонатора с дефектным слоем

Микрорезонатор представляет собой два фотоннокристаллических зеркала, отличающихся друг от друга геометрическими параметрами, с резонансным дефектным

слоем между ними (схематическая вставка на рис. 1б). Каждое из ФК-зеркал представляет собой чередующиеся слои нитрида кремния (Si_3N_4) и оксида кремния (SiO_2). Всего 8 пар слоев и один завершающий непарный слой Si_3N_4 . Указанная ФК-структура располагается на стеклянной подложке поверх слоя оксида цинка, допированного алюминием (AZO) толщиной 100 нм. Показатели преломления слоев: $n(\text{SiO}_2) = 1,45$ и $n(\text{Si}_3\text{N}_4) = 2,05$. Толщины слоев первого ФК₁ составляют $\text{SiO}_2 = 140$ нм и $\text{Si}_3\text{N}_4 = 73$ нм. Толщины слоев второго ФК₂ – $\text{SiO}_2 = 149$ нм и $\text{Si}_3\text{N}_4 = 77$ нм. Зазор между ФК-зеркалами заполняется раствором пигментов в диметилсульфоксиде (DMSO). Толщина дефектного слоя составляет $19,48 \pm 0,02$ мкм. Из-за различной толщины слоев ФК полученная структура асимметрична по отношению к падающему на ее грани свету.

С помощью метода матрицы переноса были рассчитаны спектры пропускания, поглощения и отражения ФК структуры для противоположных направлений падения света со стороны ФК₁ либо ФК₂. В отличие от совпадающих спектров пропускания асимметричной ФК-структуры, спектры отражения (рисунок 2) существенно отличаются для различных сторон освещения структуры. Видно, что вблизи области поглощения хлорофилла (660-680 нм) отражение, при прохождении излучения со стороны ФК₂ будет сильнее, чем со стороны ФК₁, то есть поглощение сильнее со стороны ФК₁. Экспериментальные результаты хорошо согласуются с численными расчетами.

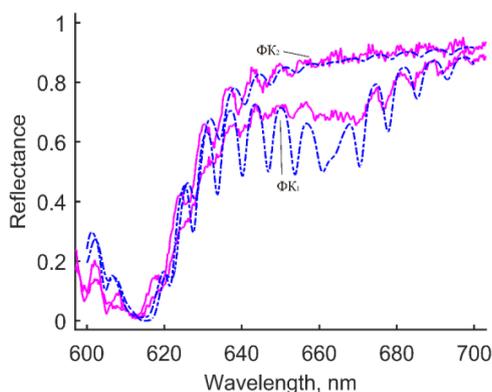


Рис. 2. Спектры отражения ФК-структуры с асимметрично расположенным дефектом: экспериментальные – сплошная малиновая линия; рассчитанные – штрихпунктирная синяя линия

Для понимания поведения спектров отражения асимметричного ФК-микрорезонатора с дефектным слоем в виде экстракта пигментов высших растений были проведены аналитические расчеты с помощью теории связанных мод. Полученные результаты показывают, что спектры отражения и поглощения света зависят от положения дефекта в структуре, а именно, спектры пропускания асимметричной ФК-структуры совпадают при двух противоположных направлениях падения света, в то время как спектры отражения различны в зависимости от стороны освещения структуры.

Работа выполнена в рамках научной тематики Госзадания ФИЦ КНЦ СО РАН.

Список литературы

1. S.-H. Pao, P.-Y. Tsai, C.-I. Peng et al. // Journal of Plant Research. 2018. V. 131. No 4. P. 655-670.
2. A.V. Shabanov, M.A. Korshunov, E.R. Bukhanov // Comput. Opt. 2017. V. 41. No 5. P. 680-686.
3. P. S. Pankin et al. // JOSAB. 2023. V. 40. No 1. P. 87-93.
4. D.W. Berreman // J. Opt. Soc. Am. 1972. V. 62. P. 502.

ФОТОДЕТЕКТОР НА ОСНОВЕ ТАММОВСКОГО ПЛАЗМОН ПОЛЯРИТОНА ДЛЯ БЛИЖНЕЙ ИНФРАКРАСНОЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА

Ю.В. Конов^{1,2*}, Д.А. Пыхтин¹, Р.Г. Бикбаев¹, И.В. Тимофеев¹

¹Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН, обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН
Россия, 660036, Красноярск, ул. Академгородок, д. 50

*E-mail: yurakonov@iph.krasn.ru

²Сибирский федеральный университет
660074, Российская Федерация, Красноярск, ул. Киренского, д. 28

В работе предложен планарный фотодетектор на горячих электронах на основе таммовского плазмон-поляритона, локализованного на границе одномерного фотонного кристалла и пленки титана. Показано, что фоточувствительность предлагаемого устройства достигает 42,6 мА/Вт на длине волны 905 нм.

В 1932 году Игорем Евгеньевичем Таммом было показано, что поверхностные состояния электронов возникают не только между двумя потенциальными барьерами, но и между потенциальным барьером и периодическим потенциалом типа Кронига–Пенни [1]. В этом случае электронная волна оказывается запертой между потенциальным барьером и потенциальной решеткой. В оптике аналогичная ситуация возникает при падении электромагнитной волны на границу металлической пленки и фотонного кристалла (ФК). В этом случае материал с отрицательной диэлектрической проницаемостью выступает в виде потенциального барьера, а ФК работает как потенциальная решетка. В результате уравнение Максвелла сводится к уравнению Гельмгольца, аналогу одноэлектронного уравнения Шредингера для полубесконечного кристалла. В оптике состояние, локализованное на границе металлического слоя и фотонного кристалла, называется таммовский плазмон поляритон (ТПП) [2].

На основе ТПП реализовано множество различных устройств, таких как поглотители [3], лазеры [4], сенсоры [5] и фотодетекторы [6], составляющие приборную базу твердотельных лидаров. В связи с этим в данной работе была предложена модель фотодетектора на горячих электронах на основе ТПП для ближней инфракрасной области спектра. Схематическое изображение структуры представлено на рисунке 1(а). Элементарная ячейка ФК состоит из чередующихся слоев диоксида кремния (SiO₂) и нитрида кремния (Si₃N₄) с толщинами 140 нм и 120 нм, соответственно. На ФК нанесены пленки германия (Ge), диоксида германия (GeO₂), диоксида титана (TiO₂) и титана (Ti) с толщинами 50 нм, 1.5 нм, 1 нм и 5.6 нм, соответственно.

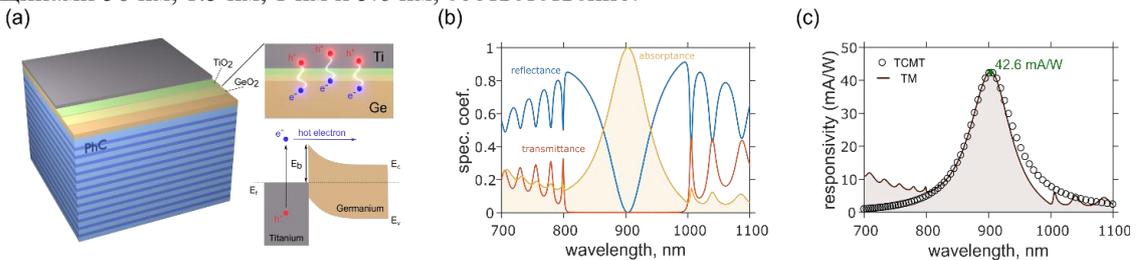


Рис. 1. (а) – схематическое изображение структуры; (б) – спектры поглощения, пропускания и отражения структуры; (с) – фоточувствительность предложенного устройства.

На рисунке 1(б) представлены спектры поглощения, пропускания и отражения предложенного фотодетектора при нормальном падении излучения, рассчитанные методом трансфер-матрицы [7]. Минимум отражения и, как следствие, полное поглощение на длине волны 905 нм, соответствует ТПП, локализованному на границе ФК и пленки титана.

Фоточувствительность устройства была рассчитана с помощью модели Фоулера:

$$R(\omega) = q * A(\omega) * \eta / \hbar\omega, \quad \eta = \frac{(\hbar\omega - \Delta E_b)^2}{4E_f * \hbar\omega}, \quad (1)$$

где q - элементарный заряд; $A(\omega)$ - поглощение на длине волны ТПП; $\hbar\omega$ - энергия фотона; $\Delta E_b = 0.193$ эВ [8] - величина барьера Шоттки; $E_f = 4.33$ эВ [9] - энергия Ферми титана. Результаты расчета представлены на рисунке 1(с) сплошной линией. Видно, что фоточувствительность устройства на резонансной длине волны достигает 42,6 мА/Вт.

Коэффициент поглощения в формуле (1) вблизи резонансной длины волны может быть рассчитан аналитически с помощью временной теории связанных мод:

$$A = \frac{2Y_T Y_{Abs}}{\pi(\nu - \nu_0)^2 + (Y_T + Y_{Abs})^2}, \quad (2)$$

где Y_T - скорость релаксации энергии в канал пропускания пары германий-металл; Y_{Abs} - скорость релаксации энергии в канал поглощения пары германий-металл; ν_0 - частота ТПП, которая может быть определена путем решения дисперсионного уравнения:

$$r_{ab\perp} G^2 e^{ik_{az}d_a} \sin(k_{bz}d_b) + r_{ab\perp}^2 G \sin(k_{bz}d_b - k_{az}d_a) + G \sin(k_{bz}d_b - k_{az}d_a) + r_{ab\perp} e^{-ik_{az}d_a} \sin(k_{bz}d_b) = 0. \quad (3)$$

Фоточувствительность устройства, рассчитанная по формуле (1) с учетом формулы (2), представлена на рисунке 1(с) кружками. Видно, что результаты, полученные двумя разными методами, имеют хорошее согласие.

Работа выполнена в рамках научной тематики Государственного задания ИФ СО РАН.

1. I.E. Tamm // Phys. Zeitschrift Sowjetunion, 733 p., 1932.
2. M. Kaliteevski, I. Iorsh, S. Brand, et.al. Tamm plasmon-polaritons: Possible electromagnetic states at the interface of a metal and a dielectric Bragg mirror // Physical Review B, vol. 76 (16), pp.1996-1998, 2007.
3. G. Yongkang, L. Xueming, L. Hua, et.al. Perfect absorber supported by optical Tamm states in plasmonic waveguide // Optics Express, vol. 19 (19), 18393 p., 2011.
4. C. Symonds, G. Lheureux, J.P. Hugonin, et.al. Confined Tamm Plasmon Lasers // Nano Letters, vol. 13 (7), pp. 3179-3184, 2013.
5. L. Guillaume, A. Stefano, S. Clementine, et.al. Polarization-Controlled Confined Tamm Plasmon Lasers // ACS Photonics, vol. 2 (7), pp. 842-848, 2015.
6. C.-H. Huang, C.-H. Wu, R.G. Bikbaev, et.al. Wavelength and Angle Selective Photodetectors Enabled by Graphene Hot Electrons with Tamm Plasmon Polaritons // Nanomaterials, vol. 13 (4), pp. 693-694, 2023.
7. Yeh Pochi, Electromagnetic propagation in birefringent layered media // Journal of the Optical Society of America, vol. 69, no. 5, p. 742, 1979.
8. G.-S. Kim, S.-W. Kim, S.-H. Kim, et.al. Highly tunable refractive index visible-light metasurface from block copolymer self-assembly // ACS Applied Materials, vol. 8, pp. 35419-35425, 2016.
9. CRC handbook of chemistry and physics/ ed. J. Rumble, London, CRC Press 154p., 2023

МИКРОРЕЗОНАТОРНЫЕ МОДЫ С ТЕМПЕРАТУРНО-УПРАВЛЯЕМОЙ ДОБРОТНОСТЬЮ

А. И. Краснов^{1,2,*}, П. С. Панкин^{1,2}, Г. А. Романенко^{3,4}, В. С. Сутормин^{1,2}, Д. Н. Максимов^{1,2},
С. Я. Ветров^{2,1}, И. В. Тимофеев^{1,2}

¹Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН
660036, Российская Федерация, Красноярск, ул. Академгородок, 50, стр. 38

²Сибирский федеральный университет
660074, Российская Федерация, Красноярск, ул. Киренского, д. 28

* E-mail: akrasnov@iph.krasn.ru

³ Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики

197101, Российская Федерация, Санкт-Петербург, Кронверкский проспект, д. 49

⁴ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого
195251, Российская Федерация, Санкт-Петербург, Улица Политехническая, 29 лит Б

Создан фотонно-кристаллический микрорезонатор с жидкокристаллическим резонаторным слоем. Показано, что можно управлять шириной резонансных линий, путём нагрева образца. Были обнаружены множественные коллапсы резонансных линий, соответствующие оптическим связанным состояниям в континууме. Такие четкие резонансные линии можно использовать для высокоточного измерения температуры.

Связанные состояния в континууме (ССК) — это безызлучательные собственные состояния открытой системы. В данной работе исследуется два типа ССК. Первый тип ССК обусловлен различием в симметрии локализованных и распространяющихся волн — это ССК, защищенное симметрией. Второй тип ССК, известный как ССК типа Фридриха–Винтгена, или случайное ССК, возникает из-за деструктивной интерференции света. ССК нашли применение в различных приложениях: лазеры, волноводы, нанорезонаторы, усиление хирального отклика, нелинейный термооптический отклик, датчики температуры [1-2].

Исследуемый микрорезонатор состоит из двух стеклянных подложек, с напыленными на них диэлектрическими слоями нитрида кремния и диоксида кремния. Слои чередуются с периодом, соизмеримым с длиной волны видимого света, образуя одномерный фотонный кристалл (ФК). В ФК содержится анизотропный дефектный слой, представляющий собой жидкий кристалл (ЖК) 4-циано-4'-пентилбифенил (5СВ).

В данной работе мы измерили температурные зависимости спектра пропускания под углом Брюстера и наблюдали множественные коллапсы резонансных линий, которые указывают на появление оптических связанных состояний в континууме. Полученные зависимости были объяснены теоретически с применением временной теории связанных мод и точного численного метода матрицы переноса Берремана. Обнаружено, что в точке оптического связанного состояния в континууме ширина резонансной линии резко меняется, что можно использовать для датчиков температуры [3].

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, Красноярский краевой фонд поддержки научной и научно-технической деятельности, Правительства Красноярского края, грант № 24-12-20007, <https://rscf.ru/en/project/24-12-20007/>.

Список литературы

1. Koshelev K. L. et al. Bound states in the continuum in photonic structures //Phys.-Usp. – 2023. – Т. 93. – С. 528-553.
2. Gomis-Bresco J., Artigas D., Torner L. Anisotropy-induced photonic bound states in the continuum //Nature Photonics. – 2017. – Т. 11. – №. 4. – С. 232-236.
3. Yusupov I. et al. Chipless wireless temperature sensor based on quasi-BIC resonance //Applied Physics Letters. – 2021. – Т. 119. – №. 19.

ОПТОМАГНИТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ НА ЛОКАЛИЗОВАННЫХ РЕЗОНАНСАХ ФЕРРИТ-ГРАНАТОВЫХ НАНОЧАСТИЦ

Д.М. Кричевский^{1,2}, Д.О. Игнатъева^{1,3}, А.А. Колосветов², П.Е. Зимнякова¹
А.И. Чернов^{1,2}, В.И. Белотелов^{1,3}

¹Российский квантовый центр

121205, Российская Федерация, Москва, ИЦ Сколково, Большой бульвар, д. 30, стр. 1.

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)

141700, Российская Федерация, Долгопрудный, Институтский переулок, д. 9

³Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1.

*E-mail: krichevskii.dm@phystech.edu

Оптические моды в полностью диэлектрических магнитоупорядоченных системах открывают возможности для эффективного управления магнитной динамикой за счет различных оптомагнитных (т.е. обратных магнитооптических) эффектов. В работе обсуждаются особенности обратных магнитооптических эффектов, в частности обратного эффекта Фарадея, в уединенных наночастицах феррит-граната. Показана возможность возбуждения локализованных магнитных колебаний за счет сильной локализации эффективных магнитных полей обратных магнитооптических эффектов внутри наночастиц цилиндрической формы, а также вихревой структуры в сферических наночастицы.

Воздействия фемтосекундных лазерных импульсов на магнитоупорядоченные материалами открыли перспективы для ряда прорывных технологий, таких как нетермическая запись информации, управление магнитным порядком и спиновыми волнами анטיפерромагнетиков [1]. Для множества приложений необходимо использовать бездиссипативные методы возбуждения динамических процессов в магнетиках, например за счет обратных магнитооптических эффектов, создающие в магнитной среде эффективные магнитные поля, величина которых пропорциональна интенсивности света. При этом, пространственное разрешение области воздействия света ограничено дифракционным пределом. Для контроля динамических процессов на наномасштабе активно применяются наноструктуры, поддерживающие различные оптические моды. Такие моды характеризуются собственным распределением электромагнитного поля, которое локализовано внутри структуры. Кроме того, поля мод могут менять пространственное распределение эффективных полей обратных магнитооптических эффектов, что может приводить, например к возможности управлять спектром возбуждаемых спиновых волн.

Среди разнообразия оптических мод, Ми моды наночастиц занимают особое положение. Развитие технологий создания наноразмерных структур позволили создавать полностью диэлектрические наноструктуры, поддерживающие Ми моды. Возбуждение Ми мод в таких системах позволяет усиливать линейные и нелинейные оптические эффекты, за счет сильной локализации электромагнитного поля как в ближайшем ее окружении, так и внутри частицы [2].

В данной работе исследовались особенности обратного эффекта Фарадея в массиве наноцилиндров висмут-железного граната (ФГ) и уединенной наносфере, а также их влияние на магнитную динамика в таких системах.

Квадратная решетка на подложке SiO₂ имела период 900 нм, при этом высота и диаметр наноцилиндров составляли 515 нм 450 нм соответственно. Эффективное магнитное поле обратного эффекта Фарадея для материалов типа ФГ с кубической решеткой определяется векторным произведением:

$$\mathbf{H}^{IFE} = -\frac{g}{M_s} \text{Im}[\mathbf{E}\mathbf{E}^*] \quad (1)$$

В спектрах пропускания системы на ее оптических резонансах наблюдается эффективное поле обратного эффекта Фарадея сильно локализуется в область равную 1/10 от объема наноцилиндра (Рис. 1а). При накачке фемтосекундными лазерными импульсами круговой поляризации в эти резонансы и измерения отклика системы с временным разрешением методом магнитооптической накачки-зондирования наблюдается сложные осцилляции с наличием биений, что говорит о наличии нескольких магнитных мод

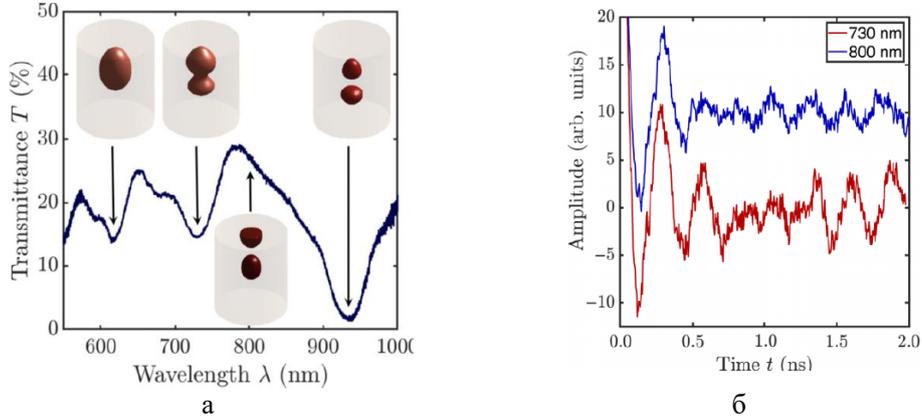


Рис. 1. Спектр пропускания решетки наноцилиндров ФГ и во вставке распределение нормальной компоненты эффективного поля обратного эффекта Фарадея (а). Динамика намагниченности при накачке системы в и вне оптических резонансов (б)

Схожая степень локализации наблюдается и для резонансов Ми сферической наночастицы ФГ диаметром 400 нм. При этом компоненты эффективных полей имеют сложное распределение с доминированием z-компоненты практически на всех резонансах как магнитной, так и электрической природы. В частности, для магнитодипольных резонансов поля представлены на Рис. 2а. Более того, на векторная сумма H_x и H_y полей формирует вихревое состояние (Рис. 2б).

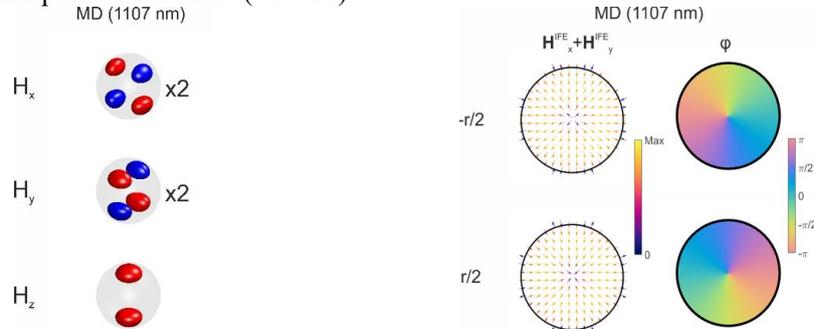


Рис. 2. Распределения компонент эффективных магнитных полей на магнитодипольных Ми резонансах сферической наночастицы ФГ (а). Векторная сумма H_x и H_y компонент, а также топологическая фаза $\varphi = \arctan\left(\frac{H_y}{H_x}\right)$.

Исследование поддержано РФФ №23-12-00310.

Список литературы

1. Němec P. et al. Antiferromagnetic opto-spintronics // Nature Physics. – 2018. – Т. 14. – №. 3. – С. 229-241.
2. Kruk S., Kivshar Y. Functional meta-optics and nanophotonics governed by Mie resonances // Acs Photonics. – 2017. – Т. 4. – №. 11. – С. 2638-2649.

ПЛАЗМОННОЕ УСИЛЕНИЕ УЛЬТРАФИОЛЕТОВОЙ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ZnO НА НАНОЧАСТИЦАХ АЛЮМИНИЯ И ПЛАТИНЫ, ПОЛУЧЕННЫХ В ГАЗОВОМ РАЗРЯДЕ

А. А. Лизунова^{1*}, Д. Мало¹, М. Н. Уразов¹, Е. С. Храмов¹, М. Ф. Керечанина¹, А. К. Новосёлов¹, Е.И. Каменева¹, О. В. Вершинина¹, А. Ф. Санатулина¹, В. В. Иванов¹

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)
141701, Российская Федерация, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д.9.
*E-mail: Lizunova.aa@mipt.ru

В работе представлены исследования влияния размера, морфологии и концентрации металлических наночастиц алюминия и платины, полученных в газовом разряде при различных условиях синтеза, на интенсивность фотолюминесценции нанокристаллов оксида цинка на длине волны 377 нм в пленках. Проведено моделирование по теории Ми фактора усиления люминесценции в ультрафиолетовой области (УФ) эмиттеров с различным квантовым выходом на полидисперсных частицах алюминия и платины с распределениями частиц по размерам, близким к экспериментальным. Показан высокий потенциал использования полученных частиц металлов для усиления сигналов.

На протяжении нескольких десятилетий локализованный поверхностный плазмонный резонанс, наблюдающийся в наночастицах металлов, привлекает многих ученых благодаря возможности практического применения и создания химических и биологических сенсоров, повышения эффективности солнечных батарей и фотодиодов. Резонансный пик поглощения наночастиц серебра и золота находится в видимой и инфракрасных областях, зависит от размера и формы частиц, хорошо изучен и используется для усиления различных электро-магнитных сигналов [1]. В то время как малоисследованными перспективными материалами для исследований плазмонного повышения интенсивности люминесценции в УФ области считаются алюминий и платина, обладающие плазмонным резонансом в диапазоне 200-350 нм [2, 3].

В работе получены наночастицы алюминия и платины в импульсном газовом разряде при эрозии электродов из соответствующих материалов в аргоне высокой чистоты при следующих параметрах: напряжение между электродами 0,6 – 3 кВ, частота следования импульсов 300 – 1000 Гц, поток газа 50 - 1000 мл/мин. Для преобразования морфологии наночастиц платины из агломератов в отдельные крупные частицы проводили дополнительное спекание в трубчатой печи в потоке газа при 985 °С. Для изготовления плазмонных наноструктур с разной оптической плотностью на кварцевом стекле использовали несколько методов. Во-первых, «сухая» аэрозольная печать наночастицами, поступающими напрямую из установки синтеза в фокусирующее сопло и на подложку, во-вторых, из полученных наночастиц изготавливали жидкую суспензию, которая наносилась методами спин-коатинг и микроплоттерной печати на стекло. Для изучения фактора усиления люминесценции на плазмонные наноструктуры осаждали кристаллы оксида цинка с характерной длиной волны эмиссии 377 нм методом микроплоттерной печати.

В ходе работы синтезированы наночастицы алюминия со структурой металлическое ядро – оксидная оболочка со средними размерами от 9 до 30 нм и логнормальным распределением по размерам, наночастицы платины со средними диаметрами от 5 до 145 нм (рис. 1.), обладающие плазмонным резонансом в диапазоне от 210 до 300 нм в зависимости от размера и морфологии. На основе полученных наночастиц сформированы тонкие пленки с оптической плотностью от 0.02 до 0.5.

В результате работы обнаружено, что интенсивность люминесценции ZnO на пленках из наночастиц алюминия и платины зависит от материала наночастиц, толщины плазмонных структур, размера наночастиц и метода формирования пленок. Получено максимальное усиление фотолюминесценции в ультрафиолетовой области до 3 раз на пленках алюминия с оптической плотностью от 0.05 до 0.012 на длине волны возбуждения 300 нм и до 2 раз на пленках платины.

Теоретически показано, что фактор усиления люминесценции на длине волны 377 нм зависит от квантового выхода эмиттера и может достигать 43 и 16 раз в присутствии наночастиц платины (средний диаметр 91 нм) и алюминия (18 нм) соответственно для неидеального люминофора с квантовым выходом 0,01 (Рис. 1). Фактор усиления люминесценции растет с увеличением размера частиц алюминия и платины, а расстояние между эмиттером и наночастицей существенно влияет на сигнал УФ фотолюминесценции и должен составлять от 5 до 20 нм для достижения максимального значения.

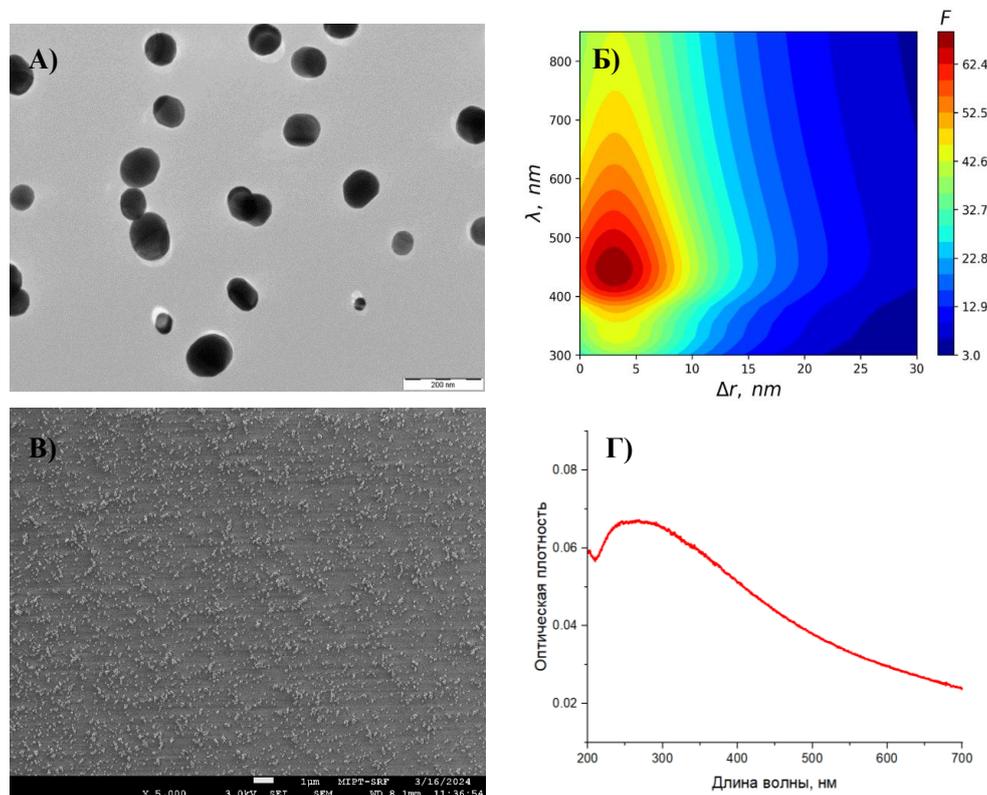


Рис. 1. Изучение свойств наночастиц платины: А) просвечивающая электронная микроскопия наночастиц, полученных в газовом разряде после прохождения печи (985 °С) в потоке 200 мл/мин, Б) расчетные значения фактора усиления люминесценции эмиттера с длиной волны эмиссии 377 нм и квантовым выходом 0.01 в присутствии полидисперсных наночастиц платины со средним размером 91 нм, В) Растровое электронное изображение поверхности пленки из платиновых наночастиц, Г) спектр поглощения соответствующей пленки на основе частиц платины на стекле

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-19-00311, <https://rscf.ru/project/22-19-00311/>.

Список литературы

1. Klimov, V. Nanoplasmonics (1st ed.). Jenny Stanford Publishing. 2013.
2. M.W. Knight, N.S. King, L. Liu, H.O. Everitt, P. Nordlander, N.J. Halas, Aluminum for plasmonics // ACS Nano 8, 834–840, 2014
3. G.V. Naik, V.M. Shalaev, A. Boltasseva, Alternative plasmonic materials: beyond gold and silver // Advanced materials (Deerfield Beach, Fla.) 25, 3264–3294, 2013

РОЛЬ ПОДЛОЖКИ В НАРУШЕНИИ ЗЕРКАЛЬНОЙ СИММЕТРИИ ПЛОСКОЙ МЕТАПОВЕРХНОСТИ И ДОСТИЖЕНИИ МАКСИМАЛЬНОЙ ОПТИЧЕСКОЙ ХИРАЛЬНОСТИ

А. В. Мамонова^{1*}, А. А. Антонов¹, М. В. Горкунов¹

¹*Институт кристаллографии имени А. В. Шубникова, НИЦ «Курчатовский институт»
119333, Российская Федерация, Москва, Ленинский проспект, д. 59
E-mail: alen.mamon@yandex.ru

Резонансные диэлектрические метаповерхности, выборочно взаимодействующие со светом круговой поляризации, перспективны для устройств хиральной оптики нового поколения. Мы рассматриваем новые подходы к достижению максимальной оптической хиральности плоскими метаповерхностями с нарушенной зеркальной симметрией. Найдены простые условия, при которых даже слабое нарушение симметрии за счет наличия прозрачной подложки способно привести к возникновению максимальной оптической хиральности.

Отсутствие плоскостей зеркальной симметрии определяет геометрическую хиральность и остается основным условием сильной оптической хиральности. При создании оптических метаповерхностей нарушение зеркальной симметрии требует особых технологических подходов, позволяющих создавать наноразмерные метаатомы с наклоном или переменной высотой [1-3]. С практической точки зрения гораздо более привлекательны плоские структуры, доступные для традиционной литографии. Наличие прозрачной подложки, с чисто геометрической точки зрения, естественным образом нарушает зеркальную симметрию относительно сторон метаповерхности. Однако это редко рассматривается как важный фактор, поскольку обычные подложки из прозрачных материалов с низким показателем преломления незначительно влияют на оптические свойства метаповерхностей. Мы предлагаем общую стратегию использования подложки для установления сильной и даже близкой к максимальной оптической хиральности. Для полной ясности мы сосредоточимся на метаповерхностях, обладающих вращательной симметрией C_4 , которая запрещает преобразования поляризации при прохождении нормально падающих волн. Анализируя в рамках теории возмущений разложения по резонансным состояниям, мы показываем, что взаимодействие собственных состояний через подложку приводит к возникновению пары противоположных хиральных резонансов. В отсутствие подложки такие состояния обладают пространственной четностью и одинаково сильно способствуют прохождению и отражению волн правой и левой круговых поляризаций. При помещении на подложку состояния сливаются в своеобразные гибриды с хиральным распределением тока смещения и приводят к появлению острых пиков кругового дихроизма с максимальной оптической хиральностью. Метаповерхность остается прозрачной для волн одной круговой поляризации и резонансно блокирует волны противоположной поляризации. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-42-00091, <https://rscf.ru/project/23-42-00091/>

Список литературы

1. M.V. Gorkunov, A.A. Antonov, Y.S. Kivshar, Metasurfaces with Maximum Chirality Empowered by Bound States in the Continuum // Phys. Rev. Lett., vol. 125, p. 093903, 2020.
2. M. V. Gorkunov, A. A. Antonov, V. R. Tuz, et.al. Bound States in the Continuum Underpin Near-Lossless Maximum Chirality in Dielectric Metasurfaces // Adv. Optical Mater., vol. 9, p. 2100797, 2021.
3. X. Zhang, Y. Liu, J. Han, Y.Kivshar, et al. Chiral emission from resonant metasurfaces // Science. 2022. vol. 377, pp. 1215–1218.

ОПТИМИЗАЦИЯ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МЕТАПОВЕРХНОСТЕЙ ДЛЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИ И МЕХАНИЧЕСКИ УПРАВЛЯЕМОЙ ДИФРАКЦИИ

А.В. Мамонова^{1*}, М.В. Горкунов¹, В.В. Артемов¹, И.В. Касьянова¹, И.В. Симдянкин¹,
А.Р. Гейвандов¹, А.А. Ежов², С.П. Палто¹

¹*Институт кристаллографии имени А. В. Шубникова, НИЦ «Курчатовский институт»
119333, Российская Федерация, Москва, Ленинский проспект, д. 59*

²*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Физический факультет
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1*

*E-mail: alen.mamon@yandex.ru

Жидкокристаллические (ЖК) метаповерхности самоорганизуются на ориентирующих слоях натертого полиимида, микроструктурированных с помощью сфокусированного ионного пучка галлия. Оптимизация дизайна метаповерхности позволяет управлять профилем оптической разности хода света, распространяющегося через метаповерхность. Таким образом возможно создание ЖК метаповерхностей, демонстрирующих дифракцию, эффективное аномальное преломление и равномерное распределение света по многим дифракционным порядкам. Все ЖК метаповерхности демонстрируют высокоскоростное (в течение нескольких миллисекунд) переключение между различными режимами работы под действием низковольтных электрических импульсов.

Перестраиваемые гибридные оптические метаповерхности, представляющие собою комбинацию слоев ЖК с диэлектрическими или металлическими метаповерхностями, широко известны и позволяют высокоэффективно управлять световыми сигналами. Мы предлагаем другой метод формирования ЖК-метаповерхностей без твердотельных структур. Облучение сфокусированным ионным пучком галлия натертой поверхности полиимида меняет сцепление ЖК с ней с планарного на вертикальное. Данный метод позволяет контролировать ориентацию ЖК на субмикронных масштабах, обеспечивая неоднородное распределение директора ЖК и приводя к пространственной модуляции его показателя преломления. Оптимизация периодических узоров поверхностной ориентации ЖК позволяет создавать самоорганизующиеся ЖК-метаповерхности, управляющие профилем оптической разности хода света и осуществляющие дифракцию, аномальное преломление и равномерное распределение света по многим дифракционным порядкам.

В частности, сильная дифракция света наблюдается на ЖК метаповерхностях, самоорганизующихся на периодических ориентирующих полосах равной ширины. Аналитическая модель, основанная на одноконстантном приближении теории упругости ЖК, позволяет с высокой точностью описать формирование ЖК метаповерхности и качественно воспроизвести наблюдаемые спектры пропускания и дифракции света [1]. Однако для оптимизации более сложных структур такого приближения недостаточно, и необходимо численное точное решение уравнений упругости и уравнений Максвелла в COMSOL Multiphysics.

Варьируя в ходе оптимизации ширину, положение и количество полос для минимизации среднеквадратичного отклонения дифракционных эффективностей, мы предлагаем метаповерхность, являющуюся ЖК-аналогом решетки Дамманна, равномерно распределяющую синий свет на 11 порядков дифракции [2]. Для высокоэффективного аномального преломления света на определенный угол, его разность хода после прохождения через метаповерхность должна иметь пилообразный профиль. Этого можно достичь за счет суперпериодических структур ориентирующих полос, ширина и период которых плавно меняются. В ходе оптимизации требовалась максимизация эффективности +1 порядка дифракции на длине волны 450 нм. Экспериментальные образцы подтвердили отклонение до 60% падающего синего света в +1-й порядок дифракции [3]. Использование двух дополняющих друг друга оптимизированных суперпериодических структур позволяет удвоить глубину модуляции оптической разности хода и повысить эффективность дифракции +1 порядка в диапазоне длин волн 500-700 нм, при одновре-

менном перенаправлении до 40% синего света в +2 порядок дифракции [4]. При оптимизации двусторонних ЖК метаповерхностей в качестве целевой функции используется эффективность дифракции +1 порядка. Численно рассчитанные спектры пропускания и дифракции хорошо согласуются с наблюдаемыми в эксперименте. Поскольку особенность двухсторонней конструкции позволяет контролировать совмещение подложек, было продемонстрировано возможность механического переключения ЖК метаповерхности. Смещение подложек относительно друг друга на половину периода позволяет перенаправить красный свет из +1 порядка дифракции в -1 [4]. Приложение напряжения амплитудой 3-8 В к метаповерхностям позволяет переключить их из состояния дифракции в состояние пропускания со временем переключения в несколько миллисекунд [5]. Метаповерхности ЖК работают заметно быстрее, чем однородные слои ЖК той же толщины. Приложение напряжения амплитудой 1,5 В к двусторонним метаповерхностям переключает дифракцию между +1 и +2 порядками в синем и красном диапазоне длин волн [6]. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 18-12-00361, <https://rscf.ru/project/18-12-00361/>

Список литературы

1. I.V. Kasyanova, M.V. Gorkunov, V.V. Artemov, et al. Liquid crystal metasurfaces on micropatterned polymer substrates // *Opt. Express*, vol. 26(16), pp. 20258–20269, 2018.
2. A.V. Mamonova, I.V. Simdyankin, I.V. Kasyanova, et al. Liquid crystal metasurfaces for versatile electrically tunable diffraction // *Liquid Crystals*, vol. 50(7–10), pp. 1555–1562, 2023.
3. M.V. Gorkunov, I.V. Kasyanova, V.V. Artemov, et al. Superperiodic liquid-crystal metasurfaces for electrically controlled anomalous refraction // *ACS Photonics*, vol. 7(11), pp. 3096–3105, 2020.
4. M.V. Gorkunov, A.V. Mamonova, I.V. Kasyanova, et al. Double-sided liquid crystal metasurfaces for electrically and mechanically controlled broadband visible anomalous refraction // *Nanophotonics*, vol. 11(17), pp. 3901–3912, 2022.
5. M.V. Gorkunov, I.V. Kasyanova, V.V. Artemov, et al. Liquid-crystal metasurfaces self-assembled on focused ion beam patterned polymer layers: Electro-optical control of light diffraction and transmission // *ACS Appl Mater & Interfaces*, vol. 12, pp.30815–30823, 2020.
6. M.V. Gorkunov, A.R. Geivandov, A.V. Mamonova, et al. Non-Mechanical Multiplexed Beam-Steering Elements Based on Double-Sided Liquid Crystal Metasurfaces // *Photonics*, vol. 9, p. 986, 2022.

УСТОЙЧИВОСТЬ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЕТАПОВЕРХНОСТИ НА ОСНОВЕ ЭЛЕМЕНТОВ ГЮЙГЕНСА

Е.Э. Маслова^{1*}, М.В. Рыбин^{1,2}

¹Университет ИТМО

197101, Российская Федерация, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., д. 49

*E-mail: ekaterina.maslova@metalab.ifmo.ru

²ФТИ им. Иоффе

194021, Российская Федерация, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 26

Мы рассматриваем полностью диэлектрическую метаповерхность, образованную элементами Гюйгенса. Структурные элементы состоят из кремниевых нанодисков, разделенных слоем стекла. Мы исследуем влияние структурного беспорядка и диэлектрической проницаемости нанодисков на фокусирующие свойства метаповерхности, а также на её способность отклонять падающее излучение

С точки зрения управления волновым фронтом одним из наиболее эффективных типов метаповерхностей являются метаповерхности Гюйгенса, реагирующие как на электрические, так и на магнитные поля. Название этого типа метаповерхностей связано с тем, что их конструкция основана на строгой формулировке принципа Гюйгенса. Поверхности Гюйгенса не подвержены потерям на отражение и не ограничиваются только управлением фазой кроссполяризованного излучения. Этот контроль поляризации можно использовать для создания линейной, круговой или эллиптической поляризации без потерь на отражение. Авторы [1] разработали метаповерхность Гюйгенса с эффективностью 86% на частоте 10 ГГц. Эта метаповерхность также продемонстрировала широкую полосу пропускания 3 дБ, равную 24%.

Обычно принцип действия пропускающих метаповерхностей Гюйгенса основан на интерференции между различными (электрическими и магнитными) мультипольными возбуждениями, но поскольку метаповерхность Гюйгенса в классическом смысле реагирует как на электрические, так и на магнитные поля, возникают внутренние различия в природе и дисперсии между электрическими и магнитными режимами будут ограничивать полосу пропускания. Однако в работе [2] было показано, что высокоэффективные широкополосные полностью диэлектрические метаповерхности могут функционировать на основе возбуждения только одного типа диполей. Указанная метаповерхность была построена с использованием дипольной решетки, в которой полное пропускание и изменение фазы на 2π могут быть достигнуты путем регулировки амплитуд и фазовых соотношений между диполями. Предложена теоретическая модель и ее практическая реализация - кремниевая оптическая метаповерхность. Также были продемонстрированы отклонение и фокусировка луча.

Наша работа посвящена исследованию пределов функциональности фокусирующей диэлектрической метаповерхности Гюйгенса. Рассмотрим метаповерхность, аналогичную представленной в работе [2], состоящую из диэлектрических цилиндров, расположенных в узлах квадратной решетки. Мы исследуем прохождение электромагнитной волны через метаповерхность, что позволяет построить спектр прохождения, отражения и поглощения для различных параметров. Полученный спектр позволяет построить диаграмму для метаповерхности и выявить граничные условия перехода от метаповерхности к планарной поверхности.

Проведен анализ отражения, пропускания и поглощения элементарной ячейки диэлектрической метаповерхности (цилиндра с диэлектрической проницаемостью ϵ) на различных длинах волн излучения. Мы показали распределение значений соответствующих параметров в зависимости от длины волны при диэлектрической проницаемости $\epsilon = 12$. Стоит отметить, что значения коэффициента отражения демонстрируют отчетливые пики, достигаемые при $\lambda = 1130$, $\lambda = 1230$ и $\lambda = 1500$ нм соответственно.

На примере элементарной ячейки диэлектрической метаповерхности также исследованы возможности управления волновым фронтом. Управление волновым фронтом с помощью метаповерхности предполагает изменение фазы излучения, рассеянного на

отдельных элементах метаповерхности. Для изучения способности элементарной ячейки метаповерхности изменять фазу рассеянного излучения было изучено отклонение фазы излучения в зависимости от длины волны и диэлектрической проницаемости. Для этого была рассчитана разность фаз между электромагнитным излучением, рассеянным на цилиндре, и электромагнитным излучением, распространяющимся в свободном пространстве.

Исследование поддержано РФФ № 20-79-10316.

Список литературы

1. Pfeiffer C., Grbic A. “Metamaterial Huygens’ surfaces: tailoring wave fronts with reflectionless sheets”, PRL, Vol. 110, No. 19, 197401. 2013.
2. Feng T. et al. “Huygens metasurfaces based on congener dipole excitations”, Phys. Rev. Applied, Vol. 13, No. 2, 021002, 2020.

МОДЕЛИ С ОРБИТАЛЬНОЙ ГИБРИДИЗАЦИЕЙ В ТОПОЛОГИЧЕСКОЙ ФОТОНИКЕ

М. Мазанов^{1*}, М. А. Горлач¹

¹Университет ИТМО

197101, Российская Федерация, Санкт-Петербург, Кронверкский проспект, д.49А

*E-mail: maxim.mazanov@metalab.ifmo.ru

Топологическая фотоника позволяет создавать локализованные состояния света, защищённые от определённых типов беспорядка и неточностей в изготовлении глобальными симметриями системы. В этой работе на примере нескольких одномерных и двумерных моделей мы проанализируем влияние настройки случайных вырождений орбитальных состояний отдельных мета-атомов фотонных структур на их топологические свойства. В зависимости от симметрии решётки и симметрии вырожденных орбиталей, структура может представлять собой псевдоспиновые обобщения известных моделей или поддерживать топологические состояния новых типов. Результаты могут быть использованы для создания более компактных и настраиваемых фотонных топологических изоляторов.

Фотонные топологические состояния представляются перспективными для применения в современных фотонных устройствах за счёт дополнительной устойчивости к беспорядку и неточностям в изготовлении структур различной эффективной размерности. Одними из наиболее известных приложений топологических состояний выступают топологические лазеры с когерентной генерацией из краевых состояний [1], реализованные на платформе массивов кольцевых резонаторов. В то же время, многие фотонные топологические фазы требуют создания сложных решёточных структур с геометрическими искажениями. В этой работе мы проанализируем альтернативный подход к созданию топологических фаз, основанный на тонкой настройке вырождений орбитальных состояний в отдельных мета-атомах, составляющих структуру, на примере двух одномерных и двух двумерных моделей.

Простейшая одномерная модель, основанная на принципе орбитальной гибридизации, представляет собой однородную решётку с вырождением монополюсных (s) и дипольных (p) орбитальных состояний в мета-атомах. Такая модель недавно была реализована на платформе структурированных кремниевых волноводов в телекоммуникационном диапазоне частот [2]. За счёт вырождения орбитальных мод различной симметрии инверсии, их симметричные и антисимметричные линейные комбинации создают анизотропные моды, модулирующие константы связи между волноводами в приближении сильной связи. Такая модуляция констант связи выступает альтернативой геометрическому механизму димеризации, на котором основана известная топологическая модель Су-Шриффера-Хигера [3]. Дополнительная связь с последней моделью возникает в пределе нулевой отстройки констант распространения двух орбитальных мод и равенства связей мод одной симметрии, в котором орбитальная модель распадается на две модели Су-Шриффера-Хигера, одна из которых всегда является топологической и характеризуется инвариантом объёмной поляризации (фазой Зака) [2]. В общем случае, при любом количестве волноводов в решётке на каждом её краю возникает одно топологическое состояние, содержащее определённую суперпозицию монополюсной и дипольной мод. Такие гибридные краевые состояния могут возбуждаться с помощью контролируемого фаз возбуждений во вспомогательных волноводах, создающих в краевом волноводе решётки симметричную либо антисимметричную комбинацию вырожденных мод. При этом, для заданного края решётки только одна комбинация имеет существенное перекрытие с краевым состоянием и не дифрагирует при дальнейшем распространении.

Прямым обобщением данной модели является модель с конкурирующими орбитальными и геометрическими механизмами [4], содержащая более богатый набор топологических фаз. Кроме топологической фазы для однородной s - p орбитальной решётки, в такой модели также существует нестандартная фаза с парой краевых состояний с сов-

падающими волновыми числами на каждом краю решётки. Такая фаза характеризуется новым инвариантом – поляризацией Ванье центров, представляющим собой сумму объёмных поляризаций двух Ванье-подпространств, выделенных из двух заселённых объёмных блоховских зон. Существование такой нестандартной фазы было подтверждено в эксперименте на платформе фотонных молекул [4] – пар близко расположенных оптических волноводов с настраиваемым контрастом показателя преломления – путём наблюдения двухступенчатой зависимости интенсивности, локализованной на краю решётки, от геометрической димеризации решётки. По мере изменения димеризации, система переходит из тривиального состояния без краевых состояний в первое топологическое состояние с возмущением одного краевого состояния, а затем во второе топологическое состояние с возмущением двух краевых состояний на одном краю.

Топологические фазы нового типа также были обнаружены в двумерных волноводных решётках с вырождением мод различной симметрии инверсии. Так, локальное вырождение монополюсной и октупольной мод в однородной решётке кагоме индуцирует новую топологическую фазу высокого порядка объёмно-мультиполюсной природы с угловыми состояниями, локализованными на тупых углах конечной решётки [5]. В этом случае операторы координат $\hat{P}\hat{x}\hat{P}$ и $\hat{P}\hat{y}\hat{P}$, спроецированные на заселённые зоны с помощью соответствующего проектора \hat{P} , не коммутируют, так что Ванье-центры и объёмная поляризация не определены. Инвариантом в этом случае может служить эффективный угловой заряд – величина, пропорциональная суммарной нормированной интенсивности заселённых состояний на углу решётки.

Вырождение дипольной и квадрупольной мод в треугольной решётке создает топологическую фазу высокого порядка объёмно-дипольной природы, отличающуюся от топологической фазы деформированной шестиугольной решётки [6] настраиваемостью и меньшим числом мета-атомов.

Таким образом, настройка вырождения орбитальных мод различной симметрии позволяет получить краевые и угловые топологические состояния новых типов в одномерных и двумерных решётках, соответственно. Взаимодействие орбитального и геометрического механизмов также может приводить к формированию новых топологических фаз с увеличенной плотностью топологических состояний. Предложенный метод может быть использован для создания фотонных топологических изоляторов с краевыми состояниями, обладающими рядом таких преимуществ, как возможность их когерентного фазо-чувствительного контроля, перестраиваемость благодаря изменению рабочей длины волны, а также меньшее количество используемых мета-атомов.

Исследование поддержано РФФ №23-72-10026.

Список литературы

1. G. Harari, M.A. Bandres, Y. Lumer, et al. Topological insulator laser: Theory // *Science*, vol. 359, p. eaar4003, 2018.
2. A.O. Mikhlin, V. Rutckaia, R.S. Savelev et al. Coherent control of topological states in an integrated waveguide lattice // *Nano Lett.*, vol. 23, pp. 2094–2099, 2023.
3. W.P. Su, J.R. Schrieffer, A.J. Heeger. Solitons in Polyacetylene // *Phys. Rev. Lett.*, vol. 42, pp.1698–1701, 1979.
4. M. Mazanov, D. Román-Cortés, G. Cáceres-Aravena, et al. Photonic Molecule Approach to Multiorbital Topology // *Nano Lett.*, vol. 24, pp. 4595–4601, 2024.
5. M. Mazanov, A.S. Kupriianov, R.S. Savelev, et al. Multipole higher-order topology in a multimode lattice // *Phys. Rev. B*, vol. 109, p. L201122, 2024.
6. K. Rodionenko, M. Mazanov, M.A. Gorlach. Crafting crystalline topological insulators via accidental mode degeneracies // *Phys. Rev. B*, vol. 109, p. 155135, 2024.

СЕЧЕНИЕ РАССЕЯНИЯ И ПОГЛОЩЕНИЯ ХЛОРОПЛАСТА

С. В. Наболь^{1*}, П. С. Панкин^{1,2}, Р.Г. Бикбаев^{1,2}, И. В. Тимофеев^{1,2}

¹Институт физики им. Л. В. Киренского СО РАН
660036, Российская Федерация, Красноярск, ул. Академгородок, 50, стр. 38

²Сибирский федеральный университет
660074, Российская Федерация, Красноярск, ул. Киренского, д.28

* E-mail: nabol@iph.krasn.ru

Рассчитано сечение рассеяния и поглощения грани хлоропласта в зависимости от направления поляризации падающего света, оптических и геометрических параметров грани хлоропласта.

Фотоннокристаллические структуры были обнаружены во многих биологических объектах. Так, например, в работе [1] было показано, что синий цвет листьев *Begonia* рапонина обусловлен периодической структурой иридопласта растения. В работе [2] была рассмотрена структура хлоропласта на примере *Lactuca sativa*, см. рисунок (1). На рисунке видно периодическую структуру: грани, соединённые с ламеллами, которые обвиваются вокруг гран.

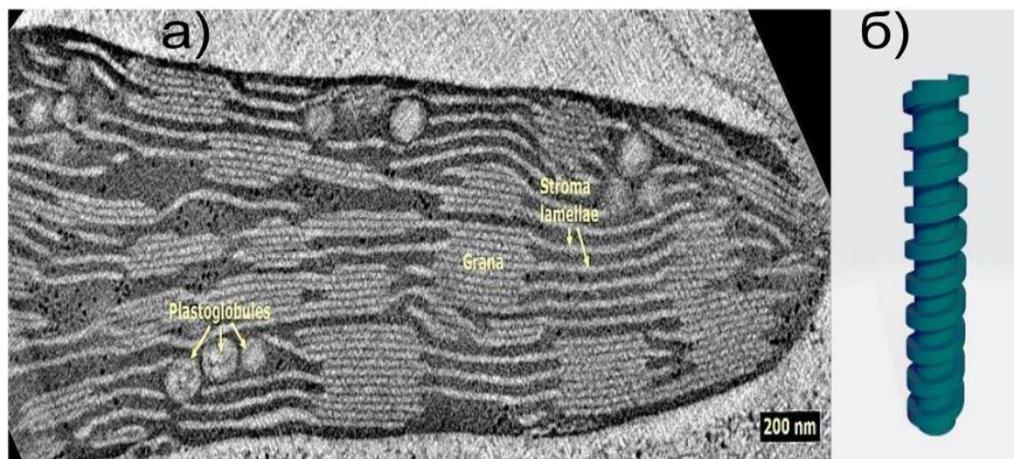


Рис. 1. а) Срез хлоропласта салата латука [2], б) схематичная модель грани с ламеллой

В данной работе мы рассмотрели модель грани, представляющую собой цилиндр, окруженный намотанным геликоидом. Для такой структуры был рассчитан эффективный показатель преломления, рассматривалось падение вдоль оси цилиндра света, с левой и правой круговой поляризацией. Затем рассчитывалось сечение рассеяния и поглощения такой структуры при изменении геометрических и оптических параметров грани.

Список литературы

1. Jacobs M. et al. Photonic multilayer structure of *Begonia* chloroplasts enhances photosynthetic efficiency // *Nature Plants*. – 2016. – Т. 2. – №. 11. – С. 1-6.
2. Bussi Y. et al. Fundamental helical geometry consolidates the plant photosynthetic membrane // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. – 2019. – Т. 116. – №. 44. – С. 22366-22375.

ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛЯРИЗАЦИИ С ПОМОЩЬЮ МЕТАЛИНЗЫ

А.Г. Налимов^{12*}, В.В. Котляр¹²

¹ Институт систем обработки изображений, НИЦ «Курчатовский институт»,
443001, Россия, г. Самара, ул. Молодогвардейская, д. 151

² Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва,
443086, Россия, г. Самара, Московское шоссе, д. 34

*E-mail: anton@ipsiras.ru

В работе рассмотрена металинза, способная детектировать эллиптичность поляризации падающего пучка. Данная металинза состоит из блоков дифракционных решеток высотой 140 нм при периоде 220 нм. Металинза представляет собой поляризатор, зависящей от одной поперечной координаты, и фокусатор. Металинза способна как разделять линейно-поляризованное излучение в два фокусных пятна с круговыми поляризациями разного знака, так и детектировать направление и степень эллиптичности поляризации. Металинза работает в широком диапазоне длин волн от 0,55 до 0,837 мкм, причем в диапазоне от 0,64 до 0,837 мкм ее можно использовать для оценки длины волны падающего излучения.

Метаповерхности, представляющие собой массивы субволновых структур, являются гибкими инструментами для манипулирования различными параметрами световых пучков. Для создания метаповерхностей используются как плазмонные структуры [1], так и диэлектрические материалы [2]. Одним из перспективных направлений разработки метаповерхностей является получение спинового эффекта Холла [3]. Чаще всего в работах рассматривается разделение круговых поляризаций [4]. Однако представляет интерес и процесс детектирования поляризации падающего пучка и измерение характеристик поляризации.

В данной работе рассмотрена металинза, способная детектировать эллиптичность поляризации падающего пучка. Данная металинза состоит из низкопрофильных дифракционных решеток высотой всего 140 нм при периоде 220 нм и работает в видимом диапазоне света на длине волны $\lambda=0,633$ мкм. Преимуществом данной металинзы является простота изготовления, поскольку решетки изготовить намного проще, чем столбики, применяемые в других работах и рассчитанные работать в резонансе на определенной длине волны. Одним из полезных характеристик данной металинзы является ее малая избирательность к длине волны света, что так же дополняется возможностью оценки длины волны света в широком диапазоне: от 0,64 до 0,837 мкм.

На рис. 1 представлена рассматриваемая в работе металинза.

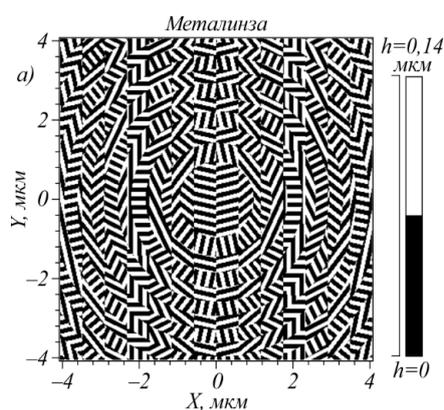


Рис. 1. Рельеф рассматриваемой металинзы

Метаповерхность представляет собой дифракционные решетки, угол β которых меняется по закону: $\beta = \sin(0,5\alpha x)$. Такая метаповерхность представляет собой матрицу

$\hat{R}(x) = \begin{pmatrix} \cos \alpha x & -\sin \alpha x \\ \sin \alpha x & \cos \alpha x \end{pmatrix}$ преобразования вектора поляризации падающего поля, где α оп-

ределяет период структуры вдоль оси X и в данном случае равно $\alpha=\pi/2$ мкм⁻¹.

Для фокусировки такого пучка к метаповерхности добавлена зонная пластинка с фокусным расстоянием $f=2\lambda=1,266$ мкм, расчёты проводились для длины волны света $\lambda=633$ нм. На рис. 2 показана интенсивность света в фокусной плоскости при освещении металлинзы на рис. 1 светом с линейной и круговой поляризацией, ограниченной апертурой 4 мкм. Моделирование проводилось методом FDTD, реализованным в коммерческом пакете FullWave (Rsoft – LightTec).

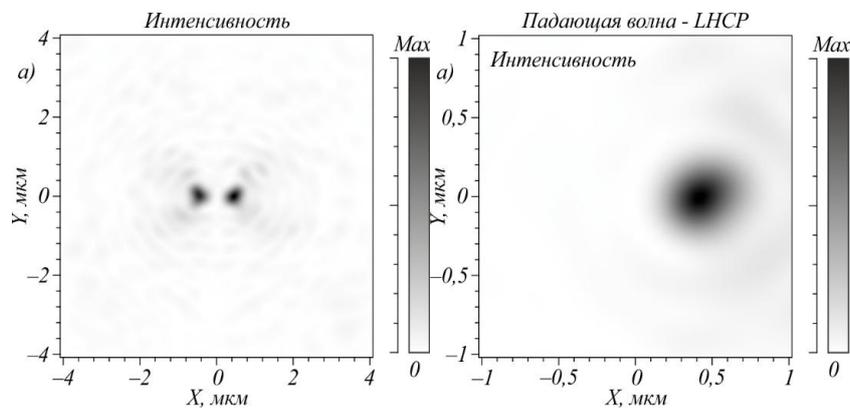


Рис. 2. Интенсивность (негатив) прошедшего металлинзу пучка с линейной поляризацией в фокусной плоскости (а), результат фокусировки металлинзой поля с левой круговой поляризацией (б).

Если данную металлинзу осветить светом с круговой поляризацией, то он будет сфокусирован в один максимум интенсивности, совпадающий или с левым, или с правым фокусным пятном в зависимости от направления вращения вектора электрического поля. При падающем поле с правой круговой поляризацией фокусное пятно будет в координатах $x=-0,4$ мкм, $y=0$, при левой круговой – в координатах $x=0,4$ мкм, $y=0$. То есть, можно демультиплексировать пучок с правой и левой круговой поляризациями в два разных максимума интенсивности, а также по плавному изменению величин максимумов оценивать эллиптичность поляризации и направление вращения вектора электрического поля падающей волны.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 23-12-00236, в части моделирования) а также по государственному заданию НИЦ Курчатовский институт (в части аналитического исследования).

Список литературы

1. Schuller JA. et al. Plasmonics for extreme light concentration and manipulation. *Nat. Mater.* 9, 2010: 193–204.
2. Staude I. et al. Tailoring directional scattering through magnetic and electric resonances in subwavelength silicon nanodisks. *ACS Nano*, 2013; 7: 7824–7832.
3. Chen X. et al. Dual-polarity plasmonic metalens for visible light. *Nat. Commun.*, 2012; 3: 1198.
4. Zhang T, Wang H, Peng C, Chen Z. Linear-to-Dual-Circular Polarization Decomposition Metasurface Based on Rotated Trimming-Stub-Loaded Circular Patch. *Crystals*, 2023; 13: 831. <https://doi.org/10.3390/cryst13050831>.

УСИЛЕНИЕ МАГНИТООПТИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ В ENZ МЕТАМАТЕРИАЛАХ С ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ДИСПЕРСИЕЙ

В. Б. Новиков^{1*}, А. А. Доценко¹, А. П. Леонтьев¹, К. С. Напольский¹, Т. В. Мурзина¹

¹Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1
*E-mail: vb.novikov@physics.msu.ru

Экспериментально и теоретически исследовано усиление поперечного интенсивностного магнитооптического эффекта в метаматериале, состоящем из массива плазмонных наностержней золота в диэлектрической матрице анодного оксида алюминия, с нанесенной сверху ферромагнитной плёнкой никеля. Метаматериал проявляет близкое к нулю значение необыкновенной компоненты тензора эффективной диэлектрической проницаемости – ENZ режим. Обнаружено резонансное увеличение магнитооптического отклика в спектральной окрестности этой особенности и показана ключевая роль пространственной дисперсии эффективной диэлектрической проницаемости метаматериала в усилении магнитооптического эффекта.

Микро- и наноструктурирование сред существенно изменяет их взаимодействие со светом, делая метаматериалы ключевым элементом фотоники. Высокий интерес вызывают структуры, состоящие из массива металлических наностержней в диэлектрической матрице. Их оптический отклик во многом определяется величинами обыкновенной (ϵ_o) и необыкновенной (ϵ_e) компонент тензора эффективной диэлектрической проницаемости композита, значения которых можно варьировать заданием объемной доли металла в структуре. В частности, удастся получить противоположные знаки действительных частей ϵ_o и ϵ_e , что приводит к гиперболической дисперсии света. Это позволяет преодолеть дифракционный предел, усилить люминесценцию квантовых точек и молекул.

Другая важная особенность таких композитов – обращение в ноль действительной части ϵ_e (ENZ режим) в окрестности определённой длины волны λ_{ENZ} , спектрально разделяющей области гиперболической и эллиптической дисперсий света. ENZ особенность позволяет многократно увеличить локальные электрические поля в структуре при падении на нее света. Это использовалось для полностью оптического управления поляризацией и интенсивностью проходящего света, усиления генерации оптических гармоник и магнитооптических эффектов [1, 2]. Так в магнитных ENZ структурах, содержащих золотые и никелевые наносегменты в диэлектрической матрице, наблюдалось усиление эффекта Фарадея и поперечного интенсивностного магнитооптического эффекта [2].

Кроме того, малые значения ϵ_e в ENZ метаматериалах делают существенными обычно слабые эффекты пространственной дисперсии диэлектрической проницаемости, т.е. ее зависимости от волнового вектора световой волны. В частности, пространственная дисперсия может приводить к появлению фазовых сингулярностей коэффициента прохождения метаматериала, позволяя получать пространственно-временные вихревые лазерные импульсы [3]. Насколько нам известно, эффекты пространственной дисперсии не использовались ранее для усиления магнитооптических эффектов в ENZ структурах.

В данной работе мы экспериментально и теоретически исследуем усиление поперечного интенсивностного магнитооптического эффекта в ENZ метаматериале, состоящем из массива золотых наностержней в матрице анодного оксида алюминия (АОА), и покрытого тонкой пленкой никеля.

Экспериментальные структуры были получены путем (1) анодирования алюминия толщиной 50 нм, формирующего матрицу АОА с параллельными пораами, заполненными воздухом, и (2) последующего электрохимического осаждения в них золота (Au). Таким образом был получен массив золотых наностержней длиной 600 ± 100 нм, диаметром 35 нм и со средним расстоянием между центрами наностержней около 100 нм.

Далее на поверхность полученного метаматериала напылялась пленка никеля (Ni) толщиной около 10 нм (рис. 1(a)). Рассмотрено две структуры: в первой пленка Ni имеет контакт с золотыми наностержнями (рис. 1(a)), во второй – нанесена с противоположной стороны и отделена от наностержней слоем АОА толщиной около 49 мкм.

Полученный метаматериал демонстрирует ENZ режим, проявляющийся в частотно-угловом спектре коэффициента прохождения (T) р-поляризованного света широким минимумом с центром при $\lambda_{ENZ} \approx 690$ нм. Обнаружено, что в этой спектральной области проявляются два дополнительных локальных минимума T вблизи углов падения $\theta = 19^\circ, 41^\circ$ и λ_{ENZ} (рис.1(б)). Измерения поперечного интенсивностного магнитооптического эффекта выполнялись для р-поляризованного падающего света при приложении магнитного поля напряженностью $H = 3$ кЭ, ориентированного перпендикулярно плоскости падения излучения (рис. 1(a)). Эффект характеризовался величиной магнитного контраста $\rho = (T(+H) - T(-H))/(T(+H) + T(-H))$, т.е. относительным изменением пропускания при обращении направления магнитного поля.

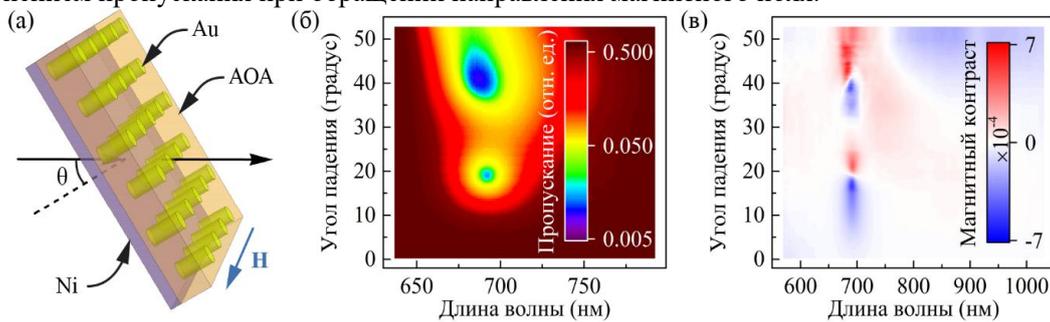


Рис. 1. (а) Схема структуры и эксперимента, (б) $\lambda - \theta$ зависимость коэффициента пропускания, (в) $\lambda - \theta$ зависимость магнитного контраста ρ .

Для первой структуры обнаружен эффект резонансного знакопеременного увеличения ρ в $\lambda - \theta$ окрестности дополнительных ENZ минимумов пропускания (рис. 1(в)). Полученные значения ρ превышают в 8 – 9 раз его величину для эталонной пленки никеля той же толщины, нанесенной на АОА без золотых наностержней. Установлено, что обнаруженный эффект увеличения ρ возникает исключительно в случае контакта магнитной пленки и золотых наностержней и не проявляется для второй структуры.

Расчеты показывают, что усиление ρ связано с пространственной дисперсией ϵ_e . Именно она приводит к появлению локальных ENZ минимумов T из-за привнесенной ей межмодовой интерференции света в структуре, опосредованной появлением так называемой дополнительной световой волны. Расчеты показывают, что ключевую роль здесь играет цилиндрической плазмон, бегущий вдоль золотых наностержней.

Мы установили, что магнитоиндуцированное управление ρ в ENZ метаматериале связано с изменением относительной фазы двух собственных оптических мод. Именно это вызывает магнитоиндуцированное изменение коэффициента пропускания, открывая новые возможности для магнитооптического управления светом. Отметим, предложенный подход, основанный на межмодовой интерференции, отличается от широко используемого спектрального сдвига одиночного плазмонного резонанса, применяемого для усиления магнитооптических эффектов, например, в магнитоплазмонных кристаллах.

Список литературы

1. L.H. Nicholls, F.J. Rodríguez-Fortuño, M.E. Nasir, et.al. Ultrafast synthesis and switching of light polarization in nonlinear anisotropic metamaterials // Nat. Photon., vol. 11, pp. 628-633, 2019.

2. I.V. Malysheva, I.A. Kolmychek, A.M. Romashkina, et.al. Magneto-optical effects in hyperbolic metamaterials based on ordered arrays of bisegmented gold/nickel nanorods // *Nanotechnol.*, vol. 32, p. 305710, 2021.

3. V.B. Novikov, T.V. Murzina. Nonlocality-mediated spatiotemporal optical vortex generation in nanorod-based epsilon-near-zero metamaterials // *Opt. Lett.*, vol. 48, pp. 2134-2137, 2023.

МИКРОРЕЗОНАТОР С ЭЛЕКТРИЧЕСКИ УПРАВЛЯЕМОЙ ДОБРОТНОСТЬЮ

П. С. Панкин^{1,2*}, А. И. Краснов¹, Д. С. Бузин¹, В. С. Сутормин^{1,2}, Д. А. Костиков¹,
С. В. Наболь¹, А. С. Абдуллаев¹, М. Н. Крахалёв^{1,2}, С. В. Неделин^{2,3}, Н. А. Золотовский^{1,2,3},
И. А. Тамбасов^{1,3}, Д. Н. Максимов^{1,2}, В. Я. Зырянов¹, И. В. Тимофеев^{1,2}

¹Институт физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН
660036, Российская Федерация, Красноярск, ул. Академгородок, 50/36

²Сибирский федеральный университет

660074, Российская Федерация, Красноярск, ул. Киренского, д. 28

³ООО “Научно-производственная компания “Спецтехнаука”
660043, Российская Федерация, Красноярск, ул. Чернышевского, 67

*E-mail: pavel-s-pankin@iph.krasn.ru

На основе концепции связанных состояний в континууме реализовано управление добротностью оптического микрорезонатора посредством приложенного к резонаторному слою напряжения.

Были исследованы спектры микрорезонатора с одномерными фотонными кристаллами в качестве зеркал и резонаторным слоем из жидкого кристалла. Слой хирального жидкого кристалла имеет тангенциально – конические граничные условия, позволяющие эффективно управлять состоянием поляризации проходящего света посредством приложенного к слою напряжения [1]. В свою очередь, управление состоянием поляризации света в микрорезонаторе позволяет изменять величину радиационных потерь резонансных мод [2]. Измеренный спектр пропускания микрорезонатора (рис. 1) демонстрирует многочисленные коллапсы спектральных линий, свидетельствующие о наличии связанных состояний в континууме, для которых величина радиационных потерь обращается в нуль [3].

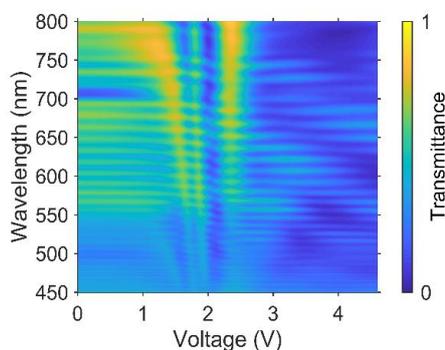


Рис. 1. Спектр пропускания микрорезонатора в зависимости от величины приложенного напряжения к слою хирального жидкого кристалла

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, Красноярского краевого фонда поддержки научной и научно-технической деятельности, Правительства Красноярского края, грант № 24-12-20007, <https://rscf.ru/en/project/24-12-20007/>.

Список литературы

1. V. S. Sutormin, M. N. Krakhalev, I. V. Timofeev et al. Cholesteric layers with tangential-conical surface anchoring for an electrically controlled polarization rotator // Optical Materials Express, vol. 11(5), pp. 1527-1536, 2021.
2. A. I. Krasnov, P. S. Pankin, D. S. Buzin et al. Voltage-tunable Q factor in a photonic crystal microcavity // Optics Letters, vol. 48(7), pp. 1666-1669, 2023.
3. A.F. Sadreev Interference traps waves in an open system: bound states in the continuum // Rep. Prog. Phys, vol. 84, p. 055901, 2021.

СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ФОТОННОГО КРИСТАЛЛА С УШИРЕННОЙ ЗАПРЕЩЁННОЙ ЗОНОЙ ИЗ АНОДНОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

М.В. Пятнов^{1,2*}, Д.С. Бузин^{1,2}, И.Р. Волкова³, И.И. Рыжков^{2,4}, И.В. Тимофеев^{1,2}

¹*Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН
660036, Российская Федерация, Красноярск, Академгородок, д. 50/38*

²*Сибирский федеральный университет*

660074, Российская Федерация, Красноярск, ул. Киренского, д. 28

³*Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр СО РАН, 660036, Российская
Федерация, Красноярск, Академгородок, д. 50*

⁴*Институт вычислительного моделирования СО РАН – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО
РАН, 660036, Российская Федерация, Красноярск, Академгородок, д. 50/44*

²*Сибирский федеральный университет*

*E-mail: MaksPyatnov@yandex.ru

За счет модификации периода анодирования изготовлены образцы фотонных кристаллов из анодного оксида алюминия с широкой фотонной запрещённой зоной. Изучена их структура, определены характеристики образцов. Изучена влияние наполнений, таких как вода, спирт, ацетон, на спектральные свойства.

Анодирование металлической фольги занимает достойное место в ряду способов изготовления фотонных кристаллов [1]. Метод позволяет получать фотонные кристаллы с различными параметрами: пористостью, толщинами и количеством слоёв, микроструктурой. Большая вариативность достигается благодаря тому, что в процессе анодирования можно точно контролировать геометрию структуры, меняя характеристики тока или напряжения анодирования, окружающие условия, чистоту и вид используемых материалов. Всё это позволяет получить структуры с определённым видом фотонной запрещённой зоны. При изготовлении таких структур пространственная модуляция показателя преломления достигается за счёт изменения пористости оксида вдоль нормали к поверхности плёнки за счёт периодического изменения условий анодирования.

Изготовлены образцы одномерных фотонных кристаллов из пористого анодного оксида алюминия. Их особенностью является увеличивающийся период структуры, в результате чего ширина фотонной запрещённой зоны достигает 170 нм. Продемонстрировано влияние на спектральные свойства фотонного кристалла воды, ацетона и спирта. Заполнение пор ФК приводит, как к красному сдвигу, так расщеплению фотонной запрещённой зоны. Причина расщепления заключается в том, что заполнение пор приводит к тому, что разница показателей преломления слоёв ФК становится меньше и не позволяет сливаться запрещённым зонам в одну широкую зону. Комбинация углового падения света с заполнением пор позволяет использовать изготовленные образцы в качестве широкополосных и узкополосных фильтров одновременно. Другим возможным применением является сенсор на основе величины расщепления фотонной запрещённой зоны.

Список литературы

1. G. Shang, D. Bi, V.S. Gorelik, et.al., Anodic alumina photonic crystals: Structure engineering, optical properties and prospective applications // *Mat. Today. Comm.*, 34, 105052, 2023.

ПОВЫШЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ СОЛНЕЧНОГО ЭЛЕМЕНТА НА ОСНОВЕ МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКОГО ПЕРОВСКИТА (MAPbI_3) В СТРУКТУРЕ С ТАММОВСКИМ ПЛАЗМОН-ПОЛЯРИТОНОМ

Д. А. Пыхтин^{1,2,*}, Р. Г. Бикбаев^{1,2}, И. В. Тимофеев^{1,2},
С. Я. Ветров^{1,2}, В. Ф. Шабанов¹

¹ *Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО, 660036, Российская Федерация, Красноярск, ул. Академгородок, д. 50/38*
² *Сибирский федеральный университет 660074, Российская Федерация, Красноярск, ул. Киренского, д. 28*
*E-mail: dmitry_pykhtin@iph.krasn.ru

В работе изучены спектральные свойства солнечного элемента с фоточувствительным слоем перовскита в структуре с таммовским плазмон-поляритоном, локализованным на границе золотой нанорешетки и одномерного фотонного кристалла. Исследовано влияние параметров золотой нанорешетки на поверхностную плотность тока и эффективность предложенного устройства. Показано, что при замене алюминиевой подложки на фотонный кристалл возбуждается таммовский плазмон-поляритон, обеспечивающий увеличение поверхностной плотности тока на 36.3%, а эффективности – на 36.6%.

Привлекательность использования фотонных кристаллов (ФК) [1] в солнечных элементах (СЭ) обусловлена способностью усиливать поглощение света в фоточувствительном слое (ФЧС) в определенном спектральном диапазоне. Внедрение ФК в СЭ позволяет осуществить дополнительное увеличение поглощения в ФЧС путем возбуждения локализованного состояния на границе раздела ФЧС-ФК, которое называется – таммовский плазмон-поляритон (ТПП) [2].

Возбуждение ТПП в СЭ приводит к возникновению дополнительной полосы поглощения падающего на структуру излучения и, как следствие, увеличению эффективности СЭ. Принципиально новой была идея использования допированных плазмонными наночастицами ФЧС в формировании ТПП [3]. Авторами было показано, что при конструировании таких солнечных элементов можно полностью отказаться от использования металлических контактов, что позволяет избежать нежелательных потерь в системе. Однако, в литературе не исследованы структуры, в которых планарная металлическая пленка в СЭ на основе ФК была бы заменена на решетку. В связи с этим в данной работе изучено влияние параметров двумерной решетки на энергетические характеристики перовскитного СЭ на основе ФК.

Схематическое изображение исследуемого солнечного элемента на основе перовскита представлено на рис. 1.

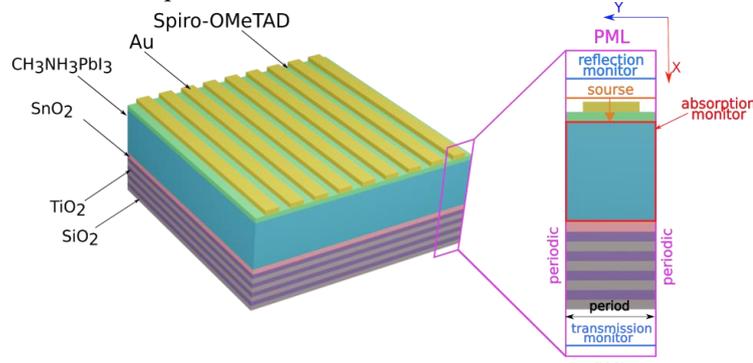


Рис. 1. Схематическое изображение солнечного элемента на основе пленки перовскита с фотоннокристаллической подложкой и расчетной области, где PML (Perfectly Matched Layer) – идеально поглощающий слой, periodic – периодические граничные условия, reflection, transmission, absorption monitor – мониторы отражения, пропускания и поглощения.

В представленном солнечном элементе в качестве ФЧС используется слой перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ (MAPbI_3) толщиной 200 нм. В качестве слоев с электронной и дырочной проводимостью использовались слои SnO_2 и Spiro-OMeTAD, соответственно, толщина каждого слоя 20 нм. Ширина и высота элементов золотой решетки варьировалась при постоянном значении периода $P = 300$ нм. Элементарная ячейка ФК сформирована из диоксида кремния SiO_2 и диоксида титана TiO_2 с толщинами $d_{\text{SiO}_2} = 120$ нм и $d_{\text{TiO}_2} = 80$ нм, соответственно. Количество слоев ФК $N = 10$. Спектры отражения, пропускания и поглощения структуры были рассчитаны методом конечных разностей во временной области [4]. Схематическое изображение расчетной области представлено на рисунке 1.

Расчеты показали, что максимальное интегральное поглощение в ФЧС достигается для структуры на основе ФК при ширине нанополосы $h_{\text{str}} = 80$ нм и толщине нанополосы $d_{\text{str}} = 5$ нм. Произведена оценка эффективности и поверхностной плотности тока СЭ как на основе алюминия и на основе ФК. Результаты расчетов представлены в табл. 1.

Таблица 1

Сравнение поверхностной плотности тока и эффективности для СЭ на основе Al и ФК

Структура	$J_c, \text{A/m}^2$	$\eta, \%$
СЭ на основе Al	51,33	24,19
СЭ на основе ФК	69,98	33,06

Видно, что замена алюминиевой подложки на ФК приводит к повышению поверхностной плотности тока на 36,3%, а эффективности на 36,6%.

Работа выполнена в рамках научной тематики Государственного задания ИФ СО РАН.

Список литературы

1. Оптика реальных фотонных кристаллов. Жидкокристаллические дефекты, неоднородности / В. Ф. Шабанов, С. Я. Ветров, А. В. Шабанов, Изд-во СО РАН, с. 239., 2005.
2. M. Kaliteevski, S. Brand, R. A. Abram et al. Hybrid states of Tamm plasmons and exciton polaritons // Applied Physics Letters, T.95, №25, 2009.
3. R.G. Bikbaev, S. Ya. Vetrov, I. V. Timofeev, et al. Nanoparticle Shape Optimization for Tamm-Plasmon-Polariton-Based Organic Solar Cells in the Visible Spectral Range // Photonics, vol.9, p.786, 2022.
4. Computational electrodynamics / A. Taflove, S.Hagness, Norwood, MA, Artech House, 169 p., 2005.

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ЛАБИРИНТНЫХ ФОТОННЫХ СТРУКТУРАХ: ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА

О. Г. Романов, Гапанович А. В.

Белорусский государственный университет
220030, Республика Беларусь, Минск, пр. Независимости, 4
*E-mail: romanov@bsu.by

На основе прямого численного решения уравнения Максвелла FDTD-методом проанализированы особенности распространения электромагнитных волн в одномерных, двумерных и трехмерных фотонных структурах с квазипериодическим распределением показателя преломления. Показано, что распределение плотности энергии электромагнитного поля характеризуется сложной ветвящейся структурой, пропускание структуры обладает свойством анизотропии и нелинейно зависит от размера фотонной ячейки.

Лабиринтные пространственные структуры, характерные для многих неравновесных процессов, таких как реакция Белоусова-Жаботинского [1], также были обнаружены в нелинейных оптических системах [2]. Когда свет распространяется в оптически неоднородных или двухкомпонентных средах, можно реализовать ситуацию, когда структура среды допускает лабиринтообразное распределение оптических характеристик. Лабиринтообразные фотонные структуры можно рассматривать как переходные структуры между фотонными кристаллами и квазикристаллами, системами связанных волноводов и неупорядоченными системами. При масштабах структур, сравнимых с длиной волны оптического излучения, представляется перспективным прямое численное решение уравнений Максвелла с помощью FDTD-метода [3, 4].

В данной работе на основе численного решения уравнений Максвелла анализируются особенности распространения электромагнитных волн в фотонных структурах с лабиринтообразным распределением показателя преломления. Показано, что распределение плотности энергии электромагнитного поля характеризуется сложной ветвящейся структурой, а время прохождения светового импульса нелинейно зависит от размера фотонной ячейки. Среди возможных применений лабиринтных фотонных структур проанализированы: «замедлитель» для света (нелинейный закон времени прохождения в зависимости от размера структуры), оптический диод (вследствие асимметрии пропускания), «абсолютно черное тело» (структуры с отражающими покрытиями), экранировка излучения и другие.

Список литературы

1. I. Berenstein, L. Yang, M. Dolnik, et al. Superlattices Turing Structures in a Photosensitive Reaction-Diffusion System // *Phys. Rev. Lett.*, Vol.91, pp. 058302. 2003.
2. O. G. Romanov. Periodical and labyrinthine optical patterns in the problem on two-wave mixing in ring cavity // *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*, Vol.7, pp. 168-176. 2004.
3. A. Taflove, S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics: the Finite-Difference Time-Domain Method*, MA: Artech, Norwood. 2000.
4. О. Г. Романов. Моделирование распространения электромагнитных волн в двумерных лабиринтных фотонных структурах // *Известия РАН*, Т.73, №12, С.1672-1675, 2009.

НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЬ БЛОХОВСКИХ ВОЛН, РАСПРОСТРАНЯЮЩИХСЯ В ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ

К. В. Семушев^{1*}

¹Физико-технический мегафакультет, Университет ИТМО
197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., д. 49 лит. А

*E-mail: kliment.semushev@metalab.ifmo.ru

В работе рассматривается подход к описанию процесса формирования стоп-зон одномерного фотонного кристалла в терминах принципа неопределенности Гейзенберга. С этой целью построены спектры экстинкции фотонных кристаллов, содержащих различное число периодов, и установлено прямое соответствие между длиной фотонного кристалла и степени расплывания границ его запрещенной зоны на зонных диаграммах.

В волновой оптике известен широкий ряд явлений, связанных с квантовой природой света: спонтанное излучение [1], лэмбовский сдвиг [2], комбинационное рассеяние света [3] и генерация мод шепчущей галереи [4]. При этом в основе многих явлений лежит основной принцип квантовой механики – принцип неопределенности Гейзенберга. В данной работе наглядно демонстрируется, что этот принцип можно использовать в том числе для описания механизма образования стоп-зон одномерного фотонного кристалла.

Для исследования процесса формирования стоп-зон были использованы супер-ячейки, состоящие из двух одномерных фотонных кристаллов (ФК). Показатели преломления, формирующие два ФК в супер-ячейке, одинаковы, однако их периоды различны. Супер-ячейки конечны и число периодов ФК, входящих в них, связано с радиусом локализации блоховских мод внутри. В терминах принципа неопределенности, число периодов m определяет волновую функцию в реальном пространстве: $x = 2md$, где d – период ФК. Разумно предположить, что при малых m , в силу $\Delta x \Delta k \geq 2\pi$, неопределенность волнового числа будет высока. На зонной диаграмме это соответствует расплыванию границ запрещенных зон фотонных кристаллов, что приводит к их перекрытию и коллапсу в одну. При больших m , в свою очередь, определенность волнового числа высока, поэтому запрещенные зоны накладываются друг на друга без перекрытия. На спектрах экстинкции видны пики, соответствующие запрещенным зонам каждого фотонного кристалла в отдельности.

Неопределенность Гейзенберга в волновой механике тесно связана с преобразованием Фурье как переходом из одного ортонормированного базиса, соответствующего x , в другой, соответствующий k . Считая волновую функцию в супер-ячейке индикаторной функцией от координаты, можно увидеть, что в обратном пространстве волновое число распределено как $(\sin k)/k$. Показано, что перекрытие основного порядка кардинального синуса $(\sin k)/k$ двух ФК, составляющих супер-ячейку практически соответствует переходу от двух главных пиков спектра экстинкции к одному главному пику.

В основе формирования запрещенных зон ФК лежит контраст показателей преломления его слоев, но локализация поля может достигаться не только в ФК. Например, в волоконных брэгговских решетках (ВБР), обладающих узкими пиками в спектрах рассеяния, благодаря подобранному пространственному периоду неоднородностей, поле тоже оказывается локализовано, если поместить ВБР парами в супер-ячейки. В рамках данной работы показано, что эти пики также имеют свойство перекрытия и слияния в один главный пик при уменьшении числа периодов ВБР, образующих супер-ячейку.

Исследование поддержано РФФ №20-79-10316.

Список литературы

1. S. Haroche, D. Kleppner. Cavity Quantum Electrodynamics // Phys. Today, vol. 42, no. 1, pp. 24-30, 1989.
2. W.E. Lamb, R.C. Retherford. Fine Structure of the Hydrogen Atom by a Microwave Method // Phys. Rev., vol. 72, no. 3, pp. 241-243, 1947.
3. G. Landsberg, L. Mandelstam. Eine neue Erscheinung bei der Lichtzertreuung // Naturwissenschaften, vol. 16, pp. 557, 1928.
4. C. Pask. Generalized parameters for tunneling ray attenuation in optical fibers // JOSA, vol. 68, no. 1, pp. 110-116, 1978.

ОПТИЧЕСКАЯ СОРТИРОВКА НАНОЧАСТИЦ ПРИ ПОМОЩИ МЕМБРАН, ПОДДЕРЖИВАЮЩИХ СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ В КОНТИНУУМЕ

Г. В. Шадрин^{1*}, Е. Н. Булгаков², А. Ф. Садреев², К. Н. Пичугин²

¹Институт вычислительного моделирования ФИЦ КНЦ СО РАН
660036, Российская Федерация, Красноярск, ул. Академгородок, д. 50/38
*E-mail: galiy_sha@mail.ru

Институт физики имени Л.В.Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН
660036, Российская Федерация, Красноярск, ул. Академгородок, д. 50/44

Мы предлагаем принципиально новый подход к сортировке сверхмалых частиц, основанный на конкуренции силы Ашкина и силы броуновского движения. Наш расчет показывает, что из смеси частиц радиусом 0,5-2 нм может быть выделена фракция с размерами $r = 1 \pm 0.2$ нм с высоким процентом локализации (до 80%).

Оптическая сортировка в самом широком смысле – это метод сортировки нано-объектов, который позволяет разделять частицы, различающиеся по размеру, диэлектрической проницаемости, форме и т.д., за счет их взаимодействия с внешним электрическим полем. Метод привлекателен своей высокой чувствительностью к малым вариациям характеристики, по которой ведется разделение. На данный момент предложены разнообразные конфигурации сортирующих платформ, например, такие как, сортировка при помощи квази-связанного состояния в континууме (ССК), огибающий профиль которого представляет собой стоячую волну [1], непрерывная сортировка частиц, движущихся в потоке жидкости, благодаря их взаимодействию с волноводной модой [2]. Во всех этих случаях на выходе частицы оказываются расположенными в пространстве в соответствии со своим размером, от большего к меньшему. Мы предлагаем принципиально новый подход к сортировке сверхмалых частиц (порядка 1 нм), позволяющий выделять очень узкую полосу размеров. Забегая вперед можно сказать, что наш расчет показывает, что из смеси частиц радиусом $r=0,5-2$ нм может быть выделена фракция с размерами $r_p = 1 \pm 0.2$ нм с высоким процентом выхода (~80%) для частиц из середины размерного диапазона.

Кремниевая мембрана с периодически расположенными сквозными квадратными отверстиями поддерживает различные ССК, из которых было выбран ССК с максимальной интенсивностью ЭМ поля внутри отверстий мембраны (рис. 1а). Хотя теоретически добротность ССК равна бесконечности, на практике она ограничена. Мы выбрали добротность 10^5 , что вполне достаточно для управления движением наночастиц радиусом $r = 0,5 \pm 2$ нм. Силу Ашкина можно представить как градиент оптического потенциала, пропорционального интенсивности поля ССК

$$U(x, y, z) = -\pi r_p^3 \frac{\varepsilon_p - \varepsilon_l}{\varepsilon_p + 2\varepsilon_l} |\vec{E}(x, y, z)|^2. \quad (1)$$

Здесь r_p – радиус сферической наночастицы с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_p = 3^2$, ε_l – диэлектрическая проницаемость воды с наночастицами различных размеров, проходящих через мембраны под действием броуновских сил. $E(x, y, z)$ – решение уравнения Максвелла. Общая схема показана на рис. 1б.

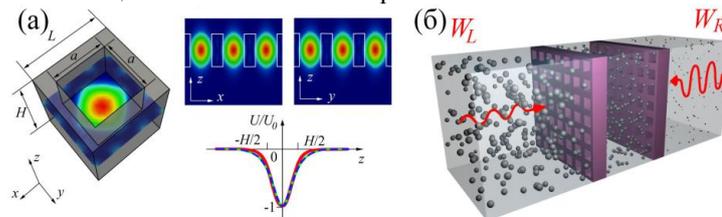


Рис. 1. (а) Интенсивность ССК, определяющая оптический потенциал, в элементарной ячейке мембраны. (б) Две кремниевые мембраны с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon=12$, погруженные в воду с показателем преломления 1.33. Лазерные лучи одной и той же частоты, но разной мощности резонансно возбуждают ССК в каждой мембране.

Идея сортировки основана на управлении броуновским движением наночастиц в воде оптической силой Ашкина. В процессе броуновского движения через первую мембрану наночастицы большого размера застревают в ячейках левой мембраны, так как оптический потенциал для них больше. В то время как малые частицы продолжают процесс броуновского движения в направлении правой мембраны. На рис. 2а изображено поведение вероятности попадания в правую P_R и левую P_L мембраны в зависимости от размера наночастицы. Как видно, пороговое значение по радиусу частиц, когда происходит локализация на мембране, хорошо регулируется интенсивностью ЭМ поля. Тогда роль правой мембраны, которая также поддерживает ССК на той же частоте, но с большей интенсивностью поля за счет приложения большей мощности источника справа W_R , заключается в том, чтобы локализовать частицы, которые смогли преодолеть левую мембрану. Поскольку слишком малые частицы вообще не локализуются электромагнитным полем, то в результате мы получаем функцию распределения вероятности на правой мембране с характерным максимумом, как показано на Рис. 2а сплошными линиями.

Процесс численного моделирования броуновского движения наночастиц в электромагнитном поле строился следующим образом. Пусть наночастицы равномерно распределены по пространству слева от обеих мембран. Диапазон возможных радиусов сортируемых частиц берется от половины нанометра до нескольких нанометров. При воздействии на мембрану лазерного луча, можно рассчитать временную эволюцию плотности вероятности для смеси частиц, используя уравнение Фоккера-Планка

$$\frac{\partial P}{\partial \tau} = [-\nabla F + kT\nabla^2]P, \quad (2)$$

где $\tau = t/\gamma$, $\gamma = 6\pi\eta r_p$ – коэффициент трения, $T = 300K$ – температура воды с диэлектрической проницаемостью $\epsilon_l = 1.33^2$ и вязкостью $\eta = 0.0009\text{Па} \times \text{с}$. Резонансное возбуждение кардинально влияет на броуновское возбуждение, если глубина оптического потенциала сравнима с kT . При добротности моды $Q = 10^5$ и падающей мощности порядка $10\text{мВт}/\mu\text{м}^2$ сила Ашкина конкурирует с броуновской силой при $r_p \sim 1\text{нм}$. На рисунке 2б можно видеть распределение частиц по размерам внутри отверстий мембраны в разные моменты времени. Видно, что частицы радиусом $r_p \lesssim 1.3\text{нм}$ свободно диффундируют сквозь мембрану, а частицы с $r_p \gtrsim 1.3\text{нм}$ задерживаются ей.

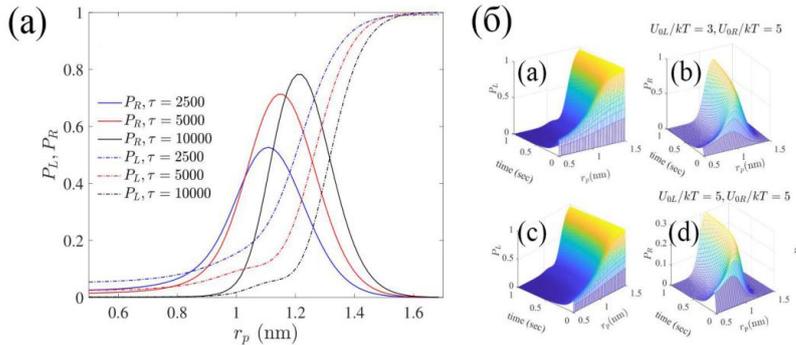


Рис. 2. (а) Плотности вероятности, полученные из уравнения Фоккера-Планка. Вероятность попадания в левую мембрану (пунктирные линии) и правую мембраны (сплошные линии). (б) Вероятность захвата частиц левой мембраной (а),(с) и правой мембраной (б),(d) в зависимости от времени с разной глубиной потенциалов (верхняя панель) и с одинаковой (нижняя панель).

Чтобы меньшие частицы могли быть захвачены правой мембраной, оптический потенциал там должен быть глубже, чем слева, что достигается при условии $W_R > W_L$ (Рис.1б). Причем, его необходимо выбирать таким образом, чтобы частицы захватывались именно в диапазоне наклона P_L , тогда можно будет получить пик вероятности P_R (рис.2а), ширина и положение которого зависят от величины и соотношения мощностей

лазерных лучей, направленных с разных сторон, как это видно на рисунке 2б. Таким образом, целевой размер захваченных наночастиц можно регулировать интенсивностью левого и правого лазерных лучей.

Резюмируя, мы предлагаем принципиально новый подход к сортировке сверхмалых частиц (порядка 1 нм), позволяющий выделять очень узкую полосу размеров. Наш расчет показывает, что из смеси частиц радиусом $r_p = 0,5 - 2$ нм может быть выделена фракция с размерами $r_p = 1 \pm 0.2$ нм с высоким процентом локализации (~80%).

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-12-00070).

Список литературы

1. E.N. Bulgakov, A.F. Sadreev. Precise size sorting of nanoparticles by bound states in the continuum in a dual finite grating // *Opt. Lett.*, vol. 48, pp. 4705-4708, 2023.
2. H. Zhao, L.K. Chin, Y. Shi, et.al. Continuous optical sorting of nanoscale biomolecules in integrated microfluidic-nanophotonic chips // *Sens. Actuators B: Chem.*, vol. 331, pp. 129428, 2021.

ВЫСОКОДОБОТНЫЕ РЕЗОНАНСЫ В ОДНОМЕРНЫХ ФОТОННЫХ КРИСТАЛЛАХ ДЛЯ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ ВОДОРОДА

М. Д. Шутов^{1*}, Д. П. Куликова¹, Г. М. Янковский¹, А. В. Барышев¹

¹*Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова, Москва, Россия*

*E-mail: shutovmik@yandex.ru

В работе демонстрируются оптические свойства высокодобротных 1D фотонных кристаллов в режиме возбуждения блоховской поверхностной волны, мод Фабри-Перо и оптического таммовского состояния. Исследованы оптические отклики таких чувствительных элементов, проведено численное моделирование спектров и обсуждается применимость к оптическим газовым сенсорам.

Одномерные фотонные кристаллы (ФК) являются перспективной платформой для реализации различных высокодобротных оптических сенсорных систем [1-2]. Такие системы являются высокочувствительными при детектировании малых изменений как диэлектрического контраста на границе ФК и анализируемой среды, так и оптических свойств самих ФК, происходящих вследствие воздействия физико-химических величин [3]. Возможность управлять спектральным положением резонансов и пространственным положением максимума локализации поля как внутри, так и на границе ФК с помощью подбора параметров слоев позволяет реализовать различные концепции сенсора.

Высокая добротность ФК позволяет на их платформе создать селективные сенсорные системы для детектирования малых концентраций токсичных и взрывоопасных газов. В работе демонстрируются оптические свойства высокодобротных ФК в режиме возбуждения блоховской поверхностной волны, мод Фабри-Перо и оптического таммовского состояния [3]. Исследованы оптические отклики таких чувствительных элементов, проведено численное моделирование спектров и обсуждается применимость к оптическим газовым сенсорам. В результате моделирования разработан чувствительные элементы газового сенсора водорода на основе бинарной плёнки WO_3/Pd , где в качестве селективного чувствительного элемента используется газохромный оксид вольфрама, а пленка палладия служит катализатором. Оптимизация параметров ФК и газочувствительной бинарной плёнки WO_3/Pd , проведена на основе экспериментальных данных о комплексной диэлектрической проницаемости WO_3 не только в исходном и окрашенном состоянии, но и на различных этапах газохромного окрашивания в кислородно-водородной смеси. Результаты экспериментов подтвердили предложенную концепцию при детектировании водорода.

Список литературы

1. A.V. Baryshev, A.M. Merzlikin, M. Inoue, Efficiency of optical sensing by a plasmonic-crystal slab// J. Phys. D: Appl. Phys. 46 (2013) 125107 (5pp).
2. A.V. Baryshev, A.M. Merzlikin, Approach to visualization of and optical sensing by Bloch surface waves in noble or base metal-based plasmonic photonic crystal slabs// Appl. Optics – 2014. – V. 53(14). – P. 3142–3146.
3. Goto, A.V. Dorofeenko, A.M. Merzlikin, A.V. Baryshev, A.P. Vinogradov, M. Inoue, A.A. Lisyansky, A.B. Granovsky, Optical Tamm States in One-Dimensional Magneto-photonic Structures// Phys. Rev. Lett. – 2008. – V. 101. – P. 113902/3

УПРАВЛЕНИЕ ОПТИЧЕСКИМ ВИХРЕМ ЗА СЧЕТ МАТЕРИАЛОВ С ФАЗОВОЙ ПАМЯТЬЮ

А. И. Соломонов^{1*}

¹Университет ИТМО

197101, Российская Федерация, Санкт-Петербург, ул. Ломоносова, д. 9

*E-mail: aleksandr.solomonov@metalab.ifmo.ru

Оптические вихревые пучки нашли широкое применение в телекоммуникациях, биофотонике, медицине и других областях благодаря своим уникальным свойствам. В данной работе предлагается метод создания оптических вихрей с переменным топологическим зарядом после изготовления с использованием двумерных структур на основе материалов с фазовой памятью. Изготовлены тонкие пленки Ge-Sb-Te с пространственным рисунком из аморфного и кристаллического состояний, нанесенным методом прямой лазерной записи. Показано, что механическое вращение пленок приводит к изменению топологического заряда оптического вихря. Демонстрируется модификация рисунка методом стирания и перезаписи, которая приводит к изменению топологического заряда оптического вихря, когда все оптические элементы системы неподвижны, т.е. без механического перемещения.

В конце прошлого века L. Allen и соавторы [1] обнаружили, что фотоны могут обладать орбитальным моментом импульса, помимо спина, таким образом, являясь дополнительной степенью свободы квантового состояния. Одно из самых важных свойств вихревых состояний с различным орбитальным моментом - ортогональность. Это означает, что два состояния с различными значениями l никогда не могут быть непрерывно преобразованы друг в друга; следовательно, смешанные состояния всегда могут быть разделены. Ортогональность нашла широкое применение в обработке и кодировании информации в свободном пространстве и в оптических коммуникациях как классического, так и квантового характера.

Были продемонстрированы различные подходы к генерации закрученных фотонов. Однако они могут иметь свои ключевые недостатки: фазовые пластинки и метаповерхности требуют высокой точности в изготовлении и многоэтапного процесса в условиях вакуума. Пространственные модуляторы света могут быть достаточно объемными для интеграции в микрофотонные и фотонные интегральные схемы. Более того, в пространственных модуляторах света могут наблюдаться шумы и дрейф значений пикселей со временем, что негативно влияет на стабильность оптического вихря. Были продемонстрированы различные подходы к генерации закрученных фотонов. Однако они могут иметь свои ключевые недостатки: фазовые пластинки и метаповерхности требуют высокой точности в изготовлении и многоэтапного процесса в условиях вакуума. Пространственные модуляторы света могут быть достаточно объемными для интеграции в микрофотонные и фотонные интегральные схемы. Более того, в пространственных модуляторах света могут наблюдаться шумы и дрейф значений пикселей со временем, что негативно влияет на стабильность оптического вихря.

Мы предлагаем истинно двумерные структуры, которые устойчивы к шуму и могут быть изготовлены, избегая дорогостоящих этапов производства. Эти структуры основаны на материалах с фазовой памятью и созданы путем локального изменения фазы материала при помощи метода прямой лазерной записи. Материал с фазовой памятью Ge-Sb-Te способен выдерживать многократные циклы записи-стирания, позволяя создавать структуры и быстро изменять их в оптических схемах.

Мы использовали метод голограмм для создания оптических вихрей с топологическим зарядом [2]. Далее, на основе этой голограммы, мы оценили рассеяние в приближении Борна [3]. Для оценки топологического заряда мы произвели астигматическое преобразование добавляя функцию цилиндрической линзы [4]. После этого мы изготовили голограмму локальным нагревом пленки $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ методом прямой лазерной записи. Мы наблюдаем хорошее согласие с теоретическими расчетами. Также, мы успешно переписали голограмму на той же подложке GST и продемонстрировали уве-

личение топологического заряда оптического в той же оптической установке.

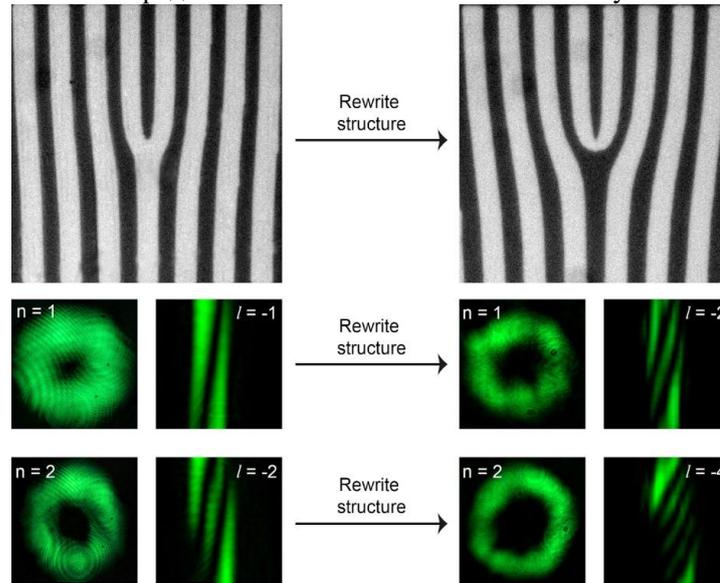


Рис. 1. Подрисночная подпись

Таким образом экспериментально и теоретически продемонстрирована возможность генерации оптического вихря с ненулевым топологическим зарядом. Показана возможность перестройки топологического заряда при перезаписи пленки Ge-Sb-Te на той же оптической установке.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 21-79-10214). <https://rscf.ru/project/21-79-10214/>.

Список литературы

1. Allen L. et al. Orbital angular momentum of light and the transformation of Laguerre-Gaussian laser modes //Physical review A. – 1992. – Т. 45. – №. 11. – С. 8185.
2. Arlt J. et al. The production of multiringed Laguerre–Gaussian modes by computer-generated holograms //Journal of modern optics. – 1998. – Т. 45. – №. 6. – С. 1231-1237
3. Rybin M. V. et al. Dimensionality effects on the optical diffraction from opal-based photonic structures //Physical Review B. – 2013. – Т. 87. – №. 12. – С. 125131.
4. Denisenko V. et al. Determination of topological charges of polychromatic optical vortices //Optics express. – 2009. – Т. 17. – №. 26. – С. 23374-23379.

НЕКОГЕРЕНТНОЕ РАССЕЯНИЕ СВЕТА ТЕПЛОВЫМИ МАГНОНАМИ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУРАХ С ПЕРПЕНДИКУЛЯРНОЙ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИЕЙ

А. В. Телегин^{1*}, В. С. Теплов¹, А. С. Самардак², А. В. Огнев,² В. Д. Бессонов²

¹Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН 620108, Российская Федерация, Екатеринбург,
ул. С. Ковалевской, д. 18

*E-mail: telegin@imp.uran.ru

²Дальневосточный федеральный университет 690922, Российская Федерация, остров Русский, п. Аякс

В работе рассмотрено влияние состава слоев и интерфейсов тонкопленочных наноструктур ТМ/ФМ различного состава на гистерезис намагниченности и величину взаимодействия Дзялошинского-Мории. Для оценки использовались спектры тепловых магнонов, полученные с помощью Мандельштам-Бриллюеновского рассеяния света.

Среди магнитных материалов металлические наноструктуры обладают уникальными магнитными, спин-транспортными свойствами и технологическими характеристиками. Например, с наличием антисимметричного взаимодействия Дзялошинского-Мории (ВДМ) в наноструктурах типа тяжелый металл/ферромагнетик (ТМ/ФМ) связано спонтанное зарождение киральных спиновых текстур – скирмионов, которые являются альтернативными перспективными носителями информации [1].

В данной работе на ферро- и ферримагнитных металлических наноструктурах с перпендикулярной магнитной анизотропией с различной конфигурацией, составом и соотношением магнитных и немагнитных слоев проведены исследования ВДМ с помощью методики Мандельштам-Бриллюеновского рассеяния света (МБРС). Для анализа величины ВДМ в наноструктурах на вибрационном магнетометре была измерена намагниченность и затем на установке МБРС получены спектры термически возбужденных спиновых волн во внешнем магнитном поле, оценен частотный сдвиг и константа ВДМ. Измеренные спектры термических магнонов во всех полученных наноструктурах сильно зависели от волнового вектора и имели выраженную асимметрию (сдвиг) в стоксовой и анти-стоксовой части при изменении полярности приложенного магнитного поля, связанную с вкладом интерфейсного ВДМ. Показано, что величина сдвига, частота и полуширина резонансных линий, доменная структура коррелируют с изменением толщины ФМ слоя, типа интерфейса ФМ/ТМ или ТМ/ФМ, а также толщины немагнитной прослойки из W, Pt, Ru. Впервые было показано нелинейное поведение ВДМ со сменой знака в области 80-400 К в наноструктурах W/CoFeB(x)/MgO. Такое температурное поведение не согласуется с температурным поведением намагниченности или константы анизотропии, не объясняется имеющейся теорией, и может быть связано с конкуренцией нескольких механизмов ВДМ в наноструктурах.

Впервые был изучен вклад интерфейсного ВДМ не только в многослойных структурах Pt/Co, но и в аморфном сплаве Pt_{1-x}Co_x. Показано, что, варьируя толщину и состав сплава, можно эффективно моделировать величину ВДМ, а также ширину линии ферромагнитного резонанса, что важно для создания СВЧ-устройств.

Таким образом, тонкопленочные металлические наноструктуры ТМ/ФМ с усиленным интерфейсным ВДМ перспективны для изучения различных спин-зависящих эффектов и скирмионов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 21-72-20160 (<https://rscf.ru/en/project/21-72-20160>) и ЦКП ДвФУ.

Список литературы

1. A. Fert, N. Reyren, V. Cros Magnetic skyrmions: advances in physics and potential applications // Nat. Rev. Mater., Vol. 2, p. 17031, 2017.

ОПТИЧЕСКИЙ МОДУЛЯТОР НА ОСНОВЕ АКУСТО-ФОТОННЫХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ НАНОСТРУКТУР

И. А. Тимошенко*, А. И. Шеверова, О. Г. Романов

Белорусский государственный университет
220030, Республика Беларусь, Минск, пр. Независимости, д. 4
*E-mail: timoshchenkoia@bsu.by

Исследуется акустооптическая система, состоящая из фотонного кристалла с поглощающим слоем на одной из сторон, в которой при поглощении импульса накачки формируется акустический сигнал, приводящий к высокочастотной модуляции коэффициента отражения данного фотонного кристалла.

Поглощение коротких электромагнитных импульсов может вызвать фотоакустические эффекты за счет быстрого теплового расширения поглотителя. Например, если нанести на многослойную периодическую наноструктуру слой поглощающего материала с одной стороны, то путем облучения ее лазерным импульсом можно создать возмущение давления, плотности, толщины слоев и показателя преломления, распространяющегося вдоль фотонного кристалла, которое приводит к изменению отражательной способности данной структуры при зондировании ее с другой стороны. Максимальное изменение коэффициента отражения может быть достигнуто при частоте пробного излучения, соответствующего краю запрещенной зоны фотонного кристалла.

В данной работе проводится численное моделирование поведения описанной выше системы. Фотоакустический эффект рассчитывается на основе уравнений движения термоупругих сплошных сред в переменных Лагранжа [1], коэффициент отражения вычисляется на основе ковариантного метода [2]. Рассматривается одномерный фотонный кристалл на основе чередующихся слоев TiO_2 и SiO_2 толщиной 100 нм и 86 нм соответственно, нанесенный на алмазную подложку (261 нм), на которой с ее другой стороны сформирован поглощающий слой графита (25 нм). На рис. 1а показано распределение деформации вдоль фотонного кристалла в некоторый момент времени, при облучении левой стороны пикосекундным импульсом, которое приводит к высокочастотной модуляции коэффициента отражения (рис. 1б).

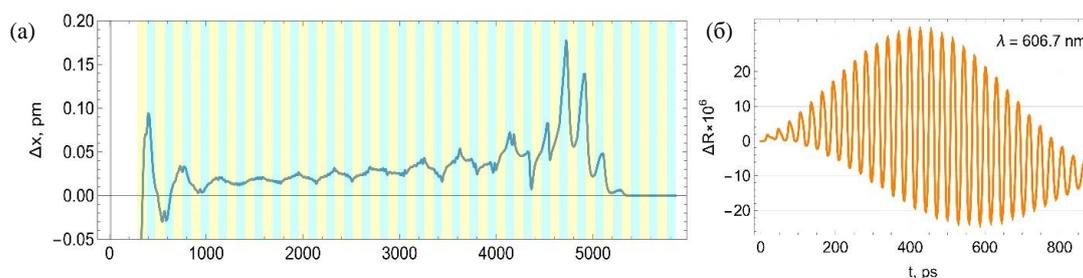


Рис. 1. Деформация фотонного кристалла (а) и эволюция коэффициента отражения на краю запрещенной зоны (б)

В работе исследуются возможности амплитудной модуляции отраженного оптического сигнала в зависимости от характеристик фотонного кристалла, поглощающего материала, параметров импульса накачки.

Список литературы

1. O. Romanov, I. Timoshchenko. Numerical simulation of photoacoustic effect in one-dimensional carbon nanostructures // *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*, vol. 25, no. 4, pp. 341–348, 2022.
2. G. N. Borzdov. Frequency domain wave-splitting techniques for plane stratified bianisotropic media // *J. Math. Phys.*, vol. 38, no. 12, pp. 6328–6366, 1997.

Ультрафиолетовое усиление фотolumинесценции нанокристаллов оксида цинка в присутствии наночастиц платины

М.Ф. Керечанина^{1*}, Е.С. Храмов¹, А.Ф. Санатулина¹, А.К. Новосёлов¹, А.А. Лизунова¹,
В.В. Иванов¹

¹Московский физико-технический институт
141701, Российская Федерация, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский пер., д. 9
*E-mail: vlasova.mf@mipt.ru

Проведены теоретические и практические исследования усиления ультрафиолетовой фотolumинесценции наночастиц оксида цинка в наноструктурных пленках в присутствии наночастиц платины. Исследования выполнены для наночастиц платины, синтезированных методом газового разряда, со средним размером частиц 91 ± 31 нм, 65 ± 22 и $5,4 \pm 1,3$ нм и коллоидов оксида цинка со средним размером $26,6 \pm 7,4$ нм. Пленки изготавливались из жидких суспензий нанокристаллов оксида цинка и платины методом микроплоттерной печати и последовательно наносились на кварцевые подложки. Теоретический расчёт фактора усиления люминесценции проведен для длины волны эмиссии 377 нм, квантового выхода $q=0.1$, длины волны иницирующего излучения $\lambda = 300$ нм

В настоящее время возрос интерес к синтезу наночастиц платины как перспективного материала с поверхностным плазмонным резонансом в ультрафиолетовой области, что позволяет повысить фотolumинесценцию полупроводниковых структур в несколько раз. Это явление активно может использоваться в различных областях науки и техники, таких как медицина, солнечные элементы, люминесцентные лампы и микроэлектроника [1]. Наночастицы оксида цинка являются наиболее распространенным полупроводниковым материалом для исследования явлений усиленной металлами фотolumинесценции в ультрафиолетовом диапазоне вблизи плазмонных структур на основе благородных металлов [2].

В данной работе исследовалось усиление фотolumинесценции коллоидов оксида цинка со средним размером $26,6 \pm 7,4$ нм частицами платины, синтезированными методом газового разряда, со средним размером частиц 91 ± 31 нм, 65 ± 22 и $5,4 \pm 1,3$ нм.

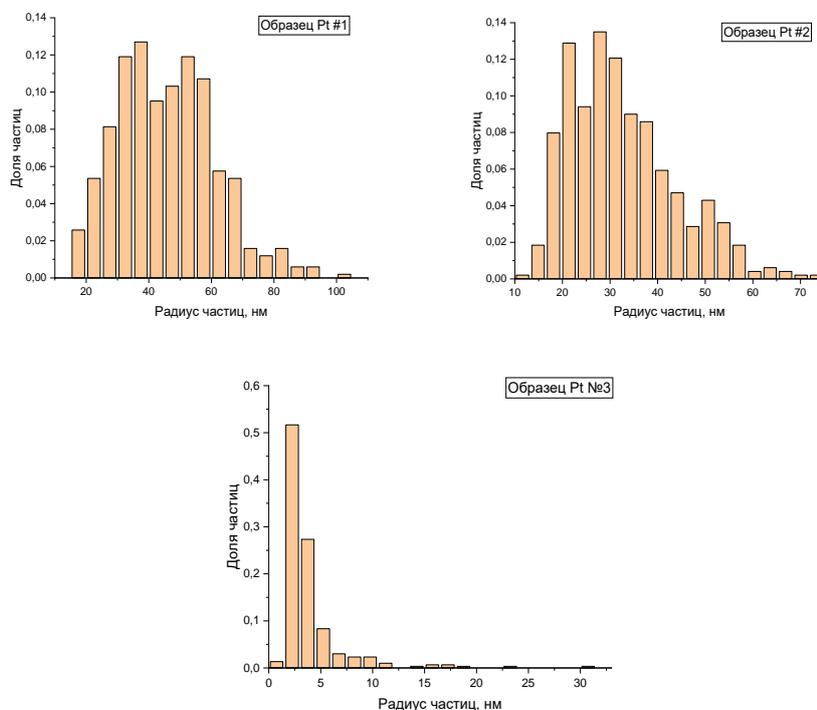


Рис. 1. Распределение частиц по радиусам в образцах Pt #1(а), #2(б), #3(в)

Для изучения фотолюминесценции были изготовлены суспензии оксида цинка в изопропиловом спирте с концентрацией 1,1 г/л и платины в изопропиловом спирте с добавлением поливинилпирролидона в качестве поверхностно-активного вещества для стабилизации наночастиц к агрегации и седиментации с концентрацией 10 г/л. Методом микроплоттерной печати из них были изготовлены пленки на кварцевых подложках.

Для понимания возможностей применения полученных наночастиц теоретически по теории Ми были рассчитаны факторы усиления люминесценции люминофоров на длине волны $\lambda = 377$ нм вблизи платиновых наносфер для 3 образцов с распределениями частиц по размерам аналогичным экспериментальным. Расчёт проведён для воздушной среды для квантового выхода эмиттера в отсутствие наночастицы $Q_0=0.1$, для диапазона расстояний от эмиттера до наночастицы $\Delta r = 0-30$ нм, длины волны инициирующего излучения $\lambda = 300$ нм (рис. 1).

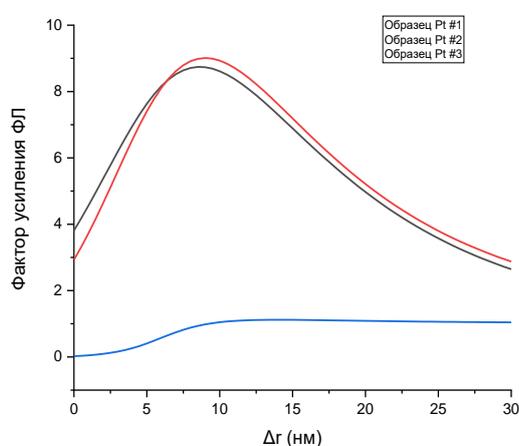


Рис. 2. Зависимость фактора усиления платиновой наночастицы при $\lambda = 300$ нм и $\lambda' = 377$ нм для различных значений квантового выхода эмиттера в отсутствие наночастицы

По теоретическим расчётам видна перспективность применения полученных образцов наночастиц платины со средними размерами 65 и 91 нм для усиления фотолюминесценции в ультрафиолетовой области до 9 раз.

Исследование выполнено при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (госзадание) №075-03-2024-107, номер проекта FSMG-2022-0034.

Список литературы

1. Li Y.F., Kou Z.L., Feng J., Sun H.B., Plasmon-enhanced organic and perovskite solar cells with metal nanoparticles, *Nanophotonics*. 9 (10) (2020) 3111–3133.
2. Wang, X.; Ye, Q.; Bai, L.-H.; Su, X.; Wang, T.-T.; Peng, T.-W.; Zhai, X.-Q.; Huo, Y.; Wu, H.; Liu, C.; et al. Enhanced UV Emission from ZnO on Silver Nanoparticle Arrays by the Surface Plasmon Resonance Effect. *Nanoscale Res. Lett.* 2021, 16, 1–7.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРИОДИЧЕСКИ СЕГМЕНТИРОВАННЫХ СУБВОЛНОВЫХ СТЫКОВОЧНЫХ КОНВЕРТЕРОВ В ТЕХНОЛОГИИ КНИ

А. А. Крылов^{1,2*}, Е. С. Шамин^{1,2}

¹АО «НИИ Молекулярной электроники»
124460, Россия, Москва, Зеленоград, ул. Академика Валиева, 6/1

*E-mail: akrylov@niime.ru

²Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)
141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д.9.

В данной работе проведено моделирование конвертеров на основе линейных тейперов и конвертеров на основе субволновых дискретных волноводов в технологии КНИ, получены зависимости потерь при конвертации от топологических параметров конвертеров обоих типов. Получена устойчивость к горизонтальному смещению и спектральный диапазон для конвертеров обоих типов. В результате моделирования было показано, что конвертеры на основе субволновых волноводов с оптимально подобранными параметрами демонстрируют меньший уровень потерь, чем конвертер на основе линейного тейпера при меньшей длине.

По мере того как размеры электронных интегральных схем уменьшаются до физического предела, а потребность в высоких скоростях передачи данных возрастает [1], фотонные интегральные схемы (ФИС) в технологии КНИ постепенно занимают место на рынке ИС в силу высокой скорости и низкого энергопотребления фотонных решений. Хотя уже доступно множество высокопроизводительных оптических компонентов, есть потребность в эффективной передаче света из оптического волокна в ФИС и обратно. Стандартным волокном для передачи данных является одномодовое волокно, диаметр поля моды которого составляет около 10 мкм при длине волны в 1550 нм. Эффективное соединение оптоволокну с волноводом затруднено из-за большого несоответствия размеров мод оптоволокну и волновода [2–4].

Одним из возможных решений этой проблемы является стыковочный конвертер (рис 1а), который размещается на чипе и выравнивается с планарным волноводом на чипе в горизонтальной плоскости. Конвертер представляет собой волновод, сужающийся к месту стыковки с оптоволокну (тейпер). Стыковочные конвертеры способны обеспечить потери при конвертации менее 6.5 дБ, однако они занимают значительную площадь на кристалле.

На рис.1б изображен периодически сегментированный стыковочный конвертер. Причем период дискретизации конвертера меньше длины волны. Предполагается, что дискретные конвертеры могут демонстрировать сопоставимый или меньший уровень потерь при конвертации моды оптоволокну в моду волновода при меньшем размере устройства [5].

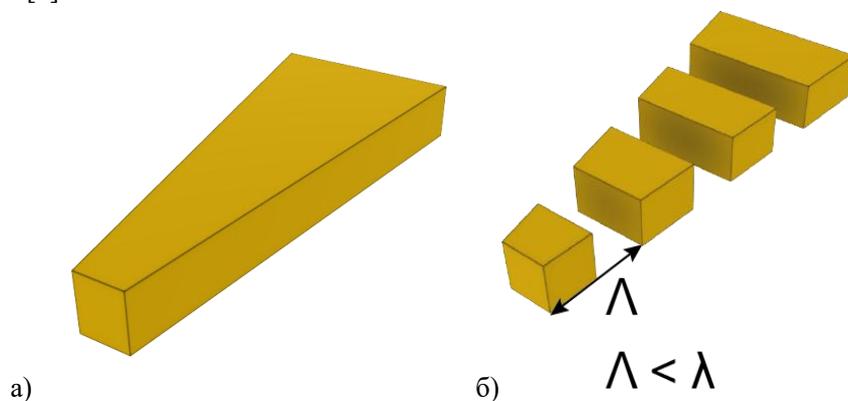


Рис. 1. а) Стыковочный конвертер на основе линейного тейпера; б) Стыковочный конвертер на основе субволновых волноводов с периодом Λ меньше длины волны λ .

В данной работе проведено моделирование стандартного и сегментированного субволнового стыковочного конвертера на базе КНИ структуры. Получены зависимости потерь при конвертации моды от топологических параметров конвертеров обоих типов. Найдены топологические параметры сегментированных конвертеров с наименьшими потерями при различном оптическом контрасте (табл. 1).

В результате моделирования показано, что периодически сегментированные субволновые стыковочные конвертеры с оптимизированными параметрами действительно демонстрируют меньший уровень потерь при меньшей длине, по сравнению с конвертером на основе линейного тейпера. Заметим, что конвертеры на основе линейного тейпера могут демонстрировать меньший уровень потерь, но при увеличении длины конвертера. Зависимость потерь излучения от длины волны при этом не претерпевает существенных изменений.

Также показано, что потери сегментированного субволнового стыковочного конвертера практически не зависят от его смещения от горизонтальной плоскости.

Таблица 1

Параметры стыковочных конвертеров с наименьшими потерями

Параметр/Тип конвертера	На основе линейного тейпера	На основе субволновых дискретных волноводов
Длина конвертера, мкм	37	11
Начальная ширина конвертера, мкм	3.7	1.2
Конечная ширина конвертера, мкм	0.4	0.4
Расстояние между сегментами, мкм	-	0.9
Длина сегмента, мкм	-	0.1
Потери, дБ	6.17	3.24

Список литературы

1. Красников Г. Я., Зайцев Н. А. Нанoeлектроника: состояние, проблемы и перспективы развития // Нано и микросистемная техника. 2009. Т. 102. №. 1. С. 2-5.
2. Cheng L. [et al]. Grating couplers on silicon photonics: Design principles, emerging trends and practical issues //Micromachines. 2020. V. 11(7): 666.
3. Papes M. [et al]. Fiber-chip edge coupler with large mode size for silicon photonic wire waveguides // Optics express. 2016. V. 24(5). P. 5026-5038.
4. Ma X. [et al]. The edge-coupler of fiber-to-chip with ultra-low coupling loss based on double-layer silicon waveguides // Frontiers in Physics. 2022. V. 10: 1018624.
5. Mu X. [et al]. Edge couplers in silicon photonic integrated circuits: A review // Applied Sciences. 2020. V. 10(4): 1538.

ИССЛЕДОВАНИЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ГИБРИДНОГО ПЕРОВСКИТА $[\text{NH}_3-(\text{CH}_2)_6\text{-NH}_3]\text{PbCl}_4$ (HMDAPbCl₄) МЕТОДОМ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

А. Е. Шметко^{1*}, К. М. Буланин¹, А. А. Рудакова¹, Д.С. Штарев², М.И. Баланов²

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, кафедра фотоники, лаборатория кристаллофотоники, 198504, Санкт-Петербург, Ульяновская ул., д.1
st095788@student.spbu.ru*

² Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1

² Университет МГУ-ППИ в Шэньдэжэне, факультет наук о материалах, Шэньдэжэнь, КНР
shzarev@mail.ru, balanov.mi@dyfu.ru
Институт наукоемких технологий и передовых материалов,
Дальневосточный федеральный университет,
690022, Российская Федерация, остров Русский, Владивосток, п.Аякс, 10

Гибридные перовскитоподобные материалы обладают большим разнообразием физико-химических свойств, поэтому стоит вопрос о поиске более эффективных структур для практического применения.

Был недавно синтезирован новый класс оптических материалов, таких как перовскиты HMDAPbX₄ (X=Br/I/Cl), как материалов пригодных для фотоэлектрических применений, таких как создание на их основе солнечных батарей, светодиодов и лазеров. Среди достоинств данных материалов следует отметить относительную простоту их синтеза. Детальное понимание процессов, происходящих при структурных фазовых переходах, а также динамики органических катионов в гибридных перовскитах галогенидах свинца необходимо для дальнейшего совершенствования фотоэлектрических свойств этих материалов.

Наличие фазовых переходов в гибридном перовските HMDAPbCl₄ было обнаружено методом дифференциальной сканирующей калориметрии. Хорошо известно, что метод ИК-спектроскопии поглощения позволяет изучать взаимодействие между органическими и неорганическими подсистемами перовскитных кристаллических решеток, что было ранее продемонстрировано при комнатной температуре для PDAPbX₄ (1,5-pentanediamine, X=Cl, Br, I) [1].

Также оказалось возможным наблюдать процессы перехода перовскита между различными кристаллографическими фазами в ИК-спектрах в диапазоне температур 77-300К.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (Мегагрант № 075-15-2022-1112)

Список литературы

1. J. Mater. Chem. C, 2024, 12, 262, DOI: 10.1039/d3tc02767h

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СВЕТА С РЕШЁТКОЙ ИЗ ЧАСТИЦ Ge НА Si

Д. Е. Уткин^{1,2*}, А. А. Шкляев^{1,2}, А. В. Царёв^{1,2}

¹Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова, 630090, Российская Федерация, Новосибирск, пр. ак. Лаврентьева, 13

*E-mail: utkinde@isp.nsc.ru

²Новосибирский государственный университет, 630090, Российская Федерация, Новосибирск, ул. Пирогова, 1

Экспериментально исследуются антиотражающие свойства покрытий на основе упорядоченных в решётку диэлектрических частиц Ge в зависимости от размера частиц и зазора между ними. Покрытия из упорядоченных частиц Ge на кремниевых подложках создаются нами без плазмохимического травления. Оптическая микроспектрофотометрия показала, что уменьшение зазора между частицами приводит к дополнительным минимумам в коротковолновой области спектра (~400 нм) из-за квадрупольных резонансов.

Антиотражающие покрытия, использующие диэлектрические частицы, такие как частицы Ge, являются многообещающим направлением в разработке метаповерхностей для эффективного управления электромагнитным излучением [1]. Это достигается за счет интерференции между падающим излучением и полями магнитных и электрических резонансных мод в частицах субволнового размера, благодаря резонансам Ми, что позволяет эффективно изменять направление распространения излучения. Максимальный эффект наблюдается при совпадении спектральных положений электрического и магнитного резонансов [2]. Для магнитного резонанса длина волны λ_m может быть связана с диаметром частицы D соотношением $\lambda_m/n \cong D$, где n — показатель преломления материала частицы. Мы продемонстрировали возможность создания покрытий из упорядоченных частиц Ge в виде дисков и усеченных конусов на поверхности кремниевых подложек без использования плазмохимического травления [3]. Методом оптической микроспектрофотометрии были получены спектры отражения от таких покрытий в зависимости от параметров решетки и диаметра частиц.

Было обнаружено, что при уменьшении величины зазора между частицами Ge в спектрах отражения появляется дополнительный минимум в коротковолновой области спектра ~ 400 нм (Рис.1). Расчёты показали, что в этом спектральном диапазоне происходит возбуждение квадрупольных резонансов, которые приводят к образованию более глубоких минимумов в спектрах отражения, чем дипольных резонансов при величинах зазора менее 200 нм.

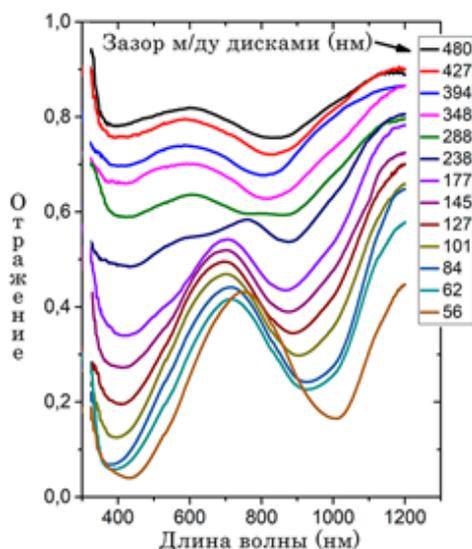


Рис. 1. Спектры отражения покрытий из частиц Ge на Si подложке в зависимости от величины зазора между дисками

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 23-72-30003.

Авторы выражают признательность центрам коллективного пользования ЦКП «НАНОСТРУКТУРЫ» ИФП им. Ржанова СО РАН и ЦКП «ВТАН» ФФ НГУ за инструментальное и технологическое обеспечение.

Список литературы

1. D.E. Utkin, et.al. Dependence of light reflection of germanium Mie nanoresonators on their aspect ratio // *Opt Mater.*, 109, p. 110466, 2020.
2. A.A. Shklyayev, et.al Interdisk spacing effect on resonant properties of Ge disk lattices on Si substrates // *Sci. Rep.* 12, p. 8123, 2022.
3. A.A. Shklyayev, et.al. Effect of Mie resonances in coatings consisting of dielectric particles on the light propagation in substrate surface layers // *Opt. Mater.*, 143, p. 114171, 2023.

ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ДЕФЕКТОВ НА ДОБРОТНОСТЬ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ В КОНТИНУУМЕ

Н. А. Власов^{1*}, А. И. Соломонов¹, М. В. Рыбин^{1,2}, Е. Е. Маслова¹

¹Университет ИТМО

197101, Российская Федерация, Санкт-Петербург, ул. Ломоносова, д. 9

*E-mail: nikolai.vlasov@metalab.ifmo.ru

²Физико-технический институт им. Иоффе РАН

194021, Российская Федерация, Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 26

Связанные состояния в континууме (ССК) в фотонике - это резонансы, которые не излучают энергию и не могут быть возбуждены модами континуума. Вследствие этого в математической модели такие резонансы имеют бесконечную добротность. В нашей работе на примере наноструктуры, основанной на полосках $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ (GST), мы аналитически и численно исследуем зависимость добротности резонанса ССК от геометрического беспорядка, заключающегося в изменении сечения структурного элемента в данной фотонной структуре. Геометрические дефекты были поделены нами на разрушающие и неразрушающие симметрию. В случае неразрушающих симметрию дефектов мы численно показали, что мода ССК в кристаллической фазе не меняет свою добротность, в то время как в случае аморфной фазы наблюдается падение добротности ССК. Для разрушающих симметрию дефектов нами была аналитически получена квадратичная зависимость как от величины беспорядка, так и от его дисперсии. Полученная зависимость было численно подтверждена численным статистическим расчетом в случае отсутствия материальных потерь. При учете мнимой части диэлектрической проницаемости GST гораздо больший вклад в добротность вносят материальные потери.

Связанные состояния в континууме (ССК) - это локализованные состояния системы, энергия которых лежит в непрерывном спектре, но при этом система не взаимодействует ни с одним состоянием континуума. Впервые существование таких состояний показали Вигнер и Нейман в 1929 году [1]. В их работе были подобраны такие потенциалы, при которых возможно существование дискретных состояний квантовой системы в области непрерывного спектра энергий. В случае фотоники роль возмущающего потенциала играет периодическая структура с показателем преломления [2]. В таком случае связанные состояния в континууме являются особыми решениями уравнения Гельмгольца, допускающими существование собственных мод структуры, которые не излучают энергию и не обмениваются энергией с модами континуума. При этом вследствие нулевых излучательных потерь добротность таких резонансов является бесконечной.

При изготовлении реальных фотонных структур, способных поддерживать связанные состояния в континууме, возникает множество факторов, которые делают добротность ССК ограниченной, при этом в таком случае говорят о формировании квази-ССК. Факторами, ограничивающими добротность ССК, могут быть: шероховатость поверхности наноструктуры, утеkanie энергии в подложку, материальные потери, конечность структуры, геометрические дефекты. Так, например, в статье [3] на примере двухслойного резонатора была показана зависимость добротности квази-ССК от величины структурного беспорядка.

В нашей работе мы рассматриваем геометрические дефекты, заключающиеся в изменении сечения структурного элемента резонатора, поддерживающей ССК. В качестве материала мы выбрали $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ (GST), который является одним из самых распространённых материалов с фазовой памятью [4, 5]. Преимущество материалов с фазовой памятью заключается в том, что они могут сосуществовать в двух фазах одновременно при нормальных условиях. При этом переход из одной фазы в другую сопровождается существенным изменением диэлектрической проницаемости, что позволяет влиять на оптические свойства метаповерхностей. Для нашего исследования изменение диэлектрической проницаемости полезно тем, что мы можем исследовать влияние геометрических дефектов на формирование ССК сразу для двух разных показателей преломления. В качестве наноструктуры мы рассматриваем периодически расположенные

бруски из GST на стеклянной подложке. Одним из геометрических дефектов, который возникает при изготовлении такой структуры, является изменение сечения структурного элемента с прямоугольного на трапециевидное, поэтому мы выбрали именно этот геометрический дефект для изучения.

Мы численно показали существование мод ССК как в кристаллической, так и в аморфной фазах GST. При этом, важно отметить, что мода ССК в аморфной фазе GST лежит в области длин волн телекоммуникационного диапазона, что может иметь свои практические применения. Найденные нами моды образованы по механизму защищенных симметрией ССК, что значит, что существование пространственно локализованных мод поддерживается C_2 симметрией структуры. По этой причине мы поделили геометрические дефекты на разрушающие и неразрушающие симметрию. Нами было показано, что мода ССК в кристаллической фазе GST является устойчивой к неразрушающему преобразованию геометрии, в то время как в аморфной фазе наблюдается падение добротности квази-ССК. Мы связываем это с тем, что мода ССК в аморфной фазе GST находится в области длин волн, на которых существенную роль играет дисперсия самого материала. Изменение геометрии структуры приводит к изменению эффективного показателя преломления, который влияет на резонансную длину волны и добротность моды. Таким образом, характер падения добротности связан с изменением материальных потерь. В случае нарушающих симметрию дефектов мы рассматривали флуктуации двух образующих углов трапециевидного сечения. Нами была аналитически получена квадратичная зависимость добротности ССК как от величины образующего угла трапеции, так и величины его дисперсии. Наши аналитические зависимости были подтверждены численными статистическими расчетами в отсутствие материальных потерь. В случае GST с учетом мнимой части диэлектрической проницаемости гораздо больший вклад в добротность вносят материальные потери, нежели наличие геометрического беспорядка.

Таким образом, мы показали существование мод ССК в структуре на основе GST, численно исследовали поведение добротности квази-ССК при неразрушающих симметрию геометрических дефектах, построили аналитическую модель поведения добротности ССК при разрушающих симметрию дефектах и сравнили полученную зависимость с численными расчетами.

Список литературы

1. J. von Neumann and E. P. Wigner, *Z. Phys.* 30, 465 (1929).
2. K. Koshelev, A. Bogdanov, and Y. Kivshar, *Opt. Photon. News* 31, 38 (2020).
3. E. E. Maslova et al.: Bound states in the continuum in periodic structures with structural disorder. *Nanophotonics* 10, 4313 (2021)
4. A. I. Solomonov et al.: Ge-Sb-Te based metasurface with angle-tunable switchable response in the telecom bands. *Phys. Rev. B* 108, 085127 (2023)
5. M. V. Rybin et al.: Optically Reconfigurable Spherical Ge-Sb-Te Nanoparticles with Reversible Switching. *Laser Photonics Rev.* 16, 2100253 (2022)

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА АНИОН-ДЕФИЦИТНОГО КОРУНДА, ПОДВЕРГНУТОГО ТЕРМООПТИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКЕ

В. С. Войнов^{1*}, И. И. Мильман^{1,2}, Р. М. Абашев^{1,2} А. И. Сюрдо^{1,2}

¹Уральский федеральный университет им. первого президента России Б.Н. Ельцина
620002, Российская Федерация, Екатеринбург, ул. Мира, д. 19
*E-mail: v.s.voynov@urfu.ru

²Институт физики металлов им. М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук
620108, Российская Федерация, Екатеринбург, Софьи Ковалевской, д. 18

Работа посвящена классификации и изучению свойств анион-дефицитного корунда в различных зарядовых состояниях дефектов. Используя методы абсорбционной спектроскопии, фото- и термолюминесценции, доказываются модель создания сложных центров окрашивания. Приводится динамика восстановления исходного состояния кристалла при изохронном отжиге при температуре 1000 °С.

Радиационные дефекты в кристаллах Al_2O_3 исследуются уже более полувека[1]. Созданные при облучении центры окрашивания (ЦО) в основном являются различными зарядовыми состояниями F — центров: одиночные кислородные вакансии с двумя (F) или одним электроном (F^+) и димеры вакансий в зарядовых состояниях от F_2 до F_2^{2+} . Так же возможно создание таких ЦО с помощью нерадиационной технологии, использующей термооптическую обработку (ТОО)[2]. ТОО является сочетанием воздействия ультрафиолетового излучения с одновременным нагревом исследуемого образца.

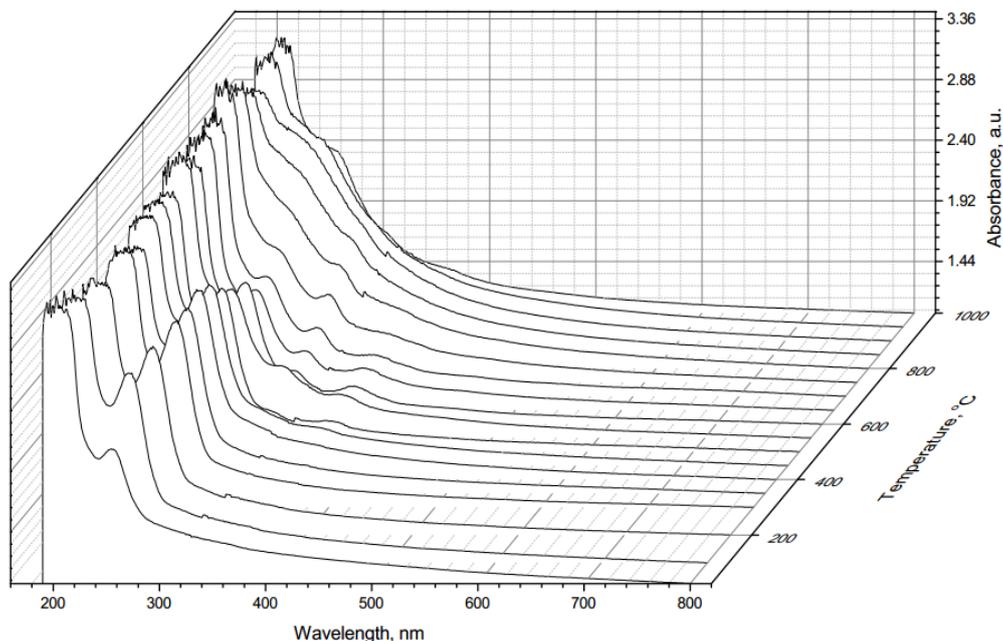


Рис. 1. Динамика ТОО образцов анион-дефицитного корунда с суммарной подведенной энергией ультрафиолетового излучения к кристаллу $W_{exc}=47,8$ мДж при различной температуре обработки.

На (рис. 1) можно выделить 5 типов различных состояний анион-дефицитного корунда, характеризующихся наличием дефектов различных типов.

- 1) Исходный, кристалл без воздействия ТОО.
- 2) Состояние 1 — характеризуется конверсией $F \rightarrow F^+$ и диапазоном температур ТОО от 100 до 400 °С.
- 3) Состояние 2 — агрегация простых дефектов в более сложные димеры F_2 типа в диапазоне температур ТОО от 500 до 800 °С.
- 4) Состояние 3 — появление в спектре поглощения широкой бесструктурной по-

лосы, 850-900 °С

5) Восстановление исходного вида при температурах свыше 1000 °С.

В спектре фотолюминесценции (ФЛ) некоторых исходных образцов присутствуют полосы эмиссии, соответствующие сложным ЦО, однако при ТОО, переводящей образцы в состояние 2 наибольший рост выхода ФЛ сопровождался одновременным появлением полос 300 и 360 нм в спектрах поглощения, что говорит именно о росте концентраций центров.

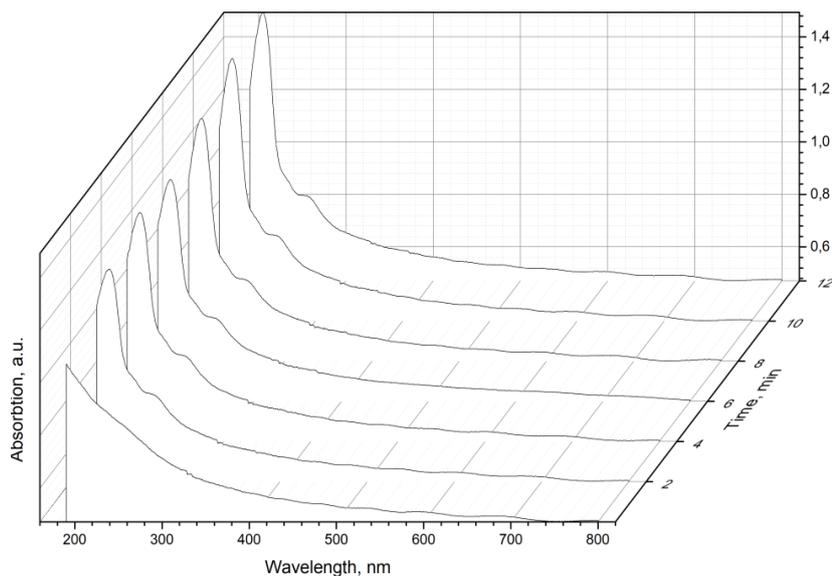


Рис. 2. Динамика восстановления анион-дефицитного корунда до исходного состояния при изохронном отжиге при температуре 1000 °С.

В ряде образцов в зарядовом состоянии 3 широкая бесструктурная полоса так же сопровождалась значительным снижением уровня поглощения в областях полос 205 и 260 нм, которые коррелируют с концентрацией F и F⁺ центров. Методами фотолюминесценции было установлено что для состояния 3 характерно тушение не только люминесценции полосы 3 эВ (F), но и полосы 2,4 эВ (F₂), что вкупе с исследованиями термолюминесценции позволяет утверждать, что для кристалла в этом зарядовом состоянии характерна агрегация ЦО в еще более крупные конгломераты вакансий. Также при изохронном нагреве эти крупные конгломераты восстанавливаются до исходных, более простых ЦО, что может свидетельствовать о процессах, схожих с восстановлением подрешеток совершенного кристалла при нагреве после облучения[3]. Динамика такого восстановления приведена на (рис.2).

Список литературы

1. Atobe K. / Irradiation-Induced aggregate centers in single crystal Al₂O₃ // phys. Stat. Sol.(a) – 1985 – vol. 89 – p. 155-162
2. Способ создания лазерно-активных центров окраски в α-AL₂O₃: патент на изобретение. / Сарычев М. Н., Мильман И.И. , Сюрдо А.И. et al. Федеральный институт промышленной собственности. Patent No.: 2692128. Jun 21, 2019.
3. E. Feldbach, A. Krasnikov, A.I. Popov, et al., Cathodoluminescence as a tool for monitoring radiation damage recovery in corundum, Journal of Luminescence, Volume 269, 2024, 120490,ISSN 0022-2313

Секция 4

БИОФОТОНИКА

ПРИМЕНЕНИЕ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ И ОПТОАКУСТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ В БИОЛОГИИ И МЕДИЦИНЕ

Д. А. Горин^{1*}

¹Сколковский институт науки и технологий
121205, Российская Федерация, Москва, Большой Бульвар 30, с. 1

*E-mail: d.gorin@skoltech.ru

Визуализация границы нормальная/патологическая ткань, также как ангиография являются приоритетными задачами современной биофотоники. Решения таких задач связано с применением мультимодальных контрастных агентов. Мультимодальность означает способность обеспечивать контраст при использовании различных методов, которые используются в клинической практике, например МРТ, ультразвуковая, оптоакустическая и флуоресцентная визуализация. Рассмотрены различные типы контрастных агентов и методы их получения. Показана возможность мультимодальной визуализации *in vitro* и *in vivo*.

В настоящее время фотонные инструменты широко используются при проведении доклинических и клинических исследований. Так пульсоксиметры, оптическая когерентная томография, флуоресцентная внутриоперационная визуализация уже нашли широкое применение в повседневной клинической практике. В то время, как флуоресцентная визуализация широко применяется в доклинических исследованиях, для изучения фармакокинетики и фармакодинамики. Существенным недостатком флуоресцентного метода является необходимость использования экзогенных флуоресцентных агентов, например индоцианина зеленого, который является стандартным флуорофором, как для доклинических, так и клинических исследований. Большие возможности по использованию эндогенных хромофоров дают оптоакустические методы визуализации. Оптоакустика (фотоакустика) основана на поглощении экзо- или эндогенными хромофорами импульсного лазерного излучения, и преобразования этой энергии в термоупругую деформацию, и далее, как результат в акустический сигнал. Несомненными достоинствами оптоакустического подхода является большая по сравнению с чисто оптическими методами глубина проникновения, характерная для акустических методов, с сохранением оптического разрешения, и что особенно важно, возможность молекулярной визуализации с использованием, прежде всего, характерных эндогенных хромофоров, например окси- и дезоксигемоглобина, билирубина, липидов, коллагена, воды. Так, например, маркером злокачественной опухоли может служить повышенная васкуляризация и пониженная оксигенация тканей. Это уже используется в скрининге онкологических заболеваний молочной железы [1]. Существенным недостатком флуоресцентных и оптоакустических методов визуализация является недостаточная глубина зондирования биологических тканей, которая в лучшем случае составляет десятки миллиметров. Этому недостатка лишен метод МРТ, но, к сожалению, высокая цена приборов, необходимость анестезии в случае применения в педиатрии сильно ограничивает доступность данного метода. В связи с вышеизложенным, разработка мультимодальных контрастных агентов является важной задачей. Основные тенденции современной оптоакустики: 1) сочетание оптоакустики с ультразвуковой визуализацией; 2) комбинация оптоакустики с методами флуоресцентной визуализации [2]; 3) переход в средний инфракрасный диапазон [3]; 4) создание мультимодальных контрастных агентов, позволяющих обеспечить визуализацию несколькими методами, например оптоакустическим, флуоресцентным, МРТ, УЗ и т.д. [2,4,5]; 5) создание калибровочных сеток, позволяющих быстро оценить корректность работы устройства [6]; 5) использование малоинвазивной и эндоскопической оптоакустики [7,8]; 6) использование технологий оптического просветления [9]. В докладе будут приведены результаты применения оптоакустики для *in vivo* исследований, причем как для оптоакустической микроскопии, так и томографии. Кроме того, будут рассмотрены технологии [10] получения мультимодальных контрастных агентов [2]. Особое внимание будет посвящено использованию

ближнего и среднего ИК диапазона для микроскопии и эндоскопической реализации оптоакустического метода и перспективам его применений для *in vitro* и *in vivo* исследований, например, для анализа гистологических срезов, а также для определения типа атеросклеротических бляшек, соответственно.

Настоящая работа поддержана Программой «Клевер»: Совместные проекты Сколтеха, МФТИ и ИТМО.

Список литературы

1. <https://www.fda.gov/medical-devices/recently-approved-devices/imagior-breast-imaging-system-p200003>
2. M.D. Mokrousov et al. Indocyanine green dye based bimodal contrast agent tested by photoacoustic/fluorescence tomography setup // *Biomedical Optics Express*, vol.12(6), pp. 3181-3195, 2021
3. M.A. Pleitez et al. Label-free metabolic imaging by mid-infrared optoacoustic microscopy in living cells // *Nat. Biotechnol.*, vol. 38(3), pp. 293-296, 2020
4. M.V. Novoselova et al. Multifunctional nanostructured drug delivery carriers for cancer therapy: Multimodal imaging and ultrasound-induced drug release // *Colloids and Surfaces B*, p.111576, 2021
5. J. Mujtaba et al. Micro-Bio-Chemo-Mechanical-Systems: Micromotors, Microfluidics, and Nanozymes for Biomedical Applications // *Advanced Materials*, pp. 2007456 (1-40), 2021
6. M. R. Chetyrkina et al. Carbon Nanotube Microscale Fiber Grid as an Advanced Calibration System for Multispectral Optoacoustic Imaging // *ACS Photonics*, vol. 9 (10), pp. 3429-3439, 2022
7. H. Guo et al. Photoacoustic endoscopy: A progress review // *J. Biophotonics*, vol. 13(12), pp.1-20, 2020
8. N. Kaydanov et al. Optoacoustic Effect in a Hybrid Multilayered Membrane Deposited on a Hollow-Core Microstructured Optical Waveguide // *ACS Photonics*, vol. 8, 11, pp. 3346-3356, 2021
9. M.V. Novoselova et al. Optical clearing for photoacoustic lympho- and angiography beyond conventional depth limit *in vivo* // *Photoacoustics*, p.100186, 2020
10. S.V. German et al. High-efficiency freezing-induced loading of inorganic nanoparticles and proteins into micron- and submicron-sized porous particles // *Scientific Reports*, vol. 8(1), p.17763, 2018

ПРИМЕНЕНИЕ ЛАЗЕРНО-ОПТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ МИКРОЦИРКУЛЯЦИИ И МИКРОРЕОЛОГИИ КРОВИ

А. Е. Луговцов^{1*}, П. Б. Ермолинский¹, М. К. Максимов¹,
Ю. И. Гурфинкель², Л. И. Дячук², А. В. Приезжев¹

¹Физический факультет, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские Горы, д. 1, стр. 62

*E-mail: anlug@biomedphotonics.ru

²Медицинский научно-образовательный центр,
Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
119192, Российская Федерация, Москва, Ломоносовский проспект, д. 27, кор. 10

Обсуждаются физические основы современных лазерно-оптических методов диагностики параметров крови: *in vitro* методы лазерной агрегометрии и дифрактометрии для диагностики параметров агрегации и деформируемости эритроцитов, *in vitro* метод оптического захвата и манипуляции для измерения сил взаимодействия отдельных эритроцитов, *in vitro* метод оптической турбидиметрии для исследования агрегации тромбоцитов, *in vivo* метод оптической цифровой капилляроскопии для исследований капиллярного кровотока. Приводятся результаты комплексного исследования данными методами при артериальной гипертензии, сахарном диабете, сердечно-сосудистой недостаточности, фибрилляции предсердий, посткоронавирусном синдроме. Найдены статистически значимые отличия параметров микрореологии и микроциркуляции крови от нормы.

Изменения микрореологических параметров крови – агрегации эритроцитов и тромбоцитов, способности эритроцитов деформироваться – являются ключевыми факторами, определяющими изменение кровотока и тем самым влияющими на реологию крови. Изменение этих свойств приводит к изменению вязкости крови и, как следствие, к изменению микроциркуляции крови в капиллярах. Это приводит к значительному нарушению функции крови, повышает риск возникновения сосудистых заболеваний и даже летальности. В связи с этим разработка и апробация новых эффективных лазерно-оптических методик мониторинга микрореологических свойств крови и параметров микроциркуляции является сложной прикладной клинической задачей.

В докладе обсуждаются физические основы и приводятся примеры применения лазерных методов оценки микрореологических параметров крови – деформируемости (зависимости удлинения эритроцитов от напряжения сдвига), агрегационных свойств эритроцитов (гидродинамическая прочность агрегатов эритроцитов, характерное время образования агрегатов эритроцитов, индекс агрегации, силы парной агрегации эритроцитов) и степени агрегации тромбоцитов в образцах крови. Измерения проводили *in vitro* методами лазерной агрегометрии и дифрактометрии, лазерного захвата и манипуляции на образцах цельной крови и суспензии эритроцитов, оптической турбидиметрии на образцах обогащенной тромбоцитами плазмы крови. Метод оптической цифровой капилляроскопии *in vivo* использовали для визуализации капилляров и количественного измерения скорости капиллярного кровотока в сосудах ногтевого ложа, а также оценки наличия в кровотоке агрегатов.

Показано, что у больных артериальной гипертензией, сахарным диабетом, сердечно-сосудистой недостаточностью, фибрилляцией предсердий, посткоронавирусным синдромом способность эритроцитов к деформации снижена, а скорость агрегации и силы взаимодействия клеток значительно увеличены по сравнению с таковыми в норме. Степень и скорость агрегации тромбоцитов повышены по сравнению с нормой, а микроциркуляция крови в капиллярах ногтевого ложа ухудшается. Полученные результаты позволяют сделать вывод о том, что лазерно-оптические методы являются эффективным инструментом для мониторинга изменений микрореологии и микроциркуляции крови, а измеряемые параметры могут служить в качестве прогностических.

Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФ № 22-15-00120.

ТРИПТОФАНОВАЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ БЕЛКОВ КАК ИНСТРУМЕНТ ИССЛЕДОВАНИЯ ИХ СТРУКТУРЫ И ФУНКЦИИ: ПРИМЕР БАКТЕРИАЛЬНОЙ ЛЮЦИФЕРАЗЫ

Е. В. Немцева^{1,2*}, Д. В. Гульнов¹, Е. А. Кириченко¹, А. Е. Лисица¹, И. В. Шахматов¹,
П. А. Ерошенко¹

¹Сибирский федеральный университет
660041, Российская Федерация, Красноярск, пр. Свободный, д. 79
*E-mail: ENemtseva@sfu-kras.ru

²Институт биофизики СО РАН, Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр СО РАН»
660036, Российская Федерация, Красноярск, ул. Академгородок, д. 50/50

Проведён обзор исследований структурной стабильности и функциональных свойств фермента бактериальной люциферазы с помощью метода собственной люминесценции белка. Представлены результаты по химической денатурации люциферазы мочевиной, оценке скорости связывания фермента с субстратами, анализу механизмов влияния сред на ферментативную реакцию.

Люминесцентная спектроскопия широко применяется для изучения особенностей химической и физической структуры белков, определяющих их важные биологические функции (молекулярное узнавание, биокатализ и другие), а также для анализа элементарных межмолекулярных взаимодействий, лежащих в основе механизмов сложных биологических процессов, происходящих с участием белков [1]. В роли собственных люминофоров белков чаще всего рассматривают аминокислотные остатки триптофана – производного индола, обладающего подходящими для этого фотофизическими и фотохимическими свойствами.

В данной работе представлены результаты исследования методами люминесцентной и абсорбционной спектроскопии структурно-функциональных характеристик фермента – люциферазы бактерий *Photobacterium leiognathi*. Это белок представляет собой гетеродимер с массой около 80 000 Да, катализирующий реакцию, одним из продуктов которой является квант света (т.е. обеспечивающий функцию биолюминесценции). Люцифераза содержит семь триптофановых остатков (5 – на α -субъединице и 2 – на β -), что, с одной стороны, обеспечивает люминесцентный сигнал из разных частей белковой глобулы, а с другой – зачастую затрудняет интерпретацию получаемых результатов.

Была изучена равновесная денатурация бактериальной люциферазы мочевиной методами время-разрешенной флуоресценции [2]. На основе изменения компонент времени жизни флуоресценции белка была проанализирована стадийность разрушения нативной структуры фермента. Полученные данные позволили идентифицировать два структурных перехода белка: с серединами при 1,0 и 4,5 М мочевины, которые были соотнесены со стадиями разворачивания C-терминального домена α -субъединицы белка и диссоциированных субъединиц соответственно. Изучение люминесценции отдельных субъединиц люциферазы позволило сделать вывод, что характеристики гетеродимера обусловлены главным образом свойствами каталитической α -субъединицы, что связывает наблюдаемые переходы с функциональными свойствами белка. Молекулярное моделирование пространственной структуры белка позволило объяснить экспериментальные данные особенностями микроокружения отдельных триптофановых остатков двух субъединиц (такими как экспонированность в растворитель, наличие тушителей, полярность и подвижность микроокружения и др.).

Скорости некоторых стадий реакции, катализируемой бактериальной люциферазой, были изучены методом тушения флуоресценции в сочетании с кинетическим методом остановленного потока. Связывание люциферазы с субстратом (восстановленным флавиномононуклеотидом) приводит к тушению триптофановой люминесценции

белка. Возможным механизмом данного явления называют резонансный перенос энергии электронного возбуждения. В свою очередь, освобождение фермента от продуктов реакции – карбоновой кислоты и окисленного флавиномононуклеотида сопровождается увеличением триптофановой люминесценции белка, что позволяет зарегистрировать скорость реактивации фермента, которая напрямую влияет на скорость его оборота при работе в стационарном режиме *in vivo*. Используя данный подход, были определены скорости образования комплекса фермент-субстрат и распада комплекса фермент-продукт, а также влияние вязких сред на данные процессы.

Внутренняя динамика белковой глобулы была исследована методом фосфоресценции белка при комнатной температуре. Было проведено сравнение характеристик фосфоресценции (положение спектра, время жизни фосфоресценции) двух видов люцифраз – *P. leiognathi* и *Vibrio harveyi*, различающихся по термостабильности и кинетическим характеристикам [3]. Оказалось, что экспериментальные данные хорошо согласуются с характеристиками этих белков, полученными методами молекулярной динамики.

Межмолекулярные взаимодействия бактериальной люциферазы с компонентами сред, приводящие к изменению функциональных свойств фермента, были изучены методом флуоресценции при стационарном возбуждении [4]. Был проанализирован сдвиг спектра флуоресценции белка в вязких растворах полиолов и сахаров (15-40 вес.%). Выявлено гипсохромное смещение спектра флуоресценции на 1-2 нм, наиболее выраженное в растворах сахаров (глюкозы, сахарозы и декстрана).

Таким образом, применение метода собственной люминесценции белка, основанного на фотофизических свойствах триптофановых остатков, позволило получить всестороннюю характеристику бактериальной люциферазы, включая структурные и каталитические особенности этого фермента.

Список литературы

1. J.R. Lakowicz. Principles of fluorescence spectroscopy. 3d edition – Boston, MA : Springer US, 2006.
2. E.V. Nemtseva, D.V. Gulnov, M.A. Gerasimova, et al. Bacterial luciferases from *Vibrio harveyi* and *Photobacterium leiognathi* demonstrate different conformational stability as detected by time-resolved fluorescence spectroscopy // International Journal of Molecular Sciences, vol. 22(19), pp.10449, 2021.
3. A.A. Deeva, A.E. Lisitsa, L.A. Sukovaty, et al. Structure-function relationships in temperature effects on bacterial luciferases: nothing is perfect // International Journal of Molecular Sciences, vol.23(15), pp. 8119, 2022.
4. A.E. Lisitsa, L.A. Sukovaty, A.A. Deeva, et al. The role of cosolvent–water interactions in effects of the media on functionality of enzymes: a case study of *Photobacterium leiognathi* luciferase // Life, vol. 13(6), pp. 1384, 2023.

БИМЕДИЦИНСКАЯ НАНОФОТОНИКА: ОПТИМИЗАЦИЯ ДИАГНОСТИКИ И ТЕРАПИИ ЧЕРЕЗ ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ

Л. А. Осминкина^{1,2*}

¹Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Физический факультет, 119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1 стр. 2

²Институт биологического приборостроения РАН, 142290, Московская область, Российская Федерация, Пуцино, ул. Институтская, д. 7

*E-mail: osminkina@physics.msu.ru

Уникальные оптические свойства полупроводниковых наночастиц пористого кремния и композитных материалов на их основе, в сочетании со свойствами высокой биосовместимости, открывают колоссальные перспективы их использования в биомедицинской нанофотонике. Представленная работа освещает цикл научных статей, а также новых полученных результатов по использованию наночастиц на основе пористого кремния и различных фотонных методов, от фотолюминесцентной микроскопии до сенсбилизации рентгеновского излучения, для диагностики и терапии социально-значимых заболеваний.

Биомедицинская нанофотоника – стремительно развивающаяся сфера научных исследований, объединяющая в себе нанотехнологии, биомедицину и биофотонику. Она занимается изучением основных механизмов взаимодействия света и наноматериалов с клетками и тканями, а также разработкой технологий для клинической диагностики и терапии. В то время как нанофотоника фокусируется на взаимодействии света и материи в наномасштабе, биофотоника изучает взаимодействие света с биологическими материалами, а наномедицина применяет нанотехнологии для диагностики, профилактики и лечения заболеваний человека.

Потенциал использования полупроводниковых наночастиц в бионанофотонике обусловлен их уникальными оптическими свойствами, которые могут быть настроены под различные биомедицинские приложения, включая диагностику и терапию. Ключевым фактором, обеспечивающим безопасность применения этих частиц в клинической практике, является отсутствие у них токсических свойств.

Наночастицы на основе пористого кремния (пКНЧ), доказано, характеризуется свойствами не только высокой биосовместимости, но и полной биodeградируемости (биорастворимости). При этом продуктом биodeградации является также нетоксичная кремниевая кислота, которая имеет исключительно полезные свойства для организма [1, 2]. ПКНЧ получают измельчением пленок пористого кремния, или массивов пористых кремниевых нанонитей [3]. При этом морфологией и физико-химическими получаемых наночастиц можно управлять, настраивая параметры синтеза исходных пористых пленок или кремниевых нанонитей. Пористая структура пКНЧ (значение пористости может достигать 80% от объема наночастиц) является преимуществом при их использовании в качестве наноконтейнеров, и позволяет обеспечить большую емкость загрузки доставляемого препарата.

ПКНЧ состоят их мелких нанокристаллов кремния (нк-Si) и пор. Фотолюминесцентные (ФЛ) свойства наночастиц, которые обусловлены квантово-размерными эффектами (КРЭ), возникающими в нк-Si с размерами 2-6 нм, открывают потенциал их применения в качестве люминесцентных меток для визуализации раковых клеток [4]. Вместе с тем, нк-Si имеют также собственный уникальный спектр комбинационного рассеяния (КР). При этом уменьшение размеров нк-Si сопровождается сдвигом максимума их спектра ФЛ с коротковолновую область, и также низкочастотным сдвигом максимума спектра КР. Все это показано открывает возможность использования данных оптических методов для исследований процессов биodeградации пКНЧ непосредственно внутри живых клеток. А с помощью микроспектроскопии КР можно не только обнаружить поглощение и распределение пКНЧ, но и оценить эффективность достав-

ляемых ими препаратов-цитостатиков (сунитиниб, доксорубин) внутрь клеток (рис.1) [5, 6].

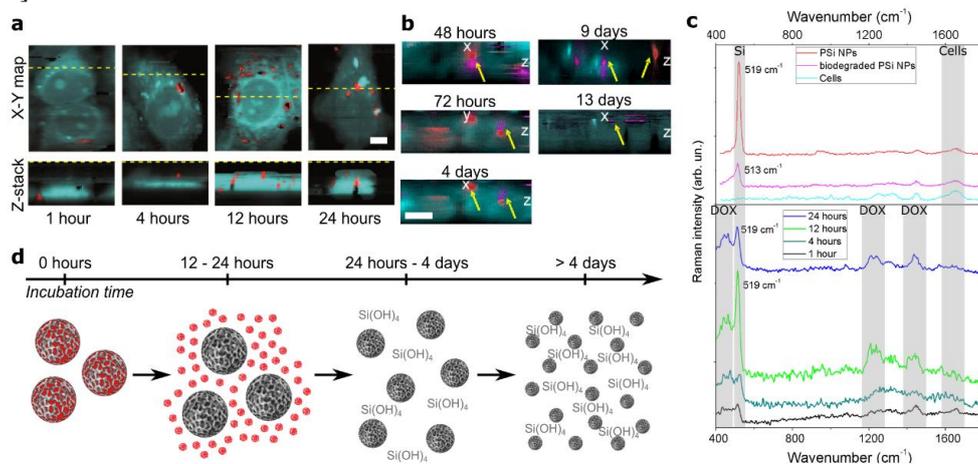


Рис.1. Изучение доставки доксорубина и биодegradации наночастиц пористого кремния внутри раковых клеток методом спектроскопии комбинационного рассеяния [6].

В работе [4] показано, что пКНЧ также могут выступать как эффективные фотосенсибилизаторы для уничтожения раковых клеток. При этом механизм терапевтического действия обусловлен генерацией синглетного кислорода при фотовозбуждении наночастиц, находящихся непосредственно внутри раковых клеток.

Наряду с этим впервые открыта возможность использовать композитные наночастицы пористого кремния и золота в фототермической терапии (ФТТ), а также для повышения эффективности лучевой терапии при воздействии рентгеновского излучения.

Представленные результаты демонстрируют колоссальные перспективы полупроводниковых наночастиц кремния и композитных материалов на их основе в биомедицинской нанофотонике.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-15-00137, <https://rscf.ru/project/24-15-00137/>.

Список литературы

1. L.T. Canham, Nanoscale semiconducting silicon as a nutritional food additive // *Nanotechnology*. vol. 18(18), p. 185704, 2007.
2. J.H. Park, L. Gu, G. Von Maltzahn, et.al. Biodegradable luminescent porous silicon nanoparticles for in vivo applications // *Nature materials*, vol. 8(4), pp. 331-336, 2009.
3. L.A. Osminkina, M.B. Gongalsky, Porous silicon suspensions and colloids // *Handbook of Porous Silicon: Second Edition*. pp. 227-245, 2018.
4. L.A. Osminkina, K.P. Tamarov, A.P. Sviridov, et.al. Photoluminescent biocompatible silicon nanoparticles for cancer theranostic applications // *Journal of biophotonics*, vol. 5(7), pp. 529-535, 2012.
5. E. Tolstik, L.A. Osminkina, C. Matthäus, et.al. Studies of silicon nanoparticles uptake and biodegradation in cancer cells by Raman spectroscopy // *Nanomedicine: Nanotechnology, Biology and Medicine*, vol. 12(7), pp. 1931-1940, 2016.
6. P.V. Maximchik, K. Tamarov, E.V. Sheval, et.al. Biodegradable porous silicon nanocontainers as an effective drug carrier for regulation of the tumor cell death pathways // *ACS Biomaterials Science & Engineering*, vol. 5(11), pp. 6063-6071, 2019.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ФОТОНИКИ В НАУКАХ О ЖИЗНИ

А. В. Приезжев, А. Е. Луговцов, П. Б. Ермолинский, М. К. Максимов

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, 1-62

E-mail: avp@biomedphotonics.ru

В докладе обсуждаются наиболее важные и результативные применения методов фотоники в области изучения и определения состояния (диагностики) живых систем и составляющих их компонентов на разных уровнях организации: макромолекул, клеток, тканей, органов и целостных организмов. Комплекс таких методов обычно называют биомедицинской фотоникой.

Биофотоника – это междисциплинарная область знаний и технологий, относящихся к проблеме взаимодействия электромагнитного излучения с биологическими объектами, включающих поглощение, генерацию, передачу, рассеяние, усиление и детектирование света с использованием лазеров и других источников света, оптических волокон, электрооптических устройств, различных микроэлектромеханических систем и наносистем для биомедицинских применений. Науки о жизни предоставляют широкое поле для применения всех физических методов диагностики, включая методы фотоники, преимуществами которых являются неинвазивность и неdestructивность в широкой полосе частот. В последние десятилетия биофотонные технологии показали свой высокий потенциал в самых разнообразных биомедицинских исследованиях, включая визуализацию (имиджинг) внутриклеточных структур и новообразований в органах и тканях, сенсорику - обнаружение и определение содержания аналитов в тканях организмов и вне их, например в выдыхаемом воздухе. Основываясь на нашем более, чем 30-летнем опыте разработки и внедрения технологий биофотоники в исследования различных живых систем, мы оценим возможности их использования для изучения как фундаментальных механизмов жизнедеятельности живых клеток и целостных организмов, так и прикладных проблем их применения для диагностики патологических отклонений от нормы. В частности, мы покажем, что лазерный пинцет и диффузное рассеяние света и флуоресцентная микроскопия позволяют оценивать изменения взаимодействия клеток в образцах цельной крови и клеточных суспензиях как на уровне одиночных клеток, так и на уровне больших ансамблей клеток при введении в кровь наночастиц. Применение этих методов *in vitro* позволяет изучать механизмы агрегации эритроцитов, поскольку они чувствительны к изменениям в среде, окружающей клетки (плазме крови, сыворотке крови или модельных растворах белков плазмы крови), а также изменение клеточных свойств эритроцитов. С помощью метода лазерной дифрактометрии мы можем оценить распределение эритроцитов по размерам и деформируемости. С помощью методов спекл-контрастной визуализации и лазерной доплеровской флоуметрии можно отслеживать *in vivo* изменения параметров кровотока на микроциркуляторном уровне, где происходит основной обмен газов между кровью и тканями. Все эти методы применяются для мониторинга и анализа изменений микроциркуляции и микроциркуляции крови у пациентов, страдающих социально значимыми заболеваниями.

Работа поддержана Российским научным фондом (грант № 22-15-00120).

ОШИБКИ КЛАССИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ПЕРЕНОСА И РАССЕЯНИЯ СВЕТА В МУТНЫХ БИОЛОГИЧЕСКИХ ТКАНЯХ И СРЕДАХ И ПУТИ РАЗВИТИЯ

Д. А. Рогаткин*

ГБУЗ МО МОНИКИ им. М.Ф.Владимирского
129110, Российская Федерация, Москва, ул. Щепкина, д. 61/2
*E-mail: rogatkin@medphyslab.com

В современной биомедицинской оптике одна из ключевых задач - теоретическое моделирование распространения света в мутных биологических тканях и средах. Однако аналитическое моделирование затруднено отсутствием точных замкнутых решений уравнения переноса. Анализ феноменологических основ теории показывает наличие пробелов и неточностей в общей постановке задачи применительно к светорассеивающим биотканям. Не принимается во внимание наличие дискретных рассеивателей внутри сплошной поглощающей среды. Часто неправильно учитывается в уравнениях ключевой параметр – яркость луча. Классический вывод уравнения переноса упрощен, что, возможно, приводит к его неправильной формулировке и, как следствие, к «нерешаемости». Более корректный вывод позволяет получить ранее неизвестные аналитические решения ряда модельных задач, а также показать наличие систематической погрешности в методе Монте-Карло, не устранимой увеличением числа «фотонов».

Ключевым элементом разработки методов и приборов оптической биомедицинской диагностики является теоретическое моделирование распространения света в светорассеивающих (мутных) биологических тканях и средах [1]. Задача - найти распределение поля излучения внутри и на поверхности среды с целью описания результатов измерений и построения вычислительных алгоритмов диагностических приборов, работающих по принципу решения обратных задач оптики светорассеивающих сред. В современной биомедицинской оптике такое аналитическое моделирование наиболее часто выполняют на основе фотометрической теории переноса (ТП) в рамках различных приближений – диффузионного, Рn-метода, метода моментов и т.д., т.к. в общем случае точных аналитических решений уравнения переноса излучения (УПИ) пока не найдено [2]. Как альтернативу, используют численное моделирование методом Монте-Карло, в котором имитируется случайное блуждание условной частицы - "фотона" - в среде [3]. Однако для диагностических медицинских систем реального времени использование неточных приближений или длительных численных вычислений неприемлемо. Поэтому поиск замкнутых аналитических решений УПИ остается актуальным.

Были проанализированы феноменологические основы ТП применительно к задачам биомедицинской диагностики *in vivo*. В ТП оптические свойства среды характеризуются коэффициентом поглощения μ_a , коэффициентом рассеяния μ_s и фазовой функцией $p(s, s')$, описывающей рассеяние света с направления s' в направлении s . С их помощью УПИ описывает изменение яркости луча по пути его распространения в среде:

$$\frac{dL(\tau, s)}{ds} = -(\mu_a + \mu_s)L(\tau, s) + \frac{\mu_s}{4\pi} \int_{4\pi} L(\tau, s')p(s, s')d\Omega, \quad (1)$$

где: $L(\tau, s)$ [Вт·срад⁻¹·м⁻²] – яркость луча для длины волны λ , $\tau = \{x, y, z\}$ – координатный вектор в точке среды распространения излучения, $s = \{s_x, s_y, s_z\}$ – вектор направления распространения излучения, $s_x^2 + s_y^2 + s_z^2 = 1$, и $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$ - элемент телесного угла, выраженный через полярный θ и азимутальный φ углы.

Классический вывод УПИ (1) основан на интуитивных представлениях о сплошной среде и не учитывает особенности биотканей [4]. В частности, не принимается во внимание наличие дискретных рассеивателей внутри сплошной поглощающей свет среды. Это приводит к коэффициенту рассеяния для группы рассеивателей в виде: $\mu_s = R\mu_p$ [5], где R – доля рассеянного излучения единичным рассеивателем, μ_p – плотность рассеивателей в среде [см⁻¹]. Учет дискретности рассеивателей дает: $\mu_s = -\mu_p \ln(1 - R)$. Транспортный коэффициент μ_t вместо $\mu_t = \mu_a + \mu_s$ приобретает более сложный вид и уже не разделяется отдельно на вклады от рассеяния и от поглощения. Как правило, некорректны и граничные условия гладкой границы раздела для кожи, которая более адекватно должна описываться в терминах шероховатой границы раздела

с формулировкой граничных условий в виде фазовой функции поверхностного рассеяния [6].

Но более значимый изъян выявлен в определении фазовой функции рассеяния элементарного объема ΔV . По (1) она должна формулироваться для яркости излучения площадок Δx и Δy и требует учета косинуса угла θ отклонения яркости от нормали (рис.1), но об этом часто забывают. Учет этих и других особенностей при выводе УПИ для биотканей позволяет более корректно формулировать исходные уравнения и получать в ряде случаев неизвестные ранее замкнутые аналитические решения.

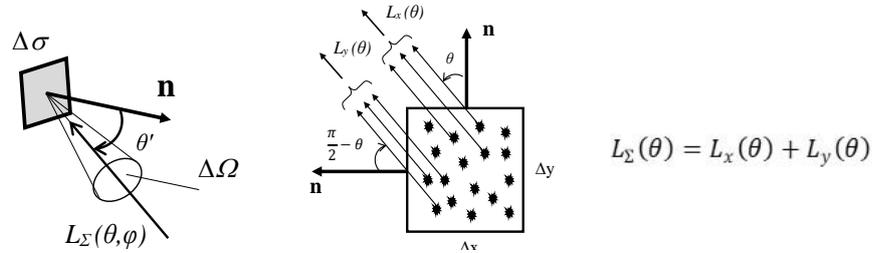


Рис. 1. К выводу фазовой функции рассеяния элементарного объема ΔV в терминах яркости.

Так, в плоской (2D) задаче с узким освещающим лучом угловое распределение яркости элементарного объема описывается следующими соотношениями (см. рис.1):

$$L_x(\theta) = \rho(\theta) \left\{ \mu_a + \mu_s \right\} \cos \theta \frac{e^{-\frac{\mu_a}{\mu_p}}}{1 - e^{-\frac{\mu_a + \mu_s}{\mu_p}}}; \quad L_y(\theta) = \rho(\theta) \left\{ \mu_a (\sin \theta + 1) + \mu_s \sin \theta \right\} \frac{e^{-\frac{\mu_a S_1}{2\mu_p}}}{1 - e^{-\frac{\mu_a S_1 + \mu_s}{\mu_p}}}, \quad (2)$$

где: $\rho(\theta)$ – фазовая функция единичного рассеивателя, $S_1 = \frac{\sin \theta + 1}{\sin \theta}$. Это позволяет найти в явном виде точное аналитическое решение для обратно рассеянного потока излучения на поверхности кожи в приближении однократного рассеяния. В сравнении с результатом расчета методом Монте-Карло несложно убедиться, что классический численный алгоритм систематически завышает поток на 10-15%. Ошибка не устранима за счет увеличения числа «фотонов», но исчезает при корректировке вероятностных параметров.

Возможным оказывается и точное аналитическое решение 2D задачи в приближении многократного ортогонального рассеяния. Для этой задачи УПИ наиболее просто можно получить в виде уравнения 4-й степени:

$$\frac{\partial^4 L(x,y)}{\partial x^2 \partial y^2} - \alpha^2 \left[\frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 L(x,y)}{\partial x^2} \right] + [\alpha^4 - 4\beta_3^2 (\beta_1 + \beta_2)^2] L(x,y) = 0, \quad (3)$$

где: $\alpha^2 = (\beta_1^2 - \beta_2^2)$, $\beta_1 = \mu_t$ – коэффициент ослабления, а β_2 и β_3 – коэффициенты обратного (назад) и бокового (направо/налево) рассеяния, соответственно.

Список литературы

1. V.V. Tuchin (ed.). Handbook of Optical Biomedical Diagnostics, SPIE Press, Bellingham, Washington (2002).
2. А.Е. Пушкарева. Методы математического моделирования в оптике биоткани. Учебное пособие. – СПб: СПбГУ ИТМО, 2008.
3. S.L. Jacques, Tutorial on Monte Carlo simulation of photon transport in biological tissues. // Biomedical Optics Express, V.14, No.21, 2023. – pp. 559-576.
4. S. Chandrasekhar. Radiative transfer. New York: Dover Publications. 1960.
5. A. Ishimaru. Wave propagation and scattering in random media. V.1. New York – London: Academic Press, 1978.
6. Рогаткин Д.А. Рассеяние электромагнитных волн на случайно-шероховатой поверхности как граничная задача взаимодействия лазерного излучения со светорассеивающими материалами и средами. // Оптика и спектроскопия, т.97, №3, 2004. - с.484-493.

ВЛИЯНИЕ ВНЕКОРНЕВЫХ МИКРОДОБАВОК НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА РАСТЕНИЙ

Е. Р. Буханов^{1,2*}, К. А. Афанасова², В. В. Вагнер³

¹*Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук, Российская Федерация, 660036, г. Красноярск, ул. Академгородок, 50/38*

*E-mail: k26tony@yandex.ru

²*Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук», Российская Федерация, 660036, г. Красноярск, ул. Академгородок, 50*

³*ОПХ «Курагинское», филиал ФИЦ КНЦ СО РАН, 662911, Красноярский край, рабочий поселок Курагино, Партизанская, 8*

В настоящей работе впервые предложен способ оптимальных концентраций внекорневых подкормок исходя из строения и оптических свойств листа растения. По приведенным в работе методам был рассчитан близкий к единице коэффициент корреляции, что свидетельствует о высокой связи данных параметров. По итогам работы было установлено, что основным механизмом увеличения урожайности при внесении подкормок является более эффективный перенос энергии из ФС II в ФС I.

В процессе роста растений присутствует большое количество положительных и негативных факторов. Использование различных внекорневых подкормок позволяет нивелировать влияние негативных факторов и повысить продуктивность и качество урожая. Оценить качество растений можно с помощью измерения эффективности фотосинтеза на разных этапах процесса роста: накопление и рост биомассы, выделение кислорода в результате расщепления воды в фотосистеме (ФС) II, измерение флуоресценции. Флуоресцентные методы позволяют получить информацию о первичных процессах, определяющих способность избирательно перенаправлять свет с различной длиной волны и регулировать его поглощение. В работе [1] установлена связь эффективности фотосинтеза со структурой растений. Световые реакции фотосинтеза у зеленых растений опосредуются четырьмя крупными белковыми комплексами, встроенными в тилакоидную мембрану хлоропласта (ФС I и II, светособирающие комплексы I и II) [2]. В большинстве работ [3-5] принято исследовать влияние малых комплексов путем их извлечения из системы. Тем не менее более щадящим подходом изучения фотосинтезирующих параметров является добавление в систему активных добавок, взаимодействующих с отдельными комплексами, и таким образом влияющие на структурные и оптические свойства растений.

Целью работы являлось установление влияния внекорневой подкормки пшеницы в стадии кущения на структурные и оптические характеристики листьев растений.

Для данной работы в ОПХ «Курагинское» в 2023 г. был заложен полевой опыт по внекорневой подкормке сорта яровой мягкой пшеницы Новосибирская 31. Были сформированы 4 варианта: контроль; одна подкормка в фазу кущения; две подкормки: в фазу кущения и выхода в трубку; три подкормки: фаза кущения, выхода в трубку, начало колошения. Внекорневая подкормка состояла из карбамида 12кг/га, сульфата магния 1,5 кг/га и гуминатрияф 1 л/га во всех случаях. По результатам сбора урожая, самая низкая производительность была установлена на контрольном поле (22 ц/га), в то время как самая высокая урожайность наблюдалась на участке с тремя подкормками (28 ц/га). Промежуточные участки имели значения прямо пропорционально соотносимые с количеством внесения подкормок между контрольным и участком с тремя подкормками. Таким образом, для исследования были взяты крайние точки.

Для исследования структурных особенностей выращенных растений были собраны их флаговые листья на этапе колошения и проведена пробоподготовка. На основе ряда изображений структур хлоропластов, полученных с помощью просвечивающей электронной микроскопии, были измерены оценочные значения размеров тилакоидов. Отличие между стандартным отклонением ширин тилакоидов образцов составило практически в 5 раз.

На рисунке 1 представлены спектры флуоресценции (рис. 1а) от образцов листьев пшеницы с участков без подкормки (сплошная линия) и с тремя подкормками (пунктирная линия). Из анализа полученных спектров видны изменения в интенсивности и ширинах линий спектра. Для количественных измерений произведено разделение контуров (рис. 1б), а также отмечены ширины пиков флуоресценции на полувысоте.

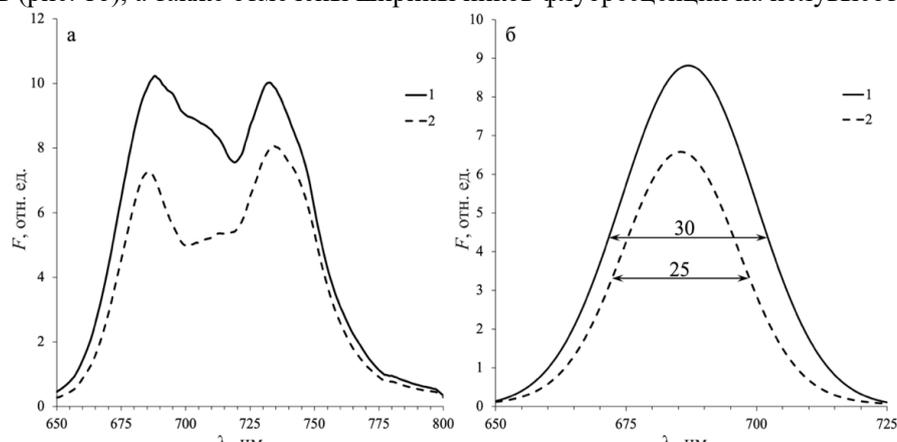


Рис. 1. а) Спектры флуоресценции от образцов листьев пшеницы, б) контур, соответствующий пикау ФС II. 1 – без подкормки; 2 – три подкормки

Из результатов спектроскопии видно, что в случае с тремя подкормками длинноволновый пик стал выше коротковолнового, тогда как в случае без подкормок коротковолновый слегка выше. Это говорит о том, что в первом случае происходит активная перекачка энергии в систему ФС I. Представлены контуры пика флуоресценции ФС II для обоих случаев (рис. 1б). Из рисунка видно, что ширины пиков на полувысоте отличаются на 5 нм.

Для приведенных выше результатов каждого метода оценки листьев был рассчитан коэффициент корреляции. В результате корреляции составил 0.84, что соответствует высокой связи данных параметров.

Данный факт позволяет нам считать, что основным механизмом увеличения урожайности при внесении подкормок является более эффективный перенос энергии из ФС II в ФС I.

Список литературы

1. Е.Р. Буханов, А.Д. Шефер, А.В. Шабанов, Ю.Л. Гуревич, М.Н. Крахалёв, Исследование строения, оптических и спектральных характеристик эпикутикулярного воска на иголках ели голубой (*пicea pungens*) // Сиб. Лес. Ж., №1. С. 97–106, 2024.
2. J.P. Dekker, E.J. Boekema, Supramolecular organization of thylakoid membrane proteins in green plants // *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Bioenergetics.*, vol. 1706, no. 1-2, pp. 12-39, 2005.
3. K.N. Ferreira, T.M. Iverson, K. Maghlaoui, J. Barber, S. Iwata, Architecture of the photosynthetic oxygen-evolving center // *Science*, vol. 303, pp. 1831-1838, 2004.
4. Z. Liu, H. Yan, K. Wang, T. Kuang, J. Zhang, L. Gui, X. An, W. Chang, Crystal structure of spinach light-harvesting complex at 2.72 Å resolution // *Nature*, vol. 428, pp. 287-292, 2004.
5. N. Kamiya, J.R. Shen, Crystal structure of oxygen-evolving photo- system II from *Thermosynechococcus vulcanus* at 3.7-angstrom resolution // *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, vol. 100, pp. 98-103, 2003.

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ТГЦ-ИЗЛУЧЕНИЯ НА МЕТАБОЛИЗМ НУКЛЕОТИДОВ В КЛЕТКАХ МЕЛАНОМЫ ЧЕЛОВЕКА

Е. А. Бутикова^{1,3,*}, Н. В. Басов^{1,2}, А. Д. Рогачев^{1,2}, М. А. Сотникова¹, Е. В. Гайслер¹,
И. А. Разумов^{1,3,4}, О. И. Соловьева^{1,3,4}, Ю. С. Сотникова^{1,2,5}, Ю. В. Патрушев^{1,5},
Д. А. Коломеец³, О. В. Шевченко³, В. В. Каныгин^{1,3}, В. М. Попик³, А. Г. Покровский¹

¹Новосибирский государственный университет
630090, Российская Федерация, Новосибирск, ул. Пирогова, д. 2

*E-mail: katabutikova@gmail.com

²Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова СО РАН
630090, Российская Федерация, Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, д. 9

³Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН
630090, Российская Федерация, Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, д. 11

⁴Институт цитологии и генетики СО РАН
630090, Российская Федерация, Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, д. 10

⁵Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН
630090, Российская Федерация, Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, д. 5

ТГц-излучение – это излучение, находящееся на электромагнитной шкале (ЭМИ) между инфракрасным и микроволновым излучением в диапазоне 100 ГГц до 10 ТГц, и является неионизирующим излучением. Для определения эффектов ТГц-излучения в клетках меланомы человека был предложен анализ методом ВЭЖХ-МС/МС и было показано достоверное изменение 40 метаболитов, участвующих в пуриновом и пиримидиновом метаболизме.

В последние десятилетия терагерцовое излучение (ТГц) стало широко применимо в различных областях науки. Его высокая поглощаемость атмосферой означает, что живые системы редко контактируют с ним, что делает изучение его воздействия на биологические системы важным для безопасной разработки и использования разнообразных приложений [1]. Научные и технологические достижения позволили разработать новые источники и приемники ТГц-излучения, что способствует его использованию в таких областях, как ТГц-визуализация, системы гражданской безопасности, фармацевтика и передача данных нового поколения, включая связь 6G [2].

Биологические эффекты ТГц-излучения представляют собой сложную задачу для определения, однако метаболомный подход может быть эффективным в выявлении тонких биохимических изменений, вызванных этим электромагнитным излучением. Метаболомика — это концепция в биоаналитической химии, которая стремится к количественной оценке набора малых молекул (молекулярная масса менее 1.5 кДа), присутствующих в биологической системе в любом из ее физиологических состояний [3]. Таргетированный скрининг метаболитов с использованием метода высокоэффективной жидкостной хроматографии с масс-спектрометрической детекцией (ВЭЖХ-МС/МС) может стать удобным и чувствительным инструментом для обнаружения ранних изменений в живых системах на молекулярном уровне.

В данном исследовании было проведено облучение клеток линии SK-MEL-28 (модель меланомы человека) на Новосибирском лазере на свободных электронах (НЛСЭ) [4] с параметрами: 2.3 ТГц, мощностью 0.056 Вт/см². в течение 10 и 45 минут. Клеточные образцы анализировали ВЭЖХ-МС/МС в режимах гидрофильной и обращенно-фазовой хроматографии [5].

Метаболомный анализ позволил получить данные о содержании 407 метаболитов, из которых 40 значимо различались между группами облученных ТГц клеток и контрольной группой. Обнаружены изменения в содержании метаболитов, включая пути метаболизма пуриновых и пиримидиновых азотистых оснований. В пуриновом метаболизме отмечено систематическое снижение содержания метаболитов, таких как АТФ, АДФ и АМФ, с параллельным увеличением содержания продуктов деградации нуклеотидов, таких как ксантин и гипоксантин. Значительные изменения также выявлены в пиримидиновом метаболизме, с повышением конечных метаболитов, таких как уридин

и урацил, как при 10-минутном, так и при 45-минутном облучении. Это первое исследование, в котором применяется метаболомный скрининг в биологических образцах, облученных ТГц, демонстрируя ТГц-индуцированные метаболические изменения в клетках человека и возможное нарушение функций энергетических систем клеток.

Выводы: Результаты данного исследования показывают, что облучение клеток меланомы терагерцовым излучением приводит к комплексным изменениям в их метаболическом профиле. Эти изменения включают снижение содержания ключевых метаболитов энергетического обмена, таких как АТФ, и увеличение продуктов их деградации. На основании наших результатов мы считаем, что метаболомика представляет собой эффективный инструмент для исследования механизмов действия терагерцового излучения на клеточном уровне, и результаты метаболомного скрининга могут быть полезны в понимании биологических эффектов этого излучения и разработке стратегий безопасного его применения в различных областях.

Работа выполнена на уникальной установке Новосибирский лазер на свободных электронах на базе ЦКП «Сибирский центр синхротронного и терагерцового излучения» при поддержке гранта РНФ (Проект No. 19-72-202). Исследование клеток поддержано средствами государственного задания БЧ 2020-0039-1. Анализ методом ВЭЖХ-МС/МС поддержан средствами государственного задания No. FSUS-2020-0035. Изготовление монолитных колонок для ВЭЖХ поддержано средствами проекта No. FWUR-2024-0032.

Список литературы

1. W. Ghann, J. Uddin Terahertz (THz) spectroscopy: a cutting-edge technology // J. Uddin. USA: Coppin State University., vol. 1, pp. 3-20, 2017
2. P.H. Siegel, Terahertz technology in biology and medicine // IEEE Trans Microw. Theory. Tech., vol. 52, pp. 2438-2447, 2004.
3. W.J. Griffiths, T. Koal, Y. Wang, et al. Targeted metabolomics for biomarker discovery // Angew.Chem.Int.Ed., vol. 49, pp. 5426-5445, 2010.
4. G.N. Kulipanov et al. Novosibirsk Free Electron Laser-Facility Description and Recent Experiments. IEEE Trans Terahertz Sci Technol., vol. 5 (5), pp. 798–809, 2015.
5. N.V. Basov, A.D. Rogachev et al. Global LC-MS/MS targeted metabolomics using a combination of HILIC and RP LC separation modes on an organic monolithic column based on 1-vinyl-1, 2, 4-triazole // Talanta., vol. 267, pp. 125168, 2024.

ЛАЗЕРНОЕ СТРУКТУРИВАНИЕ МАГНИТНЫХ НАНОПЛЕНОК ДЛЯ БИОСЕНСОРИКИ

И. О. Джунь^{1*}, Д. В. Шулейко², А. В. Назаров¹, Д. Е. Преснов^{1,2}, В. Ю. Нестеров²,
И. Л. Ромашкина¹, М. Г. Козин¹, Н. Г. Чеченин^{1,2}, С. В. Заботнов².

¹ *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына*

119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

**E-mail: irina.dzhun@gmail.com*

² *Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Физический факультет*

119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

Показана возможность создания методом импульсной лазерной абляции тонких пленок в ацетоне магнитных наночастиц в оксидной оболочке со средним размером 90 нм и лазерно-индуцированного формирования решеток с периодом 1160 ± 20 нм на поверхности многослойной структуры Si/Ta₃₀нм/NiFe10нм/IrMn20нм/Ta30нм. Полученные структуры представляют собой перспективную основу магнитного биосенсора.

В настоящее время ведутся активные исследования по созданию биосенсоров и последующей их интеграции в лаборатории на чипе, позволяющие создавать персональные портативные устройства *in vitro* диагностики. Помимо традиционных методов оптической сенсорики, внимание ученых привлекает разработка магнитных биосенсоров. Принцип действия таких устройств заключается в регистрации изменения магнитного поля, вызванного полями рассеяния магнитных частиц, связанных с помощью биомаркеров с детектируемыми молекулами или клетками [1].

В качестве магнитных меток, создающих изменение магнитного поля, часто выступают магнитные наночастицы (МНЧ). Представляется перспективным использование железных МНЧ в оксидной оболочке из-за их высокой температурной стабильности, биосовместимости и хорошей воспроизводимости [2]. Достаточно универсальным и “химически чистым” методом получения МНЧ является технология импульсной лазерной абляции (ИЛА) в жидкости. Она позволяет получать МНЧ без содержания примесей от химических реагентов и позволяет варьировать состав и размер МНЧ путем варьирования буферной жидкости, параметров лазерного излучения и использования в качестве мишени вместо массивного вещества тонких пленок различных толщин [3].

Помимо формирования методом ИЛА МНЧ, выступающих в роли магнитных меток, сопутствующей задачей в настоящей работе является структурирование фемтосекундными лазерными импульсами поверхности сенсоров магнитного поля, в основу работы которых положен эффект гигантского магнитосопротивления в планарной структуре, состоящей из ферромагнитных и антиферромагнитного слоев [1]. Недостатком планарных 2D магнитных сенсоров является неэффективный захват меченых клеток и низкая чувствительность к компоненте магнитного поля МНЧ, направленной не в плоскости пленки. Для устранения данного недостатка требуется 3D модификация (создание рельефа) поверхности сенсора, которая, с одной стороны, приведет к созданию локальных магнитных полей для захвата и удержания МНЧ, и, с другой стороны, механически предотвратит смывание МНЧ с поверхности сенсора за счет удержания частиц в углублениях. В данной работе для такой модификации предложено использовать облучение фемтосекундными лазерными импульсами, приводящее к появлению поверхностных периодических структур (ППС).

Коллоиды МНЧ были получены методом пискосекундной ИЛА (1064 нм, 34 пс, ~5 мДж) в ацетоне в качестве буферной жидкости. В качестве мишени использовалась пленка железа толщиной 250 нм, осажденная на стеклянную подложку методом магнетронного распыления. Полученные коллоиды демонстрировали отклик при поднесении постоянного магнита к поверхности кюветы. Результаты растровой электронной микроскопии показали, что полученные МНЧ являются сферическими и имеют широкое

распределение по размерам, средний размер частиц составляет 90 нм. Методом просвечивающей электронной микроскопии показано, что полученные частицы представляют собой кристаллическое железо в тонкой (5–20 нм) оксидной оболочке (рис. 1). Данные Мессбауеровской спектроскопии также подтверждают содержание 80% α -Fe в составе МНЧ с возможным содержанием оксидов в виде тонких пленок (оболочек).

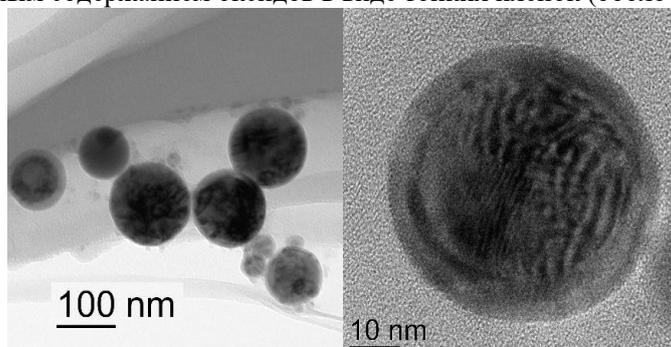


Рис. 1. Изображения МНЧ в просвечивающем электронном микроскопе.

Методом спектроскопии комбинационного рассеяния света с использованием максимального ослабляющего фильтра было показано наличие линии при $\sim 660 \text{ см}^{-1}$ как в исходной пленке, так и в полученных МНЧ, что близко к наиболее интенсивной линии оксида железа $\text{FeO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$. При переходе к фильтру с меньшим ослаблением наблюдается смещение данной линии к 645 см^{-1} и появление дополнительных оксидных линий, соответствующих оксиду железа Fe_2O_3 . Данные изменения связаны с окислением из-за нагрева под действием лазерного излучения. Рост интенсивности оксидных линий при нагреве подтверждает присутствие малого количества оксида в исходных МНЧ.

Во второй части работы проводилось структурирование фемтосекундными лазерными импульсами (1250 нм, 150 фс, $\sim 15 \text{ мкДж}$) многослойной структуры вида $\text{Si}/\text{Ta}30\text{нм}/\text{NiFe}10\text{нм}/\text{IrMn}20\text{нм}/\text{Ta}30\text{нм}$, представляющей собой верхнюю активную часть сенсора магнитного поля, покрытую защитным слоем Ta. Данные оптической микроскопии показали, что на поверхности образца сформировались ППС в виде одномерных решеток, период которых составляет $1160 \pm 20 \text{ нм}$, что близко к длине волны структурирующего излучения. По данным атомно-силовой микроскопии глубина желобов решетки составила $\sim 200 \text{ нм}$, что достаточно для удержания полученных в первой части работы МНЧ.

Таким образом, в данной работе показана возможность использования лазерного структурирования магнитных нанопленок для синтеза коллоидов МНЧ и для модификации рельефа поверхности многослойной магнитной тонкопленочной структуры с целью дальнейшего конструирования из них магнитного биосенсора.

Список литературы

1. H.T. Huang, P. Garu, C.H. Li, et.al. Magnetoresistive Biosensors for Direct Detection of Magnetic Nanoparticle Conjugated Biomarkers on a Chip // SPIN, vol. 9, art. no. 1940002, 2019.
2. R.B. Morgunov, O.V. Koplak, R.S. Allayarov, et.al. Effect of the stray field of Fe/Fe₃O₄ nanoparticles on the surface of the CoFeB thin films // Appl. Surf. Sci., vol. 527, art. no. 146836, 2020.
3. I.O. Dzhun, V.Yu. Nesterov, D.V. Shuleiko, et.al. Magnetic Nanoparticles Produced by Pulsed Laser Ablation of Thin Cobalt Films in Water // Bull. RAS: Phys., vol. 88 (4), pp. 540-548, 2024.

ДВУХРЕЖИМНЫЙ ОПТИЧЕСКИЙ СЕНСОР НА ОСНОВЕ КРЕМНИЕВЫХ НАНОНИТЕЙ ДЛЯ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ БАКТЕРИЙ

К. А. Гончар^{1*}, Д. А. Назаровская¹, П. А. Домнин², О. Д. Гюппенен¹, А. А. Ерохина¹,
М. Ван¹, И. И. Циняйкин¹, С.А. Ермолаева², Л.А. Осминкина¹

¹Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1

*E-mail: k.a.gonchar@gmail.com

²Национальный исследовательский центр эпидемиологии и микробиологии им. Н. Ф. Гамалеи
123098, Российская Федерация, Москва, ул.Гамалеи, д. 18

В работе представлены экспериментальные исследования по обнаружению бактерий *L. Inppocua* – непатогенного штамма листерий. В тонкой пленке пористых нанонитей, покрытых серебряными и золотыми наночастицами, после адсорбции бактерий наблюдались сдвиги интерферометрических полос, связанные с изменением эффективной оптической толщины образцов, позволяющие обнаруживать *L. Inppocua* до концентраций $6,4 \cdot 10^6$ КОЕ/мл. Кроме того, модификация поверхности нанонитей наночастицами серебра и золота придавала им ГКР-активные свойства, что позволило регистрировать спектры комбинационного рассеяния адсорбированных бактерий до концентраций $3,2 \cdot 10^6$ КОЕ/мл. Таким образом, была продемонстрирована двухрежимная оптическая диагностика бактерий.

Оптические биосенсоры имеют значительные преимущества перед другими аналитическими методами благодаря хорошей чувствительности, удобству и простоте использования, воспроизводимости и надежности. Для преобразования сигнала в оптических датчиках можно использовать эффекты интерферометрии, поверхностного плазмонного резонанса, дифракционных решеток фотонных кристаллов, преобразователей на основе оптических волноводов, эллипсометрии и др. [1].

Наиболее распространенные оптические датчики основаны на эффектах интерференции света в тонких слоях кремниевых наноструктур, таких как пористый кремний различной морфологии [2] или кремниевые нанонити (КНН) [3]. Принцип работы такого датчика заключается в том, что освещение тонкого слоя кремниевых наноструктур белым светом приводит к отражению света от верхней и нижней границы наноструктур, создавая интерференцию Фабри-Перо, где частота интерференции определяется эффективной оптической толщиной слоя кремниевых наноструктур [2,4]. Изменение эффективного показателя преломления кремниевых наноструктур после адсорбции биологических молекул и клеток проявляется в смещении интерференционных полос и/или изменении их амплитуды [2–7].

Еще одним популярным методом обнаружения различных биомолекул является гигантское комбинационное рассеяние (ГКР) [8]. Представлен простой метод декорирования КНН наночастицами золота и серебра путем восстановления их из AgNO_3 и AuCl_3 в присутствии 5М HF с целью придания ГКР-активных свойств полученным композитным подложкам [9]. Кроме того, с помощью ГКР на КНН, декорированных золотом, был успешно обнаружен билирубин с пределом обнаружения 1 мкМ [10], а также интерналин В, белок, связанный с патогенными бактериями *Listeria monocytogenes*, был успешно обнаружен с помощью ГКР на КНН, декорированных серебром [11].

В этом исследовании были объединены два метода обнаружения: интерференция Фабри-Перо и ГКР, и было показано, что КНН, покрытые наночастицами золота и серебра, могут быть использованы для создания бимодального оптического сенсора для диагностики бактерий.

Были получены и исследованы КНН, покрытых золотыми и серебряными наночастицами, с толщиной КНН 2,3 мкм и толщиной биметаллического слоя 100 нм. Показана возможность диагностики *L. Inppocua* до концентраций $6,4 \cdot 10^6$ КОЕ/мл по изменению эффективной оптической толщины. Показана возможность диагностики *L. Inppocua* по спектрам ГКР после их адсорбции на КНН, покрытых золотыми и серебряными наночастицами, до концентраций $3,2 \cdot 10^6$ КОЕ/мл. В спектрах ГКР наблюдаются пики, ха-

рактерные для белков клеточной стенки грамположительных бактерий *Listeria*. Можно заключить, что данные образцы эффективны в качестве бимодального оптического сенсора для диагностики бактерий. Разработанный датчик демонстрирует потенциал для быстрой диагностики и идентификации бактерий без использования меток, что делает его универсальным инструментом для разнообразных применений в области обнаружения микробов. Схема работы двухрежимного сенсора приведена на рисунке 1.

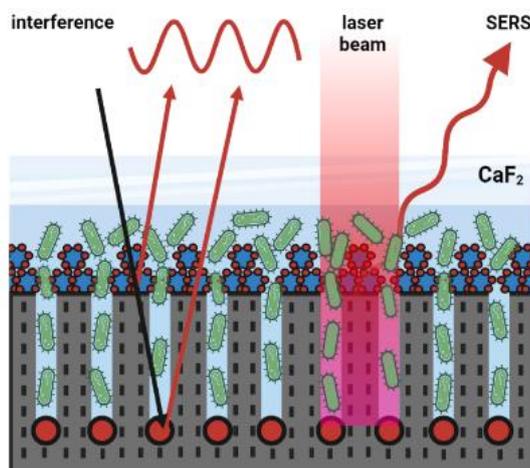


Рис.1. Схема работы двухрежимного сенсора на основе КНН, покрытых золотыми и серебряными наночастицами.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-72-10062, <https://rscf.ru/project/22-72-10062/>.

Список литературы

1. M. Nirschl, F. Reuter, J. Vörös, Review of Transducer Principles for Label-Free Biomolecular Interaction Analysis // *Biosensors*, vol. 1(3), pp. 70-92, 2011.
2. A. Jane, R. Dronov, A. Hodges, et.al. Porous silicon biosensors on the advance // *Trends in biotech.*, vol. 27(4), pp. 230-239, 2009.
3. K.A. Gonchar, S.N. Agafilushkina, D.V. Moiseev, et.al. H1N1 influenza virus interaction with a porous layer of silicon nanowires // *Mater. Res. Express*, vol. 7, p. 035002, 2020.
4. V.S. Lin, K. Motesharei, K.P. Dancil, et.al. A porous silicon-based optical interferometric biosensor // *Science*, vol. 278(5339), 840-843, 1997.
5. M.B. Gongalsky, A.A. Koval, S.N. Schevchenko, et.al. Double Etched Porous Silicon Films for Improved Optical Sensing of Bacteria // *J. Electr. Soc.*, 164(12), p. B581, 2017.
6. N. Massad-Ivanir, G. Shtenberg, E. Segal, Optical Detection of *E. coli* Bacteria by Mesoporous Silicon Biosensors // *J. Vis. Exp.*, vol. 81, p. 50805, 2013.
7. N. Massad-Ivanir, G. Shtenberg, N. Raz, et.al. Porous Silicon-Based Biosensors: Towards Real-Time Optical Detection of Target Bacteria in the Food Industry // *Sci. Rep.*, vol. 6, p. 38099, 2016.
8. S. Pahlow, S. Meisel, D. Cialla-May, et.al. Isolation and identification of bacteria by means of Raman spectroscopy // *Adv. Drug Del. Rev.*, vol. 89, pp. 105-120, 2015.
9. O. Žukovskaja, S. Agafilushkina, V. Sivakov, et.al. Rapid detection of the bacterial biomarker pyocyanin in artificial sputum using a SERS-active silicon nanowire matrix covered by bimetallic noble metal nanoparticles // *Talanta*, vol. 202, pp. 171-177, 2019.
10. A.D. Kartashova, K.A. Gonchar, D.A. Chermoshentsev, et.al. Surface-Enhanced Raman Scattering-Active Gold-Decorated Silicon Nanowire Substrates for Label-Free Detection of Bilirubin // *ACS Biomater. Sci. Eng.*, vol. 8(10), pp. 4175-4184, 2022.
11. K.A. Gonchar, E.A. Alekseeva, O.D. Gyuppenen, et.al. Optical Express Monitoring of Internalin B Protein of *Listeria Monocytogenes* Pathogenic Bacteria Using SERS-Active Silver-Decorated Silicon Nanowires // *Opt. Spectrosc.*, vol. 130, pp. 521-526, 2022.

СОЛЬВАТОХРОМНЫЕ ЭФФЕКТЫ НА СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ФАКТОРА F₀ – ВТОРИЧНОГО ЭМИТТЕРА СВЕЯЩИХСЯ ЧЕРВЕЙ

Д. В. Гульнов^{1*}, Е. В. Немцева^{1,2}, Н. С. Родионова², В. Н. Петушков²

¹Сибирский федеральный университет
660041, Российская Федерация, Красноярск, пр. Свободный, д. 79

*E-mail: dgulnov@sfu-kras.ru

²Институт биофизики СО РАН, Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр СО РАН»

660036, Российская Федерация, Красноярск, Академгородок, д. 50/50

Целью исследования был анализ механизмов сольватохромных эффектов на спектрально-люминесцентные характеристики 7,8-дидеметил-8-гидрокси-5-деазорибофлавина, играющего роль активатора биоломинесцентной реакции светящихся червей и известного как фактор F₀. Были впервые получены спектры поглощения и флуоресценции, а также времена жизни флуоресценции и их спектральные вклады фактора F₀, в протонных и апротонных растворителях с различной полярностью. Проведен регрессионный анализ зависимости спектральных характеристик от эмпирических параметров растворителя, введенных Каталаном.

Земляные черви рода *Henlea* (*H.petushkovi* и *H.rodionovae*) в ответ на раздражители выделяют светящуюся голубовато-зеленую целомическую жидкость (спектральный максимум около 464 нм). В экстрактах этих червей были обнаружены низкомолекулярные компоненты, усиливающие интенсивность биоломинесцентной реакции *Henlea* в десятки раз. Ими оказались деазофлавиновые производные, одно из которых известно как фактор архей F₀ (7,8-дидеметил-8-гидрокси-5-деазорибофлавин). Предполагается, что активаторы играют роль вторичных эмиттеров биоломинесценции, то есть участвуют в безызлучательном переносе энергии с электронно-возбужденных молекул, образующихся в результате реакции, катализируемой ферментом люциферазой. Механизмы влияния среды (растворителя) на спектрально-люминесцентные характеристики фактора F₀ в настоящее время плохо изучены.

Были исследованы спектры поглощения и флуоресценции, а также времена жизни флуоресценции фактора F₀ в протонных и апротонных растворителях разной полярности (всего 17 растворителей). Спектры поглощения в диапазоне 200–700 нм регистрировали спектрофотометром Cary-5000 (Agilent Technologies). Характеристики флуоресценции, при возбуждении 380 и 407 нм, определяли с помощью спектрофлуорометра Fluorolog-3 (Horiba Jobin Yvon), оснащенного модулем DeltaHub для измерения спадов методом счета одиночных фотонов с временной корреляцией. Были проанализированы: положение максимумов спектров, энергия электронного перехода (0-0-перехода), стоков сдвиг, значения и вклады компонент времени жизни флуоресценции.

Было получено, что положение максимума первой полосы поглощения F₀ слабо зависит от полярности растворителя: $\nu_{abs} = 24\,700 \pm 80$ и $25\,000 \pm 300$ см⁻¹ в ряду протонных и апротонных растворителей соответственно. Однако при этом варьирует высота двух плеч спектра поглощения (около 26 300 и 22 200 см⁻¹) относительно основного максимума. Спектры флуоресценции также проявили сложную структуру и содержали не менее трех гауссовых компонент с максимумами около 21 000, 22 300 и 23 400 см⁻¹. Изменение стокова сдвига наблюдалось в пределах 1100-3300 см⁻¹. Был проведен анализ зависимости спектральных характеристик от эмпирических параметров растворителя, введенных Каталаном (S_A – параметр кислотности, S_B – параметр основности, S_P – параметр поляризуемости и S_{DP} – параметр диполярности).

Анализ время-разрешенных характеристик показал, что F₀ характеризуются двумя основными компонентами с характерными временами жизни ~4 и ~2 нс, величина и спектральный вклад которых варьирует в зависимости от растворителя.

Исследование частично выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (№ FWES-2024-0018).

ПРИМЕНЕНИЕ ОПТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ В СТАНДАРТИЗАЦИИ КОЛЛАГЕНСОДЕРЖАЩЕГО ГИДРОГЕЛЯ ПРИ ЗАМЕЩЕНИИ ДЕФЕКТОВ СЛИЗИСТОЙ ПОВЕРХНОСТИ РОТОВОЙ ПОЛОСТИ

С. С. Иванов¹, Н. А. Рябов², О. О. Фролов¹, В. А. Лысова², Е. В. Тимченко¹,
А. Д. Лысов³, П. Е. Тимченко¹, Л. Т. Волова²

¹Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34

²Самарский государственный медицинский университет, институт экспериментальной медицины и биотехнологий, г. Самара, ул. Чапаевская, 89

³ООО «Дентал-антистресс», г. Самара, ул. Советской Армии, 180/3

В работе представлены результаты применения оптических методов в стандартизации коллагенсодержащего гидрогеля при замещении дефектов слизистой поверхности ротовой полости. В качестве основного метода исследования был использован метод спектроскопии комбинационного рассеяния. Дополнительным методом исследования был метод ИК-Фурье-спектроскопии. В результате проведенных исследований с помощью оптических методов в составе гидрогеля выявлен коллаген I типа, что свидетельствует о сохранности структуры коллагена в полученном гидрогеле. Полученные результаты исследований могут быть в дальнейшем использованы в качестве экспресс-оценки и стандартизации коллагенсодержащего гидрогеля с добавлением различных компонентов для персонализированного 3D-принтинга при замещении дефекта слизистой поверхности ротовой полости.

На сегодняшний день 3D-биопечать тканей и органов является одним из перспективных методов биофабрикации и вызывает большой интерес в направлении изготовления сложных конструктов для регенерации тканей, позволяющее обеспечивать изготовление персонализированных имплантов с учетом анатомии, патологии и биомеханических свойств органов и частей тела организма пациента [1]. Для осуществления биопечати необходим такой важный компонент как биочернила, для получения которых используются различные виды гидрогелей, среди которых, на наш взгляд, наибольшими преимуществами обладают природные биополимеры и биополимеры аллогенного происхождения, выделенных из тканей человека, благодаря своим уникальным свойствам, в частности, биосовместимости и биодеградируемости, а также низкой антигенности и высокой степени регенерации. Гидрогели используются в качестве основы или аналога нативного внеклеточного матрикса, который позволяет обеспечивать условия, необходимые для клеточного роста, формирования тканей и обеспечения различных комбинаций компонентов внутри гидрогелей с желаемыми сочетаниями свойств итогового продукта [2, 3].

Важным этапом процесса получения биотрансплантов является их стандартизация, причем как на этапе получения исходного материала для биопечати – гидрогелей, так и итогового напечатанного продукта. Исходя из чего, необходимо проведение оценки качества гидрогелей и биочернил с целью получения данных о структуре содержащихся в них компонентов.

В этой связи актуальным является внедрение технологий 3D-биопечати в медицинскую практику, а также разработка способов получения гидрогелей на основе аллогенных биоматериалов, в качестве перспективного компонента биочернил для 3D-биопечати аналогов слизистой поверхности ротовой полости и разработка способов стандартизации полученных гидрогелей и напечатанных конструктов различными современными физико-химическими методами.

Поэтому, целью работы являлась оценка состава коллагенсодержащего гидрогеля при замещении дефекта слизистой поверхности ротовой полости физико-химическими методами.

Объектами исследования являлись: аллогенный коллагенсодержащий гидрогель (полученные из костной ткани человека), образец коллагена I типа и образцы нативной и лиофилизированной ткани слизистой поверхности ротовой полости человека.

В качестве основных оптических методов исследований были использованы метод спектроскопии комбинационного рассеяния и ИК-Фурье-спектроскопия.

Метод спектроскопии комбинационного рассеяния (КР) был реализован с помощью экспериментального стенда, состоящего из полупроводникового лазера (LML-785.0RB-04,450мВт), спектрографа (SharmrockSR-303i) с интегрированной цифровой камерой, охлаждаемой до -60°C , оптического модуля комбинационного рассеяния (PBL785) и компьютера. Спектральный диапазон 450-1800 cm^{-1} . Дальнейшая обработка спектров КР заключалась в фильтрации автофлуоресценции в спектрах КР с помощью метода вычитания флуоресцентной составляющей полиномиальной аппроксимацией I-ModPoly со степенью полинома 11.

С помощью методов SNV и MaximumLikelihoodEstimationSavitzky-Golayfilter (MLE-SG) (=4) были проведена нормализация и сглаживание спектров КР.

В качестве дополнительного метода анализа биоматериалов проводилась ИК-Фурье-спектроскопия образцов, на приборе ФТ-801 («СИМЕКС», Россия).

В результате проведенных исследований с помощью метода спектроскопии комбинационного рассеяния установлено, что в составе коллагенсодержащего гидрогеля выявлены АмидIII (линии КР $\sim 1200\text{-}1300\text{cm}^{-1}$), АмидII (линия КР $\sim 1554\text{ cm}^{-1}$), CH_2 колебания $\sim 1450\text{ cm}^{-1}$ и АмидI (линия КР $\sim 1650\text{-}1665\text{ cm}^{-1}$). Данные линии КР указывают на наличие коллагена I типа в составе исследуемого гидрогеля. Подобный спектральный состав также имеет слизистая оболочка полости рта.

Дополнительно, с помощью ИК-Фурье-спектроскопии установлено, что коллагенсодержащий гидрогель имеет в своем составе амидные структуры, характерные для коллагена I типа, что свидетельствует о сохранности структуры коллагена в полученном гидрогеле.

Полученные результаты исследований могут быть в дальнейшем использованы в качестве экспресс-оценки и стандартизации коллагенсодержащего гидрогеля с добавлением различных компонентов для персонализированного 3D-принтинга при замещении дефекта слизистой поверхности ротовой полости.

Список литературы

1. S. Raees, F. Ullah, F. Javed, et.al. Classification, processing, and applications of bioink and 3D bioprinting: A detailed review // International Journal of Biological Macromolecules, vol. 232 art.no. 123476, 2023.
2. M.V. Lomakin, A.S. Filatova, I.I. Soloshchanskii Guided bone regeneration in the reconstruction of the alveolar bone volume for dental implantation // Russian Stomatology vol. 4(5), pp.15-18, 2011.
3. I.L. Tsiklin, E.I. Pugachev, A.V. Kolsanov, et.al. Biopolymer Material from Human Spongiosa for Regenerative Medicine Application // Polymers, vol. 14(5), art.no. 941, 2022.

ЭФФЕКТЫ БЛИЖНЕПОЛЕВОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В КОЛЛОИДНЫХ НАНОКЛАСТЕРАХ Au-CeYbF₃ ПРИ КВАНТОВО-ПЛАЗМОННОМ ИММУНОАНАЛИЗЕ

Э. А. Избасарова^{1*}, А. Р. Газизов¹

¹Казанский федеральный университет, Институт физики, 420008, Российская Федерация, Казань, Кремлёвская, д. 18

*E-mail: Izbasarova.E.A@mail.ru

Взаимодействие наночастиц золота с люминесцентными наночастицами (ЛНЧ) приводит к конкуренции двух эффектов: Фёрстера и Парселла. При этом для усиления люминесценции важно избежать преобладания эффекта Фёрстера. Исследование с помощью метода FDTD позволило определить условия, при которых усиление Парселла преобладает. Была разработана методика анализа усиления радиационных и нерадиационных переходов, что открывает новые перспективы для повышения чувствительности сенсоров на основе коллоидных растворов ЛНЧ.

За последние несколько лет люминесцентные наночастицы (ЛНЧ), легированные редкоземельными элементами, стали многообещающими материалами благодаря их уникальным способностям, таким как испускание фотонов с преобразованием частоты вверх [1], а также отсутствие фотообесцвечивания и мигания, что делает их идеальными кандидатами для создания сенсоров и биологических анализаторов [2]. Многие из этих сенсоров используют резонансный перенос энергии (РПЭ) в качестве механизма действия для обнаружения конкретной молекулы-мишени [3]. Обычно это основано на изменении люминесценции ЛНЧ при передаче энергии из возбужденного состояния ЛНЧ (донора) к акцептору (молекула-мишень). Было продемонстрировано, что плазмонные наноструктуры, размещенные в непосредственной близости от ЛНЧ, являются отличным инструментом для настройки люминесценции путем усиления или гашения интенсивности люминесценции [4]. Однако, всё же существуют некоторые проблемы, связанные с использованием плазмонно-усиленной апконверсии, такие как низкая стабильность некоторых материалов и возможное повреждение живых клеток при высоких интенсивностях света [5]. Нашей же конечной целью является разработка сенсора для определения наличия важных в медицинском и биологическом аспектах молекул в условиях водного раствора, сохраняя их живыми и неповрежденными. Это предполагает внедрение наночастиц в раствор для генерации сигнала без ущерба для определяемых молекул. В процессе взаимодействия золотых наночастиц с ЛНЧ возникают два конкурирующих эффекта: фёрстеровское ближнеполевое взаимодействие и парселловское усиление излучения в дальнюю зону. При этом для усиления люминесценции важно избежать чрезмерного потребления энергии золотом, т.е. преобладания эффекта Фёрстера. В связи с этим, нашей первоочередной задачей является определение конфигураций и физических параметров, при которых усиление Парселла преобладает над взаимодействием Фёрстера.

С этой целью нами было проведено моделирование усиления излучения диполя в ЛНЧ с использованием метода конечных разностей во временной области (FDTD). Мы провели исследование для различных неэквивалентных (по симметрии) конфигураций, включающих до 4 плазмонных наночастиц (Au), окружающих ЛНЧ, а также для ЛНЧ в нанокластерах, расположенных вблизи золотой подложки. Общее количество смоделированных конфигураций составило 26, в 7 из которых рассматривался нанокластер вблизи золотой подложки. В рамках исследования была разработана методика, позволяющая анализировать усиление скоростей радиационных и нерадиационных переходов, что открывает новые перспективы для повышения чувствительности сенсоров на основе коллоидных растворов ЛНЧ. Одним из основных результатов работы является преобладание эффекта усиления Парселла над нерадиационными потерями в результате энергетического обмена Фёрстера на любом расстоянии между ЛНЧ размером 20 нм

и плазмонной наночастицей размером 90 нм. Фактор Парселла всех смоделированных конфигураций представлен на общей диаграмме плазмонного усиления (рис. 1).

Моделирование показывает, что коэффициент Парселла в случае наличия одной золотой частицы составляет около 100, а для кластеров из двух золотых наночастиц с исследованным в данной работе размером достигают 300 при определенных конфигурациях и ориентациях дипольного момента параллельно оси димера. При добавлении третьей и последующей золотой наночастицы в кластер величина коэффициента Парселла существенно не изменяется. Более того, вероятность образования в коллоидном растворе кластеров с большим числом частиц в случае, когда они не слипаются, уменьшается с ростом числа частиц. Нанокластеры с большим числом частиц или расположенные на золотой подложке поддерживают возбуждение плазмонного резонанса в других областях видимого спектра. Моделирование плазмонного резонанса в присутствии одной или нескольких молекул аналита вблизи люминофора в кластере золотых наночастиц на золотой подложке приводит к небольшому изменению спектральной зависимости коэффициента Парселла, что позволяет спроектировать биосенсор на основе коллоидных ЛНЧ и плазмонных наночастиц.

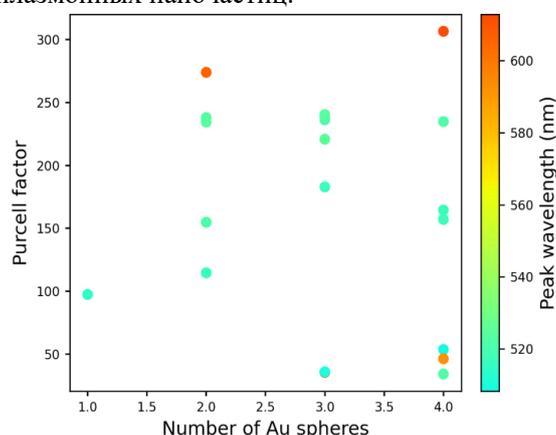


Рис. 1. Диаграмма, показывающая величину фактора Парселла для нанокластеров с различным количеством частиц Au. Спектральное положение пиков плазмонного резонанса обозначено цветом.

Полученные результаты позволили определить конфигурации взаимодействия частиц для создания биосенсоров на основе тушения или усиления люминесценции.

Данная работа финансировалась за счет субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету по государственному заданию в сфере научной деятельности (ФЗСМ-2022-0021).

Список литературы

1. X. Qin, J. Xu, Y. Wu, X. Liu. Energy-transfer editing in lanthanide-activated upconversion nanocrystals: a toolbox for emerging applications // *ACS Cent. Sci.* vol. 5 (1), pp. 29-42, 2019.
2. D. Mendez-Gonzalez, E. Lopez-Cabarcos, J. Rubio-Retama, M. Laurenti. Sensors and bioassays powered by upconverting materials // *Adv. Colloid Interface Sci.* vol. 249, pp. 66-87, 2017.
3. Y. Han, M.O. Noor, A. Sedighi, et al. Inorganic nanoparticles as donors in resonance energy transfer for solid-phase bioassays and biosensors // *Langmuir.* vol. 3 (45), pp. 12839-12858, 2017.
4. D. Mendez-Gonzalez, S. Melle, O.G. Calderón, et al. Control of upconversion luminescence by gold nanoparticle size: from quenching to enhancement // *Nanoscale.* vol. 11 (29), pp. 13832-13844, 2019.
5. D.M. Wu, A. García-Etxarri, A. Salleo, J.A. Dionne. Plasmon-enhanced upconversion // *J. Phys. Chem. Lett.* vol. 5 (22), pp. 4020-4031, 2014.

ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ И ОПТИЧЕСКИХ ОСОБЕННОСТЕЙ ПЕРИФЕРИЧЕСКОГО АНТЕННОГО КОМПЛЕКСА ПУРПУРНЫХ БАКТЕРИЙ

Е. А. Ковалева^{1*}, Л. В. Бегунович¹, М. М. Коршунов^{1,2}, В. Ф. Шабанов^{1,2}

¹ФИЦ КНЦ СО РАН

660036, Российская Федерация, Красноярск, ул. Академгородок, д. 50

*E-mail: kovaleva.ea@iph.krasn.ru

²Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН

660036, Российская Федерация, Красноярск, ул. Академгородок, д. 50, стр. 38

В ходе работы при помощи методов квантовой химии было исследовано влияние аминокислотного окружения на спектр оптического поглощения молекул бактериохлорофилла *a* в составе периферического собирающего комплекса пурпурных бактерий *Rhodoblastus acidophilus*. Продемонстрирована важность учета обменного взаимодействия для корректного описания оптических свойств в подобных системах, обсуждены эффекты, связанные с выбором обменно-корреляционного функционала для расчетов в рамках теории функционала плотности.

В структуре периферического светособирающего комплекса (LH2) пурпурных бактерий *Rhodoblastus acidophilus* присутствуют две подструктуры в виде колец, состоящих из молекул бактериохлорофилла *a* (BChl *a*), характеризующиеся пиками поглощения с длиной волны 800 и 850 нм (B800 и B850, соответственно).

Атомная и электронная структура, а также оптические свойства моделей на основе BChl *a* были изучены рядом методов на основе теории функционала плотности. Для систем большого размера целесообразно производить расчет в рамках метода DFTB, что позволяет существенно сократить время расчета. В работе был использован стандартный набор параметров межатомного взаимодействия 3-об и коррекция дисперсионных взаимодействий D3. Поскольку для структуры B800 характерно большое расстояние между соседними молекулами BChl *a* (21,1 Å, согласно данным рентгеновской дифракции [1]), также были проведены DFT расчеты одиночной молекулы в периодических граничных условиях с вектором трансляции, соответствующим расстоянию Mg-Mg в B800. С целью исключения нежелательных взаимодействий в периодических граничных условиях вдоль направлений, перпендикулярных периодическому, задавался вакуумный промежуток. Расчеты проводились в программном пакете OpenMX в рамках метода DFT с использованием GGA-PBE функционала и D3 коррекции.

В оптимизированной структуре пиррольные кольца BChl располагаются в плоскости, в то время как по данным рентгеновской дифракции наблюдается искажение пиррольных колец, в результате которого они образуют форму купола. Такое искажение вызвано окружающими BChl аминокислотными остатками, которые отсутствуют в модели. В связи с этим далее было исследовано влияние ближайших к пиррольным кольцам исследованных BChl *a* аминокислотных остатков в структуре LH2. Для структуры B800 были рассмотрены аминокислоты протеиновой цепочки α , расположенные над плоскостью комплекса (N-карбоксиметионин (Cxm), аспарагин (Asn), глутамин (Gln)), и β , находящиеся сбоку от него (аргинин (Arg), треонин(Thr)). Во всех случаях наблюдается красный сдвиг пиков поглощения, при этом ключевую роль играет наличие аминокислотных остатков N-карбоксиметионина, аргинина и аспарагина (рис. 1), что согласуется с имеющимися в литературе данными.

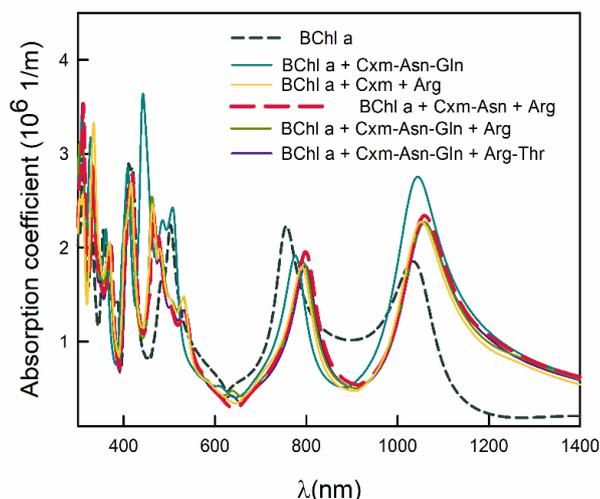


Рис. 1. Спектры поглощения изолированной молекулы BChl *a* и моделей, содержащих аминокислотные остатки протеиновых цепочек α и β

Дальнейшее увеличение числа аминокислотных остатков путем добавления глутамина над плоскостью цикла и треонина сбоку от него не приводит к существенному изменению положения максимума поглощения (табл. 1).

Таблица 1

Положение максимума в ближнем ИК диапазоне спектра поглощения, полученное при расчете в программном пакете OpenMX с использованием функционала PBE

Структура	BChl <i>a</i>	BChl <i>a</i> + Cxm-Asn-Gln	BChl <i>a</i> + Cxm + Arg	BChl <i>a</i> + Cxm-Asn + Arg	BChl <i>a</i> + Cxm-Asn-Gln + Arg	BChl <i>a</i> + Cxm-Asn-Gln + Arg-Thr
Q_x , нм	75 1	776	792	798	794	798
Q_y , нм	10 34	1044	1053	1060	1058	1060

Поскольку функционал PBE систематически недооценивает ширину запрещенной зоны, был проведен расчет спектров поглощения с использованием обменно-корреляционных функционалов B3LYP и HSE, реализованных в программном пакете VASP. Включение доли Хартри-Фоковского обмена в функционал обменно-корреляционной энергии приводит к увеличению ширины запрещенной зоны и, как следствие, к сдвигу максимумов поглощения в коротковолновую область. При этом локализация НОМО и LUMO орбиталей остается неизменной, меняется только их энергия. Расчеты с использованием функционала HSE с разной долей Хартри-Фоковского обмена ($\alpha = 15, 25$ и 35%) показывают, что увеличение α приводит к большему сдвигу ближнего ИК пика в коротковолновую область спектра.

Исследование выполнено в рамках научной тематики Госзадания ФИЦ КНЦ СО РАН.

Список литературы

1. M.Z. Papiz et al. The structure and thermal motion of the B800-850 LH2 complex from *Rps. acidophila* at 2.0 Å resolution and 100 K: New structural features and functionally relevant motions // *J Mol Biol.*, vol. 326. pp. 1523-1538, 2003.

ИССЛЕДОВАНИЕ УПРУГИХ СВОЙСТВ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ КОЛЛАГЕНА МЕТОДАМИ ОПТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

А. В. Лактионова^{1*}, В. А. Зыкова¹

¹*Институт автоматизации и электрометрии СО РАН
630090, Российская Федерация, Новосибирск, Проспект Академика Коптюга, д. 1
E-mail: a.laktionova@g.nsu.ru

Данная работа посвящена изучению упругих свойств гидрогелей на основе коллагена с помощью методов оптической спектроскопии (спектроскопия комбинационного рассеянного света (КРС) и рассеяния Мандельштама-Бриллюэна (РМБ)). В ходе исследования были синтезированы и охарактеризованы гидрогели с различным содержанием воды. Анализ спектров КРС позволил определить изменения в химическом составе при синтезе гидрогелей, а также определить концентрацию белка в образцах. Анализ позиции и ширины бриллюэновских линий показал, что уменьшение содержания воды приводит к увеличению упругого модуля гидрогелей.

Гидрогели на основе коллагена широко применяются в различных областях биомедицины: тканевая инженерия, доставка лекарств, 3D-биопечать. В вышеперечисленных приложениях необходимо обладать знаниями об упругих свойствах гидрогелей, которые зависят от содержания воды.

Спектроскопия рассеяния Мандельштама-Бриллюэна (РМБ) является быстроразвивающейся методикой для измерения упругих свойств (гигагерцовый модуль упругости и скорость звука) материала. Она позволяет бесконтактно охарактеризовать локальные механические характеристики среды, что важно при работе с биообъектами. Основной целью данной работы является изучение упругих свойств гидрогелей на основе коллагена методом спектроскопии РМБ.

Поскольку волокна коллагена предрасположены к самосборке, данный белок хранится в растворе уксусной кислоты ($\text{pH} = 3,4$), и для синтеза гидрогелевых образцов необходимо повысить pH до 7, что было достигнуто с помощью двух основных протоколов [1, 2]. Первый основан на нейтрализации уксусной кислоты щелочью, данный протокол является общепринятым, но используется при работе с растворами с низким содержанием белка. Вторая методика предполагает использование паров аммиака и эффективно работает для широкого диапазона концентраций коллагена, однако полученные в ходе такого протокола образцы требуют дополнительной характеристики для исключения появления побочных продуктов при синтезе гидрогелей.

Характеризация полученных образцов осуществлялась с помощью спектров комбинационного рассеяния света (КРС) в области “fingerprint”. Результаты, полученные при анализе спектров КРС высушенных гидрогелей, показали присутствие побочных продуктов при синтезе гидрогелей по протоколу [2]. Однако последующая отмывка в дистиллированной воде позволяет их удалить из образцов.

После оптимизации протокола [2] были изготовлены гидрогели на основе коллагена с различным содержанием воды. Для определения концентрации белка были дополнительно измерены и проанализированы спектры КРС гидрогелей на основе желатина (продукт денатурации коллагена) в области частот, соответствующим колебаниям СН- и ОН- групп. После обработки полученных данных была построена зависимость отношения интенсивностей линий ОН (3420 см^{-1}) к СН (2940 см^{-1}) от содержания воды в образцах. Массовая доля воды была измерена с помощью высокоточного взвешивания гидратированных и высушенных гидрогелей. Данная зависимость была использована в качестве калибровочной прямой для определения концентрации коллагена. Характеризация упругих свойств гидрогелей проводилась с использованием метода спектроскопии РМБ. Анализ спектров РМБ показал, что увеличение концентрации белка приводит к смещению бриллюэновской линии в область высоких частот: от 7,5 ГГц (полностью гидратированный) до 18,7 ГГц (полностью дегидратированный). Также было замечено, что ширина пика РМБ меняется при варьировании содержания коллагена

и её максимальное значение достигается при концентрации белка 70% [w/w], что может быть связано с изменением времени структурной релаксации.

Список литературы

1. Y. Li, et.al. pH effects on collagen fibrillogenesis in vitro: Electrostatic interactions and phosphate binding // *Materials Science and Engineering: C*, vol. 29(5), pp. 1643-1649, 2009.
2. G.B. Ramírez-Rodríguez, et.al. pH-responsive collagen fibrillogenesis in confined droplets induced by vapour diffusion // *Journal of Materials Science: Materials in Medicine*, vol. 25, pp. 2305-2312, 2014.

СПОСОБЫ УПРАВЛЕНИЯ ОКИСЛЕНИЕМ ТЕТРАГИДРОБИОПТЕРИНА ПРИ ФОТОТЕРАПИИ ВИТИЛИГО

Д. А. Макарова^{1*}, А. С. Низамутдинов¹, Т. А. Телегина², Ю. Л. Вечтомова², А. А. Буглак³

¹ Институт физики Казанского федерального университета, Казань, Россия

* E-mail: makarovadaryaaa@mail.ru

² Институт биохимии А.Н. Баха, Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологий» Российской академии наук, Москва, Россия

³ Физический факультет, Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В данной работе показано, что наночастицы Pt-Pd являются сильными катализаторами окислительной реакции тетрагидробиоптерина в присутствии кислорода. Причем, значительно ускоряется как реакция автоокисления тетрагидробиоптерина, так и фотоокисления при облучении ультрафиолетом с длиной волны 308 ± 10 нм с образованием димеров дигидроптерина.

Тетрагидробиоптерин (H_4Bir) представляет собой кофермент фенилаланингидроксилазы и участвует в окислении фенилаланина до тирозина (предшественник меланина). Доказано, что избыточное количество H_4Bir и продуктов его окисления содержится в пораженных участках кожи при витилиго [1,2]. Это заболевание, представляющее собой депигментированные пятна эпидермиса белого цвета с четкими краями.

Исследования показывают, что облучение ультрафиолетовым (УФ) светом способствует димеризации дигидроптерина с полосой поглощения в диапазоне 245 нм [3,4], таким образом, прерывая образование избыточного количества H_4Bir и конечных продуктов реакции его окисления. Проведенные ранее эксперименты [5,6] показали, что наиболее эффективным в реакции образования димеров дигидроптерина является УФ-В излучение, хотя механизм действия до конца не изучен. Последние десятилетия, в качестве дополнения терапии кожных заболеваний, включая витилиго, так же используются наночастицы (НЧ) Pt-Pd, действующие как антиоксиданты благодаря своей высокой каталитической активности [7,8].

Целью настоящих исследований является изучение влияния наночастиц платины и палладия Pt-Pd фирмы Toyokose Pharmaceutical Co. (Токуо, Япон) и УФ света с длиной волны 308 ± 10 нм на процесс окисления тетрагидробиоптерина.

Тетрагидробиоптерин в 0.01 М фосфатном буфере ($pH = 7,2$) облучали светом ксеноновой лампы спектрофлуориметра HORIBA FluoroMax-4 на длине волны 308 ± 10 нм в течение 3 минут, после чего спектры поглощения фиксировались на спектрофотометре Shimadzu 1601-PC. Параллельно проводилось темновое окисление H_4Bir . В результате получены спектры поглощения раствора H_4Bir при авто- и фотоокислении (3 этапа облучения), в том числе с добавлением наночастиц Pt-Pd в концентрации $C = 0.6$ мкл/мл. На рис.1 представлены разностные спектры поглощения, которые представляют собой разницу между последующим и исходным спектром поглощения.

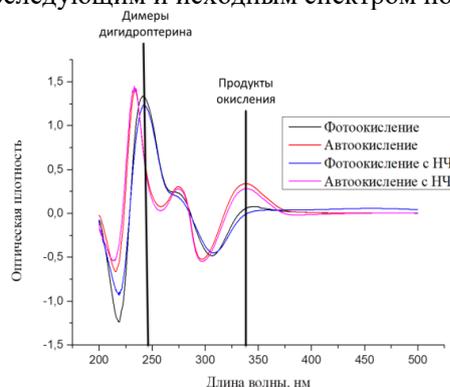


Рис.1. Разностные спектры поглощения раствора тетрагидробиоптерина при авто- и фотоокислении, в том числе с добавлением наночастиц Pt-Pd

На рис.1 видна разница между авто- и фотоокислением тетрагидробиоптерина. В случае фотоокисления (при УФ облучении с длиной волны 308 ± 10 нм) образуются димеры дигидроптерина, которые имеют пик поглощения в области 245 нм [3]. При автоокислении образуются продукты окисления H_4Bir (биоптерин, птерин, дигидробиоптерин) с поглощением в области 325-340 нм, которые в избыточном количестве содержатся в пораженных витилиго участках кожи [2].

Так же был оценен процент образования димеров дигидроптерина относительно исходного тетрагидробиоптерина (рис.2) при фотоокислении.

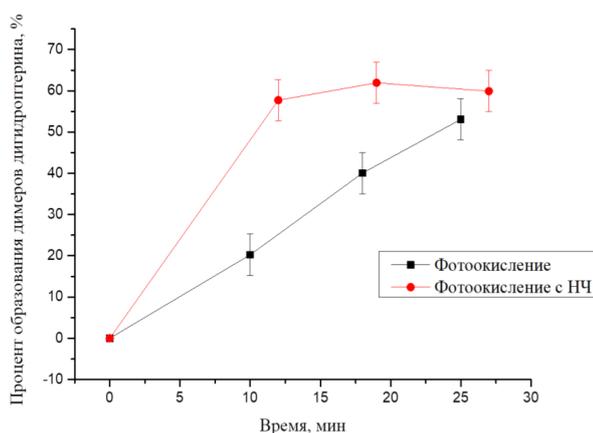


Рис. 2. Зависимость процента образования димеров дигидроптерина (относительно исходного продукта тетрагидробиоптерина) от времени

Таким образом, на рис.2 видно, что при фотоокислении с добавлением наночастиц Pt-Pd было образовано больше димеров дигидроптерина, чем при облучении той же длиной волны, но без наночастиц. Это подтверждает каталитические свойства наночастиц Pt-Pd в реакции окисления H_4Bir , в том числе в образовании димеров дигидроптерина при облучении ультрафиолетом с длиной волны 308 ± 10 нм.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ 20-73-10029 (<https://rscf.ru/project/20-73-10029/#!>).

Список литературы

1. Ch. Bergqvista, et.al. Vitiligo: A Review // *Dermatology*, vol. 236 (6), pp. 571-592, 2020.
2. H. Chung, et.al. The nuts and bolts of low-level laser (light) therapy // *Annals of biomedical engineering*, vol. 40, pp. 516-533, 2012.
3. T.I. Karu, et.al. Exact action spectra for cellular responses relevant to phototherapy // *Photomedicine and Laser Therapy*, vol. 23, pp. 355-361, 2005.
4. A.A. Buglak, et.al. Photooxidation of tetrahydrobiopterin under UV irradiation: Possible pathways and mechanisms // *Photochemical and Photobiology*, vol. 90 (5), pp. 1017-1026, 2014.
5. K.U. Schallreuter, et.al. In vivo and in vitro evidence for hydrogen peroxide (H_2O_2) accumulation in the epidermis of patients with vitiligo and its successful removal by a UVB-activated pseudocatalase // *J Investig. Dermatol. Symp. Proc.*, vol. 4 (1), pp. 91-96, 1999.
6. Т.А. Телегина и др. Фотоокисление тетрагидробиоптерина как основа фототерапии витилиго // *Оптика и спектроскопия*, Т. 130, № 5, С. 761-767, 2022.
7. S. Shibuya, et.al. Palladium and platinum nanoparticles attenuate aging-like skin atrophy via antioxidant activity in mice // *PLoS One*, 2014.
8. Kh.S. Siddiqi, et.al. Characterization and Uses of Palladium/Platinum Nanoparticles // *Nanoscale Research Letters*. vol. 11, iss. 482, 2016.

ВЛИЯНИЕ КЛЕТОК ЭНДОТЕЛИЯ НА МЕЖКЛЕТОЧНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В МИКРОКАНАЛАХ: ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

М. К. Максимов^{1*}, П. Б. Ермолинский¹, А. Н. Семенов¹, О. Н. Щегловитова², А. Е. Луговцов¹,
А. В. Приезжев¹

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1

*E-mail: madoway@yandex.ru

²НИЦЭМ имени Н.Ф. Гамалеи, Москва, Россия
123098, Российская Федерация, Москва, ул. Гамалеи, д. 18

В данной работе оптическими методами *in vitro* исследовалось межклеточное взаимодействие эритроцитов и эндотелиоцитов. С помощью лазерного пинцета были измерены силы адгезии эритроцитов к эндотелию, а также силы агрегации эритроцитов при добавлении в плазму крови или цельную кровь различных соединений (L-Аргинин, L-NAME), воздействующих на взаимодействие данных клеток. Методом лазерной агрегометрии была исследована агрегация эритроцитов в потоке крови в присутствии эндотелиальных клеток. Результаты демонстрируют снижение сил агрегации эритроцитов в присутствии эндотелия при стимуляции выделения оксида азота. В потоке агрегация эритроцитов также снижается в присутствии клеток эндотелия. Силы адгезии эритроцитов к эндотелию не изменяются или незначительно снижаются (в некоторых случаях) при увеличении концентрации оксида азота.

Течение крови в терминальных капиллярах определяется комплексом параметров, называемых микрореологическими. В первую очередь это параметры эритроцитов, наиболее многочисленных клеток крови, в частности – их деформируемость и способность к агрегации. Также решающую роль играет вязкость плазмы крови и параметры эндотелиоцитов - клеток, выстилающих сосуды изнутри. Патологические изменения упомянутых параметров приводят к нарушению насыщения тканей кислородом, повышенному тромбообразованию и другим негативным последствиям [1]. Например, при серповидно-клеточной анемии наблюдается значительное усиление адгезии эритроцитов к клеткам эндотелия, а при артериальной гипертензии – увеличение агрегации эритроцитов, то есть их адгезии друг к другу [2,3]. Межклеточное взаимодействие при кровообращении не ограничивается непосредственным механическим контактом между клетками, но также включает в себя межклеточную сигнализацию, то есть передачу сигналов посредством особых молекул-посредников. Так, эндотелиоциты являются основным источником оксида азота в кровотоке, увеличивающего деформируемость эритроцитов и снижающего их способность к агрегации [4].

Лазерный пинцет – установка, позволяющая с помощью сильно сфокусированного лазерного пучка захватывать диэлектрические частицы и манипулировать ими. Благодаря этому возможно измерение сил межклеточного взаимодействия. В данной работе был использован двухканальный лазерный пинцет на основе Nd:YAG лазера (1064 нм) [5]. Данный метод был применён при измерении сил взаимодействия двух эритроцитов, а также сил взаимодействия одного эритроцита и монослоя эндотелиальных клеток. Под силой агрегации понимается минимальная сила, необходимая для предотвращения агрегации пары частично перекрывающихся эритроцитов, под силой дезагрегации понимается минимальная сила, необходимая для разъединения такой пары. В целях минимизации погрешностей, вызванных индивидуальными особенностями клеток и доноров, данные были нормированы на среднее значение контроля для каждого донора.

В данной работе был использован лазерный агрегометр эритроцитов RheoScan-AnD300 (RheoMediTech, Корея). Лазерный пучок падает на кювету, заполненную цельной кровью, в микроканале которой создаётся поток. Детектируется интенсивность света, рассеянного назад. Чем меньше размер рассеивающих частиц (агрегатов эритроцитов) и их число, тем выше детектируемый сигнал. Разница давлений между концами микроканала кюветы монотонно снижается с течением времени измерения (1-2 мину-

ты), и в определённый момент времени наблюдается динамическое равновесие между процессами агрегации и дезагрегации эритроцитов. Сдвиговое напряжение в кювете, рассчитываемое для этого момента, называется критическим сдвиговым напряжением. Данный параметр характеризует гидродинамическую прочность агрегатов.

Результаты экспериментов, выполненных с лазерным пинцетом, свидетельствуют о снижении сил агрегации и дезагрегации эритроцитов в присутствии эндотелия, проинкубированного с L-Аргинином. L-Аргинин является субстратом фермента синтазы оксида азота, присутствующего в эндотелии. Соответственно, добавление данного соединения к эндотелию стимулирует увеличение выработки оксида азота, чем и объясняется снижение агрегации эритроцитов. В пользу данной гипотезы свидетельствует исчезновение эффекта при предварительной инкубации эндотелия с ингибитором данного фермента, L-NAME. Зависимость величины эффекта от концентрации L-Аргинина имеет “колоколообразную” зависимость: максимальное снижение сил наблюдается при концентрации 100 мкМ, дальнейшее увеличение концентрации приводит к увеличению сил вплоть до возвращения значений к контрольным при 1000 мкМ (рис. 1).

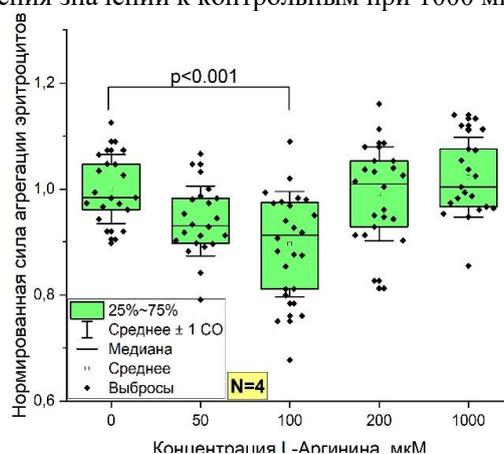


Рис. 1. Зависимость нормированной силы агрегации эритроцитов от концентрации L-Аргинина.

Мы считаем, что подобная зависимость возникает из-за ингибирования синтазы оксида азота своим продуктом при высоких концентрациях, что в физиологических условиях предотвращает цитотоксический эффект высоких концентраций оксида азота. Результаты экспериментов, выполненных с лазерным агрегометром, свидетельствуют о снижении критического сдвигового напряжения при добавлении суспензии эндотелиальных клеток в цельную кровь. Также данный параметр снижен в кюветах, покрытых монослоем эндотелиальных клеток. Это свидетельствует о снижении гидродинамической прочности агрегатов под воздействием клеток эндотелия. Вызван ли эффект конкретно оксидом азота, как в случае с L-Аргинином, ещё предстоит выяснить. Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РФФ № 22-15-00120.

Список литературы

1. D. De Backer et.al. Microcirculatory alterations: potential mechanisms and implications for therapy // *Ann Intensive Care*, vol. 1, № 1, p. 27, 2011.
2. J.-L. Wautier, M.-P. Wautier, Cellular and molecular aspects of blood cell–endothelium interactions in vascular disorders // *Int J Mol Sci*, vol. 21, № 15, p. 5315, 2020.
3. P. Ermolinskiy et.al. Interaction of erythrocytes in the process of pair aggregation in blood samples from patients with arterial hypertension and healthy donors: measurements with laser tweezers // *J Biomed Photonics Eng*, vol. 4, № 3, p. 030303, 2018.
4. A.V. Muravyov, The role of gaseous mediators (CO, NO and H₂S) in the regulation of blood circulation: analysis of the participation of blood cell microrheology // *Regional Blood Circulation and Microcirculation*, vol. 20, № 1, pp. 91-99, 2021 (in Russian).
5. A.Y. Maklygin et al. Measurement of interaction forces between red blood cells in aggregates by optical tweezers // *Quantum Electron*, vol. 42, № 6, pp. 500-504, 2012.

ИЗУЧЕНИЕ СИГНАЛОВ ГИГАНТСКОГО КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЙЯНИЯ СВЕТА ЛЕКАРСТВ, ЗАГРУЖЕННЫХ В НАНОКОНТЕЙНЕРЫ НА ОСНОВЕ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ И ЗОЛОТА

Д. А. Назаровская^{1*}, М. И. Васильева¹, Ж. В. Самсонова^{1,2}, Л. А. Осминкина¹

¹Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1

*E-mail: nazarovskaia.da22@physics.msu.ru

Исследования биосовместимых наночастиц в роли наноконтейнеров для доставки лекарственных препаратов направлены на улучшение показателя биодоступности, снижение побочных эффектов и тем самым на усиление общего терапевтического эффекта. Наиболее ёмкие наноконтейнеры могут быть получены на основе наноструктур с развитой поверхностью и порами. Эффективность загрузки лекарств в наноконтейнеры может быть изучена с помощью спектроскопических методов. Данная работа посвящена разработке метода синтеза и характеристики композитных наночастиц на основе пористого кремния и золота (Au-pSi НЧ) и исследованию усиления сигналов комбинационного рассеяния света загруженных в поры Au-pSi НЧ лекарств.

По прошествии последних десятилетий спектроскопия комбинационного рассеяния света (КР) прочно внедрилась в биомедицину как высокочувствительный метод для диагностики бактерий, вирусов, клеток и их метаболитов, малых молекул и лекарственных препаратов и др. Спектральная идентификация исследуемого образца основана на изменении частоты рассеяния света в зависимости от частот колебаний молекул в веществе.

Однако несмотря на безошибочность метода КР в анализе, интенсивности регистрируемого оптического сигнала зачастую недостаточно для однозначной его интерпретации. С помощью ГКР-спектроскопии (гигантского комбинационного рассеяния) возможно добиться его увеличения до 10^9 раз. Усиление сигнала КР происходит как следствие адсорбции молекул на нанощероховатую поверхность благородных металлов (золото, серебро, медь и т.д.), где возникает возбуждение локализованных плазмонов (явление локализованного поверхностного плазмонного резонанса (ЛППР)).

Наночастицы на основе пористого кремния (pSi НЧ) широко распространены в наномедицине в том числе за счет своей уникальной особенности растворяться до нетоксичной кремниевой кислоты в среде живого организма [0]. Поэтому pSi НЧ исследуются как эффективные наноконтейнеры для доставки лекарств. Биodeградация загруженных доксорубицином pSi НЧ и кинетики релиза лекарства внутри раковых клеток методом КР были впервые успешно продемонстрированы в [0,3]. Тем не менее, наблюдаемые сигналы лекарств характеризовались низкой интенсивностью, и для получения спектров использовали долгие времена накопления сигнала. Ожидается, что это можно преодолеть при использовании в качестве наноконтейнеров композитных наночастиц pSi и Au (Au-pSi НЧ), что позволит добиться усиления сигнала КР доставляемого наночастицами лекарства за счет явления ЛППР.

В ходе работы разработана методика изготовления нового композитного материала Au-pSi НЧ. Изучены физико-химические характеристики полученных Au-pSi НЧ с помощью методов динамического рассеяния света (ДРС), инфракрасной (ИК) спектроскопии, сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Отработана методика загрузки лекарств (сунитиниб, доксорубицин) в поры Au-pSi НЧ. Исследована ГКР-активность pSi НЧ (рис. 1).

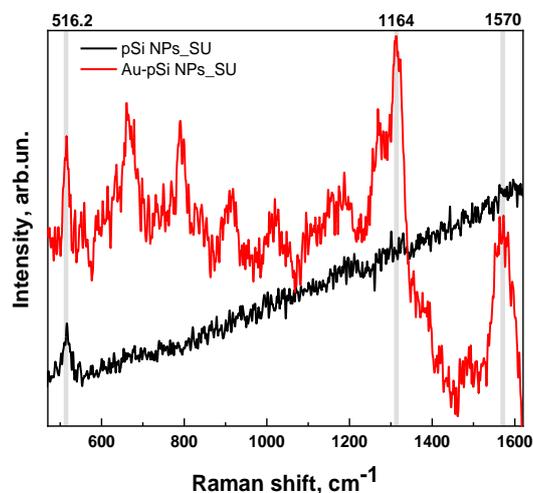


Рис. 1. Спектры КР (черный) и ГКР (красный) сунитиниба, загруженного в pSi НЧ и Au-pSi НЧ, соответственно.

Полученные результаты подчеркивают перспективу применений композитных наноструктур на основе наночастиц пористого кремния и золота для контроля эффективности доставки в наноконтейнерах методом ГКР.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-15-00137, <https://rscf.ru/project/24-15-00137/>.

Список литературы

1. J.-H. Park, et al. Biodegradable luminescent porous silicon nanoparticles for in vivo applications // *Nature Materials*, vol. 8, pp. 331–336, 2009.
2. P.V. Maximchik, et al. Biodegradable Porous Silicon Nanocontainers as an Effective Drug Carrier for Regulation of the Tumor Cell Death Pathways // *ACS Biomater. Sci. Eng.*, vol. 5 (11), pp. 6063-6071, 2019.
3. Tolstik, E., et al. Raman and fluorescence micro-spectroscopy applied for the monitoring of sunitinib-loaded porous silicon nanocontainers in cardiac cells. // *Front. pharmacol.*, vol. 13, pp. 962763, 2022.

ENERGY TRANSFER AND BIOLOGICAL ACTIVITY OF PROMISING AGENTS FOR COMBINED PDT BASED ON NANOCONJUGATES $YF_3-CeF_3:Tb^{3+}$ WITH RADACHLORIN/PHOTORAN BY MEANS OF PVP AND PEI

A. I. Khusainova, N. I. Shamsutdinov, P. V. Zelenikhin, D. I. Safin, S. L. Korableva,
S. V. Zinchenko, M. S. Pudovkin, A. S. Nizamutdinov*

Kazan Federal University
420008, Russia, Kazan, Kremlevskaja str., 18
*E-mail: anizamutdinov@mail.ru

In this work, we studied the spectral and kinetic characteristics of $YF_3-CeF_3:Tb^{3+}$ (15 %) nanoparticles (NP) conjugated with chlorin e6 based photosensitizers Radachlorin/Photoran by means of PVP and PEI. The average nanoparticle diameter was 14 ± 1 nm. Strong energy transfer from nanoparticles to Radachlorine is shown. Efficient nonradiative energy transfer from Tb^{3+} to the photosensitizers was demonstrated. The Foerster critical radius values appeared to be 4.5 nm for NP-Radachlorin system and 7 nm for NP-Photoran system. To assess the toxicity, we conducted an MTT tests for A549 cells in the presence of nanoconjugates. The ability to convert ionizing radiation energy into cytotoxicity was also tested. In particular, after X-ray irradiation the survival A 549 human lung carcinoma cells decreased by ~12%.

The combined photodynamic therapy is a prospective approach which involves energy conversion from ionizing radiation into action of PDT agents. It is possible when conjugating scintillator nanoparticles and PDT agents [1]. In this work we study spectral-kinetic characteristics of conjugates $YF_3-CeF_3:Tb^{3+}$ (15 %) nanoparticles (NP's) and Radachlorin/Photoran compounds bonded by means of polyvinylpyrrolidone (PVP) and polyethilenimine (PEI) and it's toxicity.

The synthesis of $YF_3-CeF_3:Tb^{3+}$ (15 %) NP's was carried out by the method of co-precipitation [2]. The toxicity of nanoparticles was assessed using an MTT test with A549 cells.

The survival rate of A549 cells in the presence $YF_3-CeF_3:Tb^{3+}$ (15 %) NP's conjugated with photosensitizers appeared to be lower higher than for NP's itself, which is apparently a consequence of the ability of the dye to generate reactive oxygen species.

The luminescence and its decay of $YF_3-CeF_3:Tb^{3+}$ (15 %) NP's conjugates with photosensitizers were studied under UV irradiation. Effective nonradiative energy transfer both from cerium to terbium ions and from terbium ions to the chlorin e6 based dyes is shown. The efficiency of non-radiative energy transfer from Tb^{3+} ions to photosensitizers was measured from spectroscopic data. The Foerster critical radius values appeared to be 4.5 nm for NP-Radachlorin system and 7 nm for NP-Photoran system Probably we see the conjugates formation since distance measured from luminescence decay data does not change after addition of water.

At the same time $YF_3-CeF_3:Tb^{3+}$ conjugates Radachlorin/Photoran compounds provided notable decrease of cells viability under ionizing radiation exposition. In particular, after X-ray irradiation the survival decreased by ~12%.

This research was funded by the subsidy allocated to Kazan Federal University for the state assignment in the sphere of scientific activities (project number FZSM-2023-0012).

Literature

1. X. Zhang, B. Lan, S. Wang, P. Gao, T. Liu, J. Rong, H. Lu, Low-dose x-ray excited photodynamic therapy based on $NaLuF_4:Tb^{3+}$ -rose bengal nanocomposite // *Bioconjugate chemistry*, vol. 30, pp. 2119–2200, 2019.
2. M.S. Pudovkin, A.K. Ginkel, E.V. Lukinova, Temperature sensitivity of Nd^{3+} , $Yb^{3+}:YF_3$ ratiometric luminescent thermometers at different Yb^{3+} concentration // *Optical Materials*, vol. 119, 111328, 2021.

СПЕКТРЫ КРС БЕЛКОВ, ПОЛУЧЕННЫХ ИЗ БИОЖИДКОСТЕЙ

С. С. Пудова^{1*}, Н. В. Суровцев²

¹*Новосибирский национальный исследовательский государственный университет
630090, Российская Федерация, Новосибирская область, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2*

*E-mail: s.pudova@g.nsu.ru

²*Институт автоматизирующей и электрометрии СО РАН
630090, Российская Федерация, Новосибирск, пр-кт Академика Коптюга, 1*

Работа посвящена разработке методики детектирования и идентификации малых концентраций белка в растворах биожидкостей с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС). Предложенная методика отработана на модельном объекте (раствор яичного белка в ростовой среде DMEM F-12) и применена для кондиционных сред после культивирования кератоцитов и фибробластов. Предложен подход, позволяющий оценить концентрацию белка в исходной среде.

Исследование биологических образцов бесконтактными методами является актуальной задачей биофизики. Одним из таких методов является спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС). Однако возникают сложности с идентификацией малых концентраций веществ, поскольку в ходе измерений детектируется достаточно малый сигнал ($\sim 10^{-6}$ от интенсивности упругой линии).

Целью работы являлось предложить способ обнаружения и идентификации малых концентраций белка в растворе методом КРС, который может быть применён для изучения изменения белкового состава биологических жидкостей, например, жидкости для роста клеточных культур. В качестве модельных объектов во время разработки методики использовались растворы яичного белка в жидкой ростовой среде, высушенные на подложках.

В данной работе были получены спектры с использованием лазеров с длинами волн 780 нм и 532 нм. Было показано, что использование красного лазера для растворов белков более эффективно, чем использование зелёного, поскольку в этом случае вклад фотолюминесценции в спектр меньше. Также были подобраны оптимальные условия высушивания капли, позволяющие увеличить поверхностную плотность вещества в высушенном образце.

Для уменьшения предельной детектируемой концентрации применялось осаждение белков из раствора с помощью спирта и трихлоруксусной кислоты. Разработана методика, позволяющая оценить концентрацию белка в исходной биожидкости.

В результате предложен подход, позволяющий получить спектры КРС белка из раствора с начальной концентрацией менее 1 мг/мл. Также были получены спектры сухих остатков от кондиционных жидкостей культуральных клеток. Показано, что спектры кондиционных жидкостей имеют явные отличия от спектров соответствующих ростовых сред до культивации, иными словами, наблюдается вклад метаболитов культивированных клеток.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ ПРИ ИЗМЕРЕНИИ АРТЕРИАЛЬНОГО ДАВЛЕНИЯ АВТОМАТИЧЕСКИМИ ТОНОМЕТРАМИ

Д. А. Рогаткин*, М. Е. Штыфлюк, А. П. Тарасов

ГБУЗ МО МОНИКИ им. М.Ф.Владимирского
129110, Российская Федерация, Москва, ул. Щепкина, д. 61/2
*E-mail: rogatkin@medphyslab.com

Известна проблема недостаточной точности измерения артериального давления автоматическими тонометрами. Чаще неправильные результаты выявляются у пациентов с поражениями сосудов при сахарном диабете, атеросклерозе, что говорит о влиянии состояния сосудов на точность измерений давления. Предположительно, неинвазивные оптические методы регистрации микрогемодинамики, применяемые в процессе измерения артериального давления, могут позволить обнаружить случаи ошибочных показаний тонометров. Выявлено несколько характерных сочетаний форм фотоплетизмограмм и сфигмограмм, которые говорят о разнице работы сосудов. Изучение корреляции таких сочетаний с точностью определения давления – следующий шаг в поиске маркеров неточных показаний тонометров.

Проблема недостаточной точности оценки артериального давления (АД) современными полуавтоматическими и автоматическими тонометрами, реализующими осциллометрический метод измерений, известна давно [1]. В ряде случаев такие тонометры дают значимо завышенные или заниженные показатели АД, до 40 мм рт ст, что критично для пациентов с риском опасных сердечно-сосудистых событий (гемодинамические кризы, инсульт и др.). Особенно часто неправильные показатели АД выявляются у пациентов с поражениями сосудов в результате осложнений сахарного диабета и(или) атеросклероза [2, 3]. Поэтому, «золотым стандартом» в оценке АД до сих пор в мировой практике остается экспертный аускультативный метод по тонам Короткова с двумя операторами [3]. Этим методом валидируют и автоматические тонометры.

Осциллометрический метод измерения АД основан на анализе амплитуды колебаний давления воздуха в манжете – сфигмограммы - во время сброса давления [1]. Пульсовые колебания крови в сосудах за счет акустического резонанса передаются от сосудов в манжету и регистрируются манометром (рис.1). Определяется момент времени максимальных пульсаций (*Max*) и, как доля от максимальных, отмечаются слева и справа амплитуды *k1* и *k2*. В эти моменты времени абсолютные показания давления воздуха в манжете, регистрируемые манометром, соответствуют среднему, систолическому и диастолическому давлениям крови в плечевой артерии.

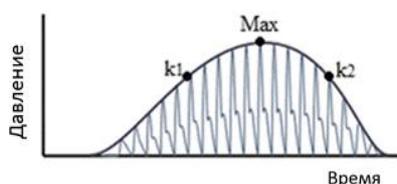


Рис. 1. Осциллометрический метод определения артериального давления. Пояснения в тексте.

При таком способе, очевидно, функциональное состояние сосудов, их реактивность, жесткость артериальной стенки и другие физиологические параметры могут и должны влиять на точность определения АД через искажение амплитуды и формы (профиля) сигнала сфигмограммы. С другой стороны, функциональное состояние сосудов сегодня можно неинвазивно в процессе измерения АД оценивать оптическими методами регистрации микрогемодинамики – фотоплетизмографией (ФПГ), лазерной доплеровской флоуметрией (ЛДФ) и другими аналогичными методами [4]. Ряд этих методов позволяет регистрировать базовый тонус сосудов, жесткость стенки аорты и периферических артерий через определение скорости распространения пульсовой волны, реактивность микрососудистого русла к окклюзии и т.д. [5]. Поэтому, не исключено, их использование одновременно с процедурой измерения АД может позволить выявлять ситуации неточного определения величины АД и скорректировать результат.

В представленном исследовании у добровольных испытуемых с разным уровнем АД и состоянием сосудов с использованием комплексной технологии «Вазотест» [5] регистрировались одновременно сфигмограмма в манжете тонометра и сигнал ФПГ на указательном пальце руки, на плече которой располагалась манжета тонометра. Исследование было одобрено Независимым этическим комитетом при ГБУЗ МО МОНИКИ им. М.Ф. Владимирского, протокол №5 от 21.03.2024. Было выявлено несколько характерных сочетаний форм сигналов ФПГ и сфигмограмм (рис.2), которые наглядно иллюстрируют функционирование сосудов. Левое сочетание показывает опережающее появление максимума амплитуды сигнала ФПГ по сравнению с максимумом на сфигмограмме, и достаточно быстрый спад амплитуд пульсовой волны на обоих графиках, что говорит о хорошем тоне сосудов. В центре можно видеть противоположную ситуацию, с замедленным возрастанием сигнала ФПГ, видимо, из-за повышенной жесткости стенок артерий. При этом максимум на сфигмограмме растянут, что затрудняет определение времени достижения *Max*. Справа же приведен пример приблизительно равного времени достижения максимумов на двух графиках.

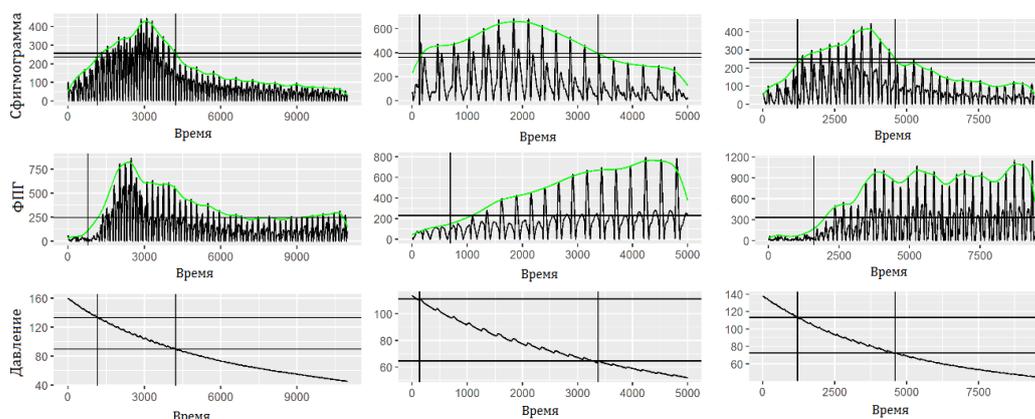


Рис. 2. Разные сочетания сигналов сфигмограмм и фотоплетизмограмм при сбросе давления в манжете.

Изучение корреляции таких сочетаний с точностью определения АД – следующий шаг в поиске маркеров неточных показаний тонометров. При создании окклюзии в области плеча кровотоки также перекрывается и в периферических сосудах руки, что фиксирует датчик ФПГ. Очевидно, сигнал сфигмограммы должен коррелировать с сигналом ФПГ, в противном случае наиболее вероятны ошибочные показания АД.

Исследование выполнено за счет гранта РФФИ №24-25-00222.

Список литературы

1. А.Н. Рогоза, К вопросу о точности измерения АД автоматическими приборами // Функциональная диагностика, № 1, сс.2-10, 2003.
2. А.Н. Рогоза, Ш.Б. Гориева, Е.В. Мордвинова, Возможности тонометров высокого класса точности в обеспечении дистанционного самоконтроля артериального давления // РМЖ, т.22, №23, сс.1707-1713, 2014.
3. 2013 ESH/ESC Guidelines for the management of arterial hypertension: the Task Force for the management of arterial hypertension of the European Society of Hypertension (ESH) and of the European Society of Cardiology (ESC) // European Heart J., 34(28), pp. 1281–1357, 2013.
4. Д.А. Рогаткин. Физические основы современных оптических методов исследования микрогемодинамики *in vivo*. Лекция. // Медицинская физика, №4, сс.75-93, 2017.
5. А.А. Глазков, Д.Г. Лапитан, В.В. Макаров, Д.А. Рогаткин. Оптический неинвазивный автоматизированный прибор для исследования центральной и периферической гемодинамики // Физические основы приборостроения, Т.10, №4(42), сс. 28-36, 2021.

ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА СПЕКТРАЛЬНО-КИНЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОРОШКОВ ГИДРОКСИАПАТИТА КАЛЬЦИЯ И ТРИКАЛЬЦИЙФОСФАТА, ДОПИРОВАННЫХ Eu^{3+}

И. Д. Сидоров^{1*}, А. С. Низамутдинов¹, М. С. Пудовкин¹, М. Р. Гафуров¹, Ю. О. Никитина²,
А. Ю. Демина², Н. В. Петракова², В. С. Комлев²

¹Казанский Федеральный Университет, Институт Физики,
420111, Российская Федерация, Казань, ул. Кремлевская, д. 16а
*E-mail: Sidorov.I.D@mail.ru

²Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук
119334, Российская Федерация, Москва, Ленинский проспект, д. 49

Разработка новых люминесцентных зондов и материалов протезирования травм опорно-двигательного аппарата является актуальной задачей. Применение фосфатов кальция, например, гидроксиапатита кальция (ГА) $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ и трикальцийфосфата (ТКФ) $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$, в качестве основы является перспективным направлением, потому что данные соединения соответствуют минеральному составу в кости [1]. Исследованы спектрально-кинетические характеристики концентрационной серии образцов ГА и ТКФ, легированных ионами Eu^{3+} , в том числе измерен квантовый выход люминесценции. Термическая обработка образцов ГА с Eu^{3+} и ТКФ с Eu^{3+} привела к увеличению квантового выхода люминесценции в первую очередь за счет кристаллизации порошков под действием температуры. Возбуждение люминесценции длиной волны 266 нм через матрицу оказывается более чувствительным к обнаружению неэквивалентных позиций ионов Eu^{3+} по сравнению с возбуждением ионов Eu^{3+} напрямую длиной волны 394 нм. Наиболее чувствительными к температурной обработке оказались переходы $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_0$ (эмиссия на 574 нм), $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2$ (эмиссия на 622 нм) для ГА с Eu^{3+} и $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_1$ (эмиссия на 590 нм), $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2$ (эмиссия на 610 нм) для ТКФ с Eu^{3+} . На этих длинах волн наблюдается изменение количества экспонент в сигнале и значительное изменение времен жизни люминесценции.

Фосфаты кальция (ФК) являются основным минеральным компонентом костной и зубной ткани. В связи с этим ФК обладают высокой биосовместимостью и поэтому являются наиболее важным объектом интереса в области костной инженерии. Например, гидроксиапатит кальция (ГА) $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ используется в качестве биологически активного покрытия для металлических имплантатов и в протезировании. ФК также могут использоваться как средство доставки лекарств или для одновременного высвобождения в организм нескольких лекарств. Структура ФК удивительно толерантна к множественным ионным замещениям во всех кристаллографических позициях, что открывает большое количество возможных путей получения новых материалов на основе ФК [2]. Преимуществом создания люминесцентных зондов на основе легирования неорганических матриц редкоземельными элементами являются высокие люминесцентные характеристики в сочетании с фотостабильностью и химической стойкостью [3].

Целью работы является исследование спектрально-кинетических характеристик ионов Eu^{3+} в матрицах ГА и ТКФ и влияния отжига при 1300°C на воздухе на них при длинах волн возбуждения 266 нм и 394 нм. Размер частиц после синтеза составил 10-20 нм для ГА и 100-150 нм для ТКФ, степень окисления Eu предположительно 3. Размер частиц порошков после термообработки составляет 0.5-1.0 мкм.

Наибольшая интенсивность люминесценции ТКФ с Eu^{3+} наблюдается при переходе $^5\text{D}_0 \rightarrow ^7\text{F}_2$ (600-640 нм) [4-5]. После термической обработки ТКФ с Eu^{3+} квантовый выход люминесценции увеличивается на порядок и появляются спектрально разрешенные линии штарковских компонент. Для оценки кинетических характеристик иона Eu^{3+} в матрице ТКФ измеряли затухание люминесценции на длинах волн 590, 610 и 622 нм при возбуждении на длинах волн 266 и 394 нм. На всех длинах волн излучения с возбуждением 394 нм отжиг приводит к увеличению времени затухания люминесценции без изменения количества экспонент затухания. Затухание люминесценции на длине волны 622 нм при возбуждении на длине волны 266 нм до и после отжига носит двухэкспоненциальный характер. Кинетика люминесценции порошков ТКФ до обработки на длинах волн 590 и 610 нм также носит двухэкспоненциальный характер. После тер-

мообработки кинетика люминесценции образца на длинах волн 590 и 610 нм становится одноэкспоненциальной. Наблюдаемые изменения могут быть объяснены фазовым переходом во время термообработки, что согласуется с результатами рентгенофазового анализа.

В спектре люминесценции ГА с Eu^{3+} наибольшая интенсивность люминесценции наблюдается для переходов ${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_0$ (574 нм) и ${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_2$ (600-640 нм) [4-5]. Отличительной особенностью ГА является наличие двух позиций ионов Ca^{2+} , которые могут быть замещены ионами Eu^{3+} . Благодаря замене иона Ca^{2+} в позиции II на ион Eu^{3+} разрешается переход ${}^5\text{D}_0 \rightarrow {}^7\text{F}_0$ [6]. Люминесценция образца до обработки сравнительно невелика. Термическая обработка приводит к значительным изменениям ширины и положения спектральных линий; интенсивность люминесценции увеличивается. Появляются характерные для ГА как матрицы пики интенсивности иона Eu^{3+} с хорошо разрешенными штарковскими компонентами. Это может указывать на изменение фазы образца, что согласуется с результатами рентгеновской дифрактометрии. Квантовый выход люминесценции при термическом отжиге имеет концентрационную зависимость: при концентрации менее 0.5 мол.% квантовый выход люминесценции увеличивается на порядок, для значения концентрации 0.5 мол.% квантовый выход люминесценции увеличивается в ≈ 1.7 раза. Такая зависимость может указывать на концентрационное тушение люминесценции. Мы изучали кинетику образцов ГА до и после термической обработки при длинах волн 574 нм, 590 нм, 622 нм при возбуждении 266 нм и 394 нм. При накачке на длине волны 394 нм в результате термообработки количество экспоненциальных составляющих в сигнале остается неизменным. В случае накачки на длине волны 266 нм при длине волны излучения 622 нм в процессе отжига число компонент сигнала уменьшается с двух до одной. Мы наблюдаем уменьшение постоянной времени затухания на длине волны излучения 622 нм и увеличение постоянной времени на длинах волн излучения 574 и 590 нм, что может указывать на наличие переноса энергии между ионами Eu^{3+} , расположенных в разных позициях.

По данным оптической спектроскопии, термический отжиг приводит к упорядочению кристаллической структуры исследованных фосфатов кальция. Это приводит к изменению центрального состава ионов Eu^{3+} и увеличению интенсивности люминесценции и квантового выхода.

Исследование поддержано РФФ №23-63-10056.

Список литературы

1. Ю.О. Никитина, Формирование микроструктуры и свойства керамики на основе церий-замещенных фосфатов кальция: дисс. канд. техн. наук: 2.6.14 / Никитина Юлия Олеговна. – М, 153 с, 2022.
2. A. Nikolaev, et al. Europium concentration effect on characteristics and luminescent properties of hydroxyapatite nanocrystalline powders // *J. Mol. Struct.*, vol. 1149, pp. 323-331, 2017.
3. S. Mondal, et al. Rare earth element doped hydroxyapatite luminescent bioceramics contrast agent for enhanced biomedical imaging and therapeutic applications // *Ceram. Int.*, vol. 46(18), pp. 29249-29260, 2020.
4. E.J. Kim, S.W. Choi, S.H. Hong, Synthesis and Photoluminescence Properties of Eu^{3+} -Doped Calcium Phosphates // *J. Am. Ceram. Soc.*, vol. 90(9), pp. 2795-2798, 2007.
5. Y. Han, et al. Synthesis and luminescence of Eu^{3+} doped hydroxyapatite nanocrystallines: Effects of calcinations and Eu^{3+} content // *J. Lumin.*, vol. 135, pp. 281-287, 2013.
6. O.A. Graeve et.al. Luminescence variations in hydroxyapatites doped with Eu^{2+} and Eu^{3+} ions // *Biomaterials*, vol. 31(15), pp. 4259-4267, 2010.

ИЗУЧЕНИЕ КОНФОРМАЦИИ ГЕМОГЛОБИНА ПРИ ИДИОПАТИЧЕСКОЙ ЛЕГОЧНОЙ ГИПЕРТЕНЗИИ

О. В. Слатинская^{1*}, Э. С. Аллахвердиев², Т. В. Мартынюк², Г. В. Максимов¹

¹Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12

*E-mail: slatolya@mail.ru

²Национальный медицинский исследовательский центр кардиологии имени академика Е.И. Чазова Минздрава России
121552 г. Москва, ул. 3-я Черепковская д.15а

Идиопатическая легочная гипертензия (ИЛГ) — редкая форма легочной гипертензии с неустановленной этиологией. Важную роль в патогенезе ИЛГ играет гипоксия, формирующаяся в результате различных морфологических и транспортных изменений в сосудистой системе [1]. Изменение конформации молекул гемоглобина (Гб) и их олигомеризации может оказывать существенное влияние на сродство Гб к кислороду.

В сложном патогенезе ИЛГ, включающем изменения биохимических и биофизических процессов в различных типах клеток как причины нарушения структуры и функции легочных сосудов, важную роль играет гипоксия. На фоне гипоксии и изменениях в сосудистой кровеносной системы пациентов, возможны конформационные изменения гема сопровождающиеся нарушением кислород-транспортной функции эритроцитов.

Методом спектроскопии комбинационного рассеяния, были выявлены существенные различия между группой контроля и пациентов с ИЛГ. Для цитоплазматического Гб (Гб_{цп}) эритроцитов ИЛГ характерна большая вероятность реализации «куполообразной» конформации гема, обусловленной изменениями порфиринового макроцикла гема, валентных колебаний винильных групп (I_{1580}/I_{1550}) и увеличением плотности упаковки глобина Гб_{цп} и мембраносвязанного Гб (Гб_{мс}). Для Гб_{мс} ИЛГ характерно увеличение вклада колебаний симметричных колебаний пиррольных колец гема (I_{1375}/I_{1172}), чего не наблюдалось для Гб_{цп}. При этом, для ИЛГ, увеличение плотности упаковки глобина коррелирует с увеличением вероятности нахождения гема в «куполообразной» конформации (по отношению валентных колебаний связей винильных групп к симметричным колебаниям пиррольных колец). При этом, для группы контроля установлена обратная корреляция. При снижении насыщения крови кислородом, основные изменения конформационного гема происходят за счет валентных колебаний винильных групп и в меньшей степени (относительно контроля) в колебаниях пиррольных колец [2].

Таким образом, увеличение плотности упаковки глобина Гб_{цп} у ИЛГ свидетельствует о перераспределении Гб_{цп} к внутренней поверхности мембраны при его участии в компенсации заряда цитоплазматической мембраны при изменении поверхностного заряда мембраны эритроцита. Снижение плотности упаковки Гб_{мс}, может нарушать процесс функционирования эритроцита, ввиду снижения эффективности десорбции O₂ через белок полосы 3 [3].

Список литературы

1. И.Е. Чазова, и др. Диагностика и лечение легочной гипертензии // Кардиоваскулярная терапия и профилактика, Т.6, с.15, 2007.
2. B.R. Wood, et al. Resonance Raman spectroscopy of red blood cells using near infrared excitation // Analytical and bioanalytical chemistry. vol. 387(5), pp. 1691-1703, 2007.
3. Z. Huang, et al. Nitric oxide binding to oxygenated hemoglobin under physiological conditions // Biochimica et Biophysica Acta-General Subject. vol. 1568(3), pp. 252-260, 2001.

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ЖЕСТКОСТИ СВЯЗИ ФЛУОРЕСЦЕНТНОЙ МЕТКИ НА ОСНОВЕ ФЛУОРЕСЦЕИНА С БЕЛКАМИ РАЗНОЙ СТРУКТУРЫ

Д. П. Суржикова^{1*}, Л. А. Суковатый¹, Е. В. Немцева¹, Е.А. Слюсарева¹

¹Сибирский федеральный университет
660041, Российская Федерация, Красноярск, пр-т. Свободный, д. 79
*E-mail: DSurzjikova@sfu-kras.ru

Исследование посвящено развитию методов флуоресцентного зондирования биологических систем. Рассмотрено влияние зарядовых свойств поверхности белка на спектральные свойства ковалентно связанного флуоресцентного зонда – флуоресцеин-5-изотиоцианата. Методами флуоресцентной спектроскопии и молекулярной динамики, показано увеличение степени жесткости связи вследствие электростатического взаимодействия положительного заряженного белка и отрицательно заряженного зонда.

Различные виды биологических реакций с участием белков инициируются взаимодействием между поверхностью белка и целевыми молекулами. Силы притяжения между этими молекулами, обусловленные электростатическими и/или гидрофобными взаимодействиями, способствуют эффективному образованию комплекса белок-мишень [1]. Мониторинг состояния белка можно производить путем оценки изменения флуоресценции его собственных люминофоров, например, триптофановых аминокислотных остатков. Дополнительная информация может быть получена с помощью внешней флуоресцентной метки, присоединённой ковалентно и обладающей более выгодными характеристиками (высоким квантовым выходом, батохромно сдвинутым спектром испускания и др.).

Данная работа посвящена исследованию роли зарядовых свойств поверхности белка в жесткости связи между ковалентно связанной флуоресцентной меткой и белком. Была проведена процедура ковалентного связывания [2] флуоресцентного индикатора с белками: лизоцим куриного белка (Lys), карбоксиангидраза Б быка (BCA), бычий сывороточный альбумин (BSA) и бактериальная люцифераза (Luc). Белки имеют различные заряды поверхности, функциональные и физико-химические свойства (молекулярная масса, изоэлектрическая точка, и т.д.). Суммарный заряд поверхности Lys является положительным, когда для других белков отрицательным.

В качестве флуоресцентного индикатора, в работе был использован флуоресцеин-5-изотиоцианат (FITC). В физиологическом диапазоне (pH 5÷7) краситель существует в виде равновесной смеси дианионной (D) и моноанионной (M) флуоресцирующих форм с константой ионного равновесия 6,35 [3].

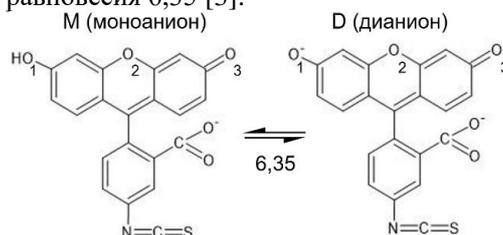


Рис. 1. Структурные формулы M и D форм FITC и ионное равновесие между ними

Были использованы методы время-разрешенной и поляризационной флуоресцентной спектроскопии и проведено моделирование методами молекулярной динамики. Исследования проведены при pH 6,50, вблизи точки ионного равновесия FITC. Расчет молекулярной динамики M и D форм FITC-меченных белков был проведен с помощью программного пакета GROMACS 2020.4.

Были оценены средние флуоресцентные времена жизни для образцов Белок-FITC и свободного красителя в растворе. Для образца с положительно заряженным Lys-FITC величина τ_{fl} равна 3,9 нс, что выше, чем для образца свободного FITC в растворе при pH 6,50 (3,5 нс). Для остальных отрицательно заряженных белков среднее флуорес-

центное время жизни принимает значения $3 \div 3,2$ нс.

Измерение анизотропии флуоресценции позволяет оценить эффективность вращения флуоресцентной метки за время жизни возбужденного состояния. Для образца Lys-FITC значение анизотропии составило $0,174 \pm 0,022$, для BCA, BSA, Luc-FITC значения составили $0,073 \pm 0,036$, $0,099 \pm 0,029$, $0,077 \pm 0,027$. Для белка Lys, анизотропия флуоресценции принимает значение выше, чем для белков BCA, BSA, Luc которые равны в пределах ошибки. Имея данные анизотропии и средних времен жизни образцов, появляется возможность оценить эффективный размер излучателя по формуле Перрена:

$$\frac{r_0}{r} = 1 + \tau_{\text{фл}} \frac{6kT}{\eta \pi D^3}, \quad (1)$$

где r_0 – значение предельной анизотропии (0,4), k – постоянная Больцмана, T – температура, η – вязкость среды. Размер излучателя, в случае связанного FITC оказался больше, чем размер FITC, но меньше, чем гидродинамический размер белка, с которым он связан. Это объясняется разной степенью жесткости связи Белок-FITC, которая для Lys-FITC оказалась выше (рис 2).

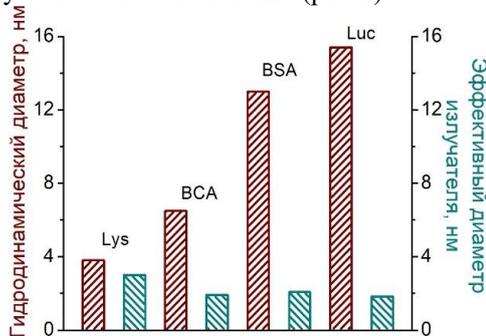


Рис. 2. Сравнение гидродинамического диаметра (лит. ист.) и эффективного диаметра излучателя для белков Lys, BCA, BSA, Luc

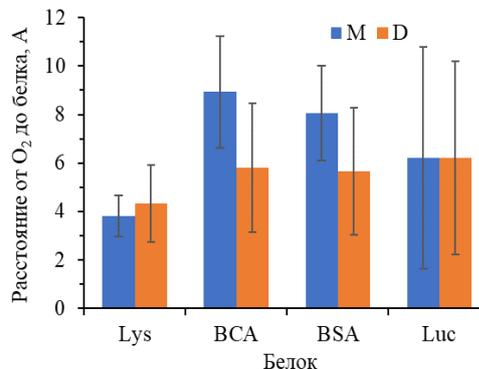


Рис. 3. Минимальное расстояние от гетероатома O2 ксантенового кольца FITC до любого атома белка, для моноаниона (синий) и дианиона (оранжевый).

Было рассчитано минимальное расстояние от гетероатома ксантенового кольца FITC (O2) (рис 1) до любого атома белка и получено, что ближе всего к белку находится FITC, связанный с лизоцимом, как М, так и D (среднее расстояние около 4Å). Для остальных белков среднее расстояние составляет 5,7-8,2Å, при этом стандартное отклонение параметра в ходе молекулярной динамики имеет величину 2,3-4,6Å, указывая на высокую подвижность FITC (рис. 3).

Сочетанием экспериментальных и модельных методов исследования удалось подтвердить зависимость жесткости связи флуоресцентной метки с белками от электростатических свойств поверхности белка. Результаты могут быть использованы для развития методов флуоресцентного зондирования.

Список литературы

1. F. Fernandes, A. Coutinho, M. Prieto, et al. Electrostatically driven lipid-protein interaction: Answers from FRET // *Biochim.Biophys.Acta - Biomembr.*, vol. 1848(9), pp. 1837-1848, 2015.
2. G. Hungerford, J. Benesch, J.F. Mano, et al. Effect of the labelling ratio on the photophysics of fluorescein isothiocyanate (FITC) conjugated to bovine serum albumin // *Photochem Photobiol Sci.*, vol. 6(2), pp.152-8, 2007.
3. D.S. Surzhikova, M.A. Gerasimova, E.A. Slyusareva, Effect of Phosphate Ions on the Dianion-Anion Equilibrium of Fluorescein Excited State // *Bull. Russ. Acad. Sci.: Phys.*, vol. 86(10), pp. 1203-1206, 2022.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ИОННЫХ ФОРМ СУБСТРАТА ФОТОПРОТЕИНОВ

Ф.Н. Томилин^{1,2*}, А.В. Рогова¹, Е.С. Высоцкий³

¹Сибирский федеральный университет
660041, Российская Федерация, Красноярск, пр. Свободный, 79
*E-mail: felixnt@gmail.com

²Институт физики им. Киренского, Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр СО РАН», 660036, Россия, Красноярск, Академгородок 50/38

³Институт биофизики Федерального исследовательского центра «Красноярский научный центр СО РАН»
660036, Россия, Красноярск, Академгородок 50/50

Особым классом биолюминесцентных белков являются Ca^{2+} -регулируемые фотопротеины. Имидазопазирины являются наиболее широко используемыми из известных субстратов в морской биолюминесценции и наиболее хорошо изученными наряду с люциферинем светлячка. Несмотря на это, имеются вопросы, связанные с влиянием pH на протонирование субстрата. Таким образом, необходимо учитывать такой фактор, как pH, т.к. он играет решающую роль в мембранном транспорте и других внутриклеточных процессах. Проведено теоретическое и экспериментальное исследование оптических свойств ионных форм фотопротеинового субстрата. Выявлено какие ионные формы присутствуют в растворе в диапазоне pH от 5 до 9.

Кальций-регулируемые фотопротеины представляют собой одноцепочечные глобулярные белки с нековалентно связанным субстратом во внутренней полости белка. Из всех известных фотопротеинов в качестве репортеров в аналитике используются наиболее изученные – акворин из *Aequorea victoria* и обелин из *Obelia longissima*. Наиболее распространенным люминесцентным субстратом среди светящихся морских организмов является целентеразин (CTZ). Излучающей структурой фотопротеинов является целентерамид (CLM). Его переход в основное состояние сопровождается излучением света с λ_{max} в области 465–495 нм [1]. На данный момент получено множество мутантных белков с измененными характеристиками такими, как высокая термостабильность и биолюминесцентная активность, различный цвет свечения, с быстрой или медленной скоростью биолюминесценции и модифицированное сродство к кальцию.

Превращение апофотопротеина в активный фотопротеин как в экспериментах *in vitro*, так и в живых клетках *in vivo* происходит в водных растворах с различным pH, значение которого может влиять на ионизацию субстрата, следовательно, на скорость и эффективность образования активного фотопротеина. Однако, не до конца ясно в какой ионной форме находится лиганд в зависимости от pH. Это стимулирует к дальнейшим фундаментальным исследованиям фотофизических свойств субстрата в водных растворах как экспериментальными, так и теоретическими методами.

Для изучения оптических свойств фотопротеинового субстрата с помощью теории функционала плотности (CAM-B3LYP/*aug-cc-PVDZ*), выполнена оптимизация различных ионных форм CTZ в газовой фазе и в воде, рассчитаны спектры поглощения с помощью TD-DFT метода в рамках сольватационной модели (SMD) в программном пакете GAMESS [2]. Из рассчитанных данных спектров поглощения показано влияние растворителя. Проведено соотнесение ионной формы субстрата и pH раствора.

Список литературы

1. E.S. Vysotski et.al. Calcium-regulated photoproteins of marine coelenterates // Molecular Biology, vol 40, pp. 355-367, 2006.
2. M.W. Schmidt et.al. General atomic and molecular electronic structure system // Journal of computational chemistry. Wiley Online Library, vol. 14(11), pp. 1347-1363, 1993.

ДИАГНОСТИКА БАКТЕРИЙ С ПОМОЩЬЮ ИНТЕРФЕРЕНЦИИ ФАБРИ-ПЕРО В КРЕМНИЕВЫХ НАНОСТРУКТУРАХ РАЗЛИЧНОЙ МОРФОЛОГИЙ

М. Ван^{1*}, П. А. Рачишена¹, Д. А. Назаровская¹, П. А. Домнин², И. И. Циняйкин¹, С.А. Ермаева², Л. А. Осминкина¹, К. А. Гончар¹

¹Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1

²Национальный исследовательский центр эпидемиологии и микробиологии им. Н. Ф. Гамалеи
123098, Российская Федерация, Москва, ул.Гамалеи, д. 18

*E-mail: van.m17@physics.msu.ru

В представленной работе пористые наноструктуры кремния различной морфологии исследовали в качестве интерференционных ИК -сенсоров для диагностики бактерий. На примере использования бактерий *E. Coli* показано, что морфология пористых структур существенно влияет на эффективность адсорбции бактерий и сенсорный отклик измеряемого оптического сигнала.

Оптические биосенсоры имеют значительные преимущества перед другими аналитическими методами благодаря хорошей чувствительности, удобству и простоте использования, воспроизводимости и надежности. Наиболее распространенные оптические датчики основаны на эффектах интерференции света в тонких слоях кремниевых наноструктур, таких как пористый кремний (ПК) [1] или кремниевые нанонити (КНН) [2]. Принцип работы такого датчика заключается в том, что освещение тонкого слоя кремниевых наноструктур белым светом приводит к отражению света от верхней и нижней границы наноструктур, создавая интерференцию Фабри-Перо, где частота интерференции определяется эффективной оптической толщиной слоя кремниевых наноструктур [1]. Изменение эффективного показателя преломления кремниевых наноструктур после адсорбции биологических молекул и клеток проявляется в смещении интерференционных полос и/или изменении их амплитуды [1–3].

В работе были исследованы три различные наноструктуры:

1) ПК, полученный электрохимическим (ЭХ) травлением пластин кристаллического кремния (с-Si) в растворе HF (48%) : C₂H₅OH, взятых в объемном соотношении 3:1, при плотности тока травления 385 мА/см² в течении 30 секунд.

2) ПК, полученный жертвенным ЭХ травлением пластин с-Si. Для этого сначала происходило ЭХ травление пластин с-Si ЭХ травление в растворе HF (48%) : C₂H₅OH, взятых в объемном соотношении 3:1, при плотности тока травления 300 мА/см² в течении 30 секунд. Далее образец погружался в раствор NaOH (0,01 М), в котором полученная пористая структура растворялась, оставляя затравки пор на поверхности с-Si. После чего снова происходило ЭХ травление при тех же условиях. Данный метод за счёт первого жертвенного слоя позволяет получать раскрытые поры на поверхности получаемой пленки ПК.

3) Пористые КНН, полученные методом металл-стимулированного химического травления пластин с-Si р-типа проводимости с кристаллографической ориентацией (100) и удельным сопротивлением 1–5 мОм·см. Пластины с-Si выдерживали в 5 М HF для удаления SiO₂ с ее поверхности. В начале синтеза наночастицы серебра наносились на поверхность с-Si путем погружения пластины в раствор AgNO₃ (0,02 М) : HF (5 М), взятых в объемном соотношении 1:1. , в течение 15 секунд. На втором этапе МСХТ пластина с-Si, покрытая наночастицами серебра, погружалась в раствор H₂O₂ (30%) : HF (5 М), взятый в объемном соотношении 1:10, на 20 минут. Травление происходило на участках, покрытых наночастицами серебра, которые, проваливаясь вглубь с-Si, образовывали нитевидные структуры КНН. Затем для удаления серебряных наночастиц образец помещали в HNO₃ на 5 мин.

СЭМ микрофотографии кремниевых наноструктур различной морфологии после адсорбции *E. Coli*. представлены на рисунке 1.

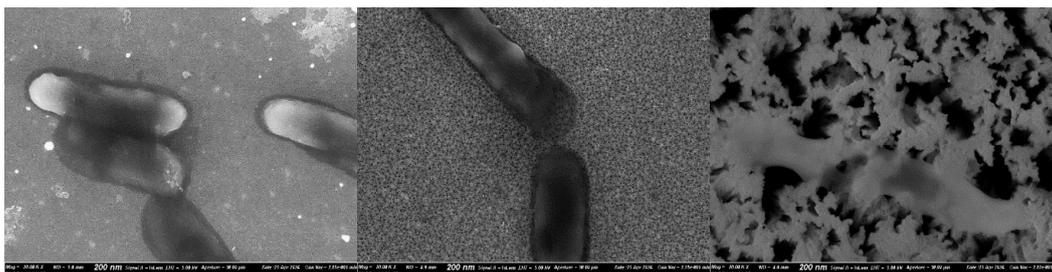


Рис. 1. СЭМ микрофотографии кремниевых наноструктур различной морфологии после адсорбции *E. Coli*.

С помощью ИК Фурье-спектрометра фирмы Bruker IFS 66v/S в среднем ИК диапазоне измерялись спектры отражения ПК без и с *E. Coli* в концентрации 10^6 КОЕ/мл. Полученные спектры обрабатывались с помощью быстрого Фурье преобразования и определялась эффективная оптическая толщина кремниевых наноструктур ($EOT=2Ln_{eff}$). Для ПК обнаружено уменьшение EOT после адсорбции бактерий, что можно объяснить маленьким размером пор пленок ПК, из-за чего бактерии осаждаются только на поверхности сенсорного элемента. В результате, с одной стороны, увеличивается толщина измеряемого слоя (L), в котором наблюдаются интерференционные полосы, но с другой стороны, n_{eff} этого слоя уменьшается, так как верхняя часть слоя теперь содержит только воздух и бактерии, что в совокупности приводит к снижению EOT. Для КНН же обнаружено увеличение EOT после адсорбции бактерий, что можно объяснить увеличением n_{eff} , поскольку бактерии могут частично адсорбироваться в порах образца.

В результате в ходе проделанной работы показана возможность диагностики бактерий с помощью интерференции Фабри-Перо в кремниевых наноструктурах и различия в изменении EOT при детектировании бактерий связанные с различной морфологией структур.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-72-10062, <https://rscf.ru/project/22-72-10062/>.

Список литературы

1. A. Jane, R. Dronov, A. Hodges, et.al. Porous silicon biosensors on the advance // Trends in biotech., vol. 27(4), pp. 230-239, 2009.
2. K.A. Gonchar, S.N. Agafilushkina, D.V. Moiseev, et.al. H1N1 influenza virus interaction with a porous layer of silicon nanowires // Mater. Res. Express, vol. 7, p. 035002, 2020.
3. M.B. Gongalsky, A.A. Koval, S.N. Schevchenko, et.al. Double Etched Porous Silicon Films for Improved Optical Sensing of Bacteria // J. Electr. Soc., 164(12), p. B581, 2017.

СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЙ АНАЛИЗ ПОРФИРИНОВ В САЛЬНЫХ ФИЛАМЕНТАХ

Е. А. Владимирова^{1,2*}, Е. Ф. Мартынович^{1,2}

¹Иркутский филиал Института лазерной физики СО РАН,
664033, Российская Федерация, Иркутск, ул. Лермонтова, 130а
*E-mail: lizaklause51@gmail.com

²Иркутский государственный университет,
664003, Российская Федерация, Иркутск, бульвар Гагарина, 20

В настоящей работе представлены результаты спектрально-временных микроскопических исследований люминесценции сальных филламентов, извлечённых специальным методом из расширенных пор Т-зоны кожи лица пациентов.

Известно, что развитию воспалительного заболевания сально-волосяных фолликулов *Acne Vulgaris* способствует присутствие продуцирующих порфирин бактерий *Cutibacterium acnes* внутри сальных фолликулов кожи [1]. Бактерии производят порфирины в результате своего метаболизма, а также в процессе биосинтеза гема.

Порфирины – это пигментированные соединения. Родоначальником ряда порфиринов является порфин, молекула которого содержит четыре пиррольных кольца, объединённых метинными мостиками в общую систему сопряжения [2]. Они являются природными люминофорами и эффективно люминесцируют в красной области спектра под воздействием ультрафиолетового излучения. Интенсивность их люминесценции пропорциональна плотности *Cutibacterium acnes* [3]. В свою очередь, в спектре поглощения имеется сильная полоса в области приблизительно 400 нм, которая называется полосой Sore, но также есть несколько более слабых пиков поглощения (Q-полос) на более длинных волнах (от 450 нм до 700 нм) [4].

В настоящей работе методами лазерно-люминесцентной микроспектроскопии проводились исследования содержимого, выделенного из расширенных пор пациентов с целью усовершенствования дифференциальной диагностики акне и сопутствующих заболеваний кожи, основанной на люминесценции порфиринов, вырабатываемых бактериями кожной микрофлоры.

Исследование проводилось в несколько этапов. Вначале для оценки состояния кожи лица пациента были сделаны фотографии распределения люминесценции, возбуждаемой ультрафиолетовым излучением диодного лазера с длиной волны 405 нм. Для повышения качества изображений, использовался специальный светофильтр, который устранял прохождение возбуждающего излучения в камеру. Снимки показали достаточно большое количество красных и зеленоватых люминесцентных пятен в Т-зоне лица, что говорит о степени поражения кожи. Затем с помощью специальной методики содержимое расширенных пор извлекалось для приготовления экспериментальных образцов. Детальное исследование спектральных, структурных и временных люминесцентных характеристик полученных образцов проводилось с помощью конфокального сканирующего флуоресцентного микроскопа PicoQuant MicroTime 200, работающего в режиме время-коррелированного счета фотонов. Оптический микроскоп Olympus IX 71, входящий в комплект MicroTime 200 показал, что у извлеченной из расширенных пор сальной пробки корневая часть представляет собой оборванные нити (10-30 филламентов). При механической деформации такой сальной пробки она вся распадается на отдельные нити длиной 1-2 мм и толщиной 5-20 мкм. В люминесцентном излучении цвет образцов варьировался от красного в корневой зоне до зеленого в наружной зоне филламентов. В этих зонах с помощью спектрометра Ocean Optics QE65000 были измерены спектры люминесценции, возбуждаемой лазерным излучением с длинами волн 375, 405, 470, 532, 640 нм.

Спектры люминесценции образца, измеренные в его корневой области, где визуально наблюдается красная люминесценция, показали довольно сложный состав, однако при этом четко были видны выраженные максимумы при 510, 596, 640 нм и прилегающее к ним длинноволновое плечо в районе 710 нм. При этом в процессе измерения спектров была обнаружена оптическая неустойчивость центров люминесценции к возбуждающему излучению. Каждый новый спектр, последовательно измеряемый через одинаковый интервал времени, имел более низкую интенсивность по сравнению с предыдущим, что говорит о фотохимическом преобразовании центров свечения. Также было отмечено, что при разрушении центров свечения, излучающих в полосах с максимумами 596 и 640 нм, происходит прирост концентрации центров, ответственных за зеленую люминесценцию 510 нм. Вместе с тем параллельно происходило фотохимическое разрушение центров, ответственных и за зеленую люминесценцию. Очевидно, прирост концентрации этих центров за счет разрушения красных центров превышает прямое фотохимическое разрушение зеленых центров. Регистрируемая люминесценция была малоинерционной, содержала несколько временных компонентов с постоянными времени затухания от 0,57 до 10,6 нс.

По данным работы К. Кoenig и Н. Meyer при возбуждении кожной автофлуоресценции лазером с длиной волны 407 нм, полученный спектр состоял из трех основных пиков около 600, 620 и 640 нм, соответствующих металлопорфиринам, таким как Zn-протопорфирин, копропорфирин, свободный протопорфирин IX, и, возможно, представляющих собой смесь этих соединений [5].

Таким образом, в данной работе впервые проведены спектрально-кинетические микроскопические исследования люминесценции индивидуальных салных филаментов, обнаружено изменение люминесцентных характеристик вдоль направления филаментов, зарегистрировано фотохимическое преобразование центров, ответственных за люминесценцию.

Список литературы

1. I. Seo, S.H. Tseng, G.O. Cula, et.al. Fluorescence spectroscopy for endogenous porphyrins in human facial skin // *Photonic Therapeutics and Diagnostics V*, 2009.
2. Г.П. Гуринович, А.Н. Севченко, К.Н. Соловьев. Спектроскопия порфиринов // *Успехи физических наук*, Т. 79 (2), С. 173-234, 1963.
3. Е.М. Галкина. Флуоресцентная диагностика в дерматологии (обзор) // *Саратовский научно-медицинский журнал*, Т. 9 (3), С. 566-572, 2013.
4. M. Shu, S. Kuo, Y. Wang, et.al. Porphyrin Metabolisms in Human Skin Commensal *Propionibacterium acnes* Bacteria: Potential Application to Monitor Human Radiation Risk // *Current Medicinal Chemistry*, vol. 20(4), pp. 562-568, 2013.
5. K. Koenig, H. Meyer, et.al. The study of endogenous porphyrins in human skin and their potential for photodynamic therapy by laser induced fluorescence spectroscopy // *Lasers in Medical Science*, vol. 8(2), pp. 127-132, 1993.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КРИОПРОТЕКТОРОВ НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ ФОСФОЛИПИДНЫХ ПЛЕНОК МЕТОДОМ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

Ю. В. Зайцева^{1*}, К. А. Окотруб¹, Н. В. Суровцев¹

¹*Институт автоматики и электрометрии СО РАН
630090, Российская Федерация, Новосибирск, пр-кт Академика Коптюга
E-mail: julmari3@mail.ru

При криоконсервации на клеточную мембрану оказывают влияние не только низкие температуры, но и окружающие клетку криопротекторные растворы. Данная работа посвящена исследованию фазового состава модельных фосфолипидных мембран в присутствии различных криопротекторов методом комбинационного рассеяния света.

Исследование влияния различных криопротекторов на клеточные мембраны важно для понимания процессов, происходящих при криоконсервации и может помочь при разработке протоколов замораживания биообъектов. Клеточная мембрана имеет очень сложный липидный состав, поэтому для изучения некоторых свойств мембраны часто используют модельные мембранные системы, состоящие из одного или нескольких фосфолипидов. Распространенной моделью для исследования фазового разделения в мембранах являются трехкомпонентные липидные мембраны, состоящие из упорядоченного липида, разупорядоченного липида и холестерина. Как и клеточная мембрана, трехкомпонентная смесь может разделяться на домены, состоящие из более упорядоченной фазы и менее упорядоченной фазы.

В данной работе исследуется влияние нескольких криопротекторов на фазовый состав пленок липидной смеси DOPC/DPPC-d62/холестерин методом комбинационного рассеяния света (КРС). Использование дейтерированного липида DPPC-d62 вместо DPPC позволяет спектрально разделить вклады двух липидных компонентов смеси.

Были приготовлены высушенные на стекле плоские липидные бислои, содержащие фосфолипиды DOPC и DPPC-d62 и холестерин в соотношении 3/1/1. Полученные пленки выдерживались над парами воды и нескольких криопротекторов: глицерин, ДМСО, этиленгликоль, пропиленгликоль. Было проведено микро-КРС картирование липидных пленок. Так как спектры КРС разных фаз отличаются, по данным КРС были построены карты сосуществующих фаз липидных пленок в парах криопротектора.

Было показано, что фазовое поведение пленок, находящихся в парах глицерина, наиболее похоже на пленки, находящиеся в парах воды. Этиленгликоль и пропиленгликоль уменьшают область сосуществования фаз, кроме того, пропиленгликоль усиливает конформационную разупорядоченность липидов.

Наиболее существенное влияние на липидные пленки оказывали пары ДМСО. Пары ДМСО приводили к заметной дегидратации пленки, фазовый состав таких образцов был близок к составу сухих пленок. Также было обнаружено, что ДМСО может экстрагировать холестерин из пленки и образовывать с кристаллическую фазу.

Также для всех исследованных криопротекторов наблюдалось, что фаза с липидом в менее упорядоченных конформациях содержала больше криопротектора, чем фаза с более упорядоченными конформациями липидов.

Исследование поддержано РФФ № 23-22-00221.

СПЕКТРЫ РАССЕЙНИЯ МАНДЕЛЬШТАМА-БРИЛЛЮЭНА ЛАМЕЛЛЫ РОГОВИЦЫ ЧЕЛОВЕКА ПРИ РАЗНОЙ ГИДРАТАЦИИ

Д. А. Золоторенко^{1*}, К. Ю. Краснер², В. В. Черных²,
С. В. Адищев¹, Н. В. Суровцев¹

¹*Институт автоматки и электрометрии СО РАН
630090, Российская Федерация, г. Новосибирск, пр-кт Академика Коптюга, 1
E-mail: d.skazhutina@g.nsu.ru

²*Новосибирский филиал ФГАУ «НМИЦ «МНТК «Микрохирургия глаза» им. академика С.Н. Федорова»
Минздрава России»
630096, Российская Федерация, г. Новосибирск, ул. Колхидская, 10*

Работа посвящена исследованию ламеллы роговицы глаза человека с помощью спектроскопии рассеяния Мандельштама-Бриллюэна (РМБ). Были экспериментально получены позиции линии РМБ. С помощью методики комбинационного рассеяния света было подтверждено, что сдвиг позиции линии РМБ в разных образцах обусловлен различным уровнем гидратации роговиц. Анализ экспериментальных данных выявил корреляцию между сдвигом позиции линии РМБ и уровнем гидратации образца. Полученные в работе результаты могут быть использованы для учета влияния гидратации при определении эффекта различных офтальмологических заболеваний на гигагерцовый продольный упругий модуль роговиц.

Развитие спектроскопических методик с перспективой применения в офтальмологии является актуальным направлением поисковых исследований. Среди таких методик метод рассеяния Мандельштама-Бриллюэна (РМБ) предоставляет возможность неинвазивно оценивать упругие свойства образцов с высоким пространственным разрешением [1,2]. В настоящее время наблюдается большой всплеск числа работ, посвященных применению спектроскопии РМБ для задач офтальмологии. Потенциально слабым местом методики является влияние степени гидратации образцов на позицию линии РМБ [3], что может вызывать неопределенность при определении влияния различных заболеваний на упругие свойства роговиц. Модельно-независимо уровень гидратации образцов может быть определен (в том числе, локально) методом спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС). Целью данного исследования являлось изучение влияния гидратации на значение упругого модуля ламелл роговиц, определяемых методом РМБ с применением метода КРС для определения степени гидратации.

В работе представлены результаты, полученные на ламеллах роговицы глаза человека толщиной порядка 50-100 мкм, которые были герметично заклеены в кюветы для проведения исследований. Были получены позиции линии РМБ, определяемые значением скорости звука и показателя преломления материала. С использованием методики КРС было подтверждено, что сдвиг позиции линии РМБ в различных образцах обусловлен различным уровнем гидратации роговиц. Анализ полученных данных выявил корреляцию между сдвигом позиции линии РМБ и уровнем гидратации образца. Полученные результаты могут быть использованы для учета влияния гидратации при определении эффекта различных офтальмологических заболеваний на гигагерцовый продольный упругий модуль роговиц.

Список литературы

1. H. Zhang, et.al. Motion-Tracking Brillouin Microscopy Evaluation of Normal, Keratoconic, and Post-Laser Vision Correction Corneas // American Journal of Ophthalmology, vol. 254. pp. 128-140, 2023.
2. G. Scarcelli, et.al. Brillouin microscopy of collagen crosslinking: noncontact depth-dependent analysis of corneal elastic modulus // Investigative ophthalmology & visual science, vol. 54, №. 2. pp. 1418-1425, 2013.
3. P. Shao, et.al. Effects of corneal hydration on brillouin microscopy in vivo // Investigative ophthalmology & visual science, vol. 59, №. 7. pp. 3020-3027, 2018.

СПЕКТРАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КЛИНИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОВ *S.PNEUMONIAE*, *S.ORALIS* И *S.MITIS* МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ

А. В. Зотова¹, Ф. Р. Бажутов³, О. О. Фролов^{1,2}, Е. В. Тимченко^{1,2}, П. Е. Тимченко^{1,2},
А. В. Лямин², И. В. Бажутова², Л. Т. Волова²

¹Самарский национальный исследовательский университет имени академика
С.П. Королёва, Россия, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34

²Самарский государственный медицинский университет, Россия, г. Самара,
ул. Чапаевская, 89

³Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, химический факультет, г. Москва,
Ленинские горы 1с3

В данной работе методом спектроскопии комбинационного рассеяния исследовались штаммы трех близкородственных видов стрептококков *Streptococcus mitis*, *Streptococcus oralis* и *Streptococcus pneumoniae* для экспресс-оценки штаммов бактерий при диагностике пародонтита. В результате проведенных исследований были установлены основные спектральные отличия исследуемых групп образцов, введены критерии для идентификации групп образцов на основе интенсивности линий усредненных спектров комбинационного рассеяния и проведенного дискриминантного анализа. Полученные результаты позволят в дальнейшем проводить экспресс-анализ разных типов штаммов стрептококков с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния.

В современном мире широкое распространение приобрели разнообразные воспалительные заболевания полости рта, в частности - пародонтит. Кроме того, что пародонтит сам по себе является проблемой, приводящей к потере зубов, нарушению окклюзионных взаимоотношений челюстей и функции жевания, он является важным фактором риска осложнений при дентальной имплантации. [1-2]. Основной причиной пародонтита и перимплантита является инфицирование тканей микроорганизмами полости рта. Одним из известных потенциальных участников патологического процесса являются стрептококки, практически в 100% случаев, выявляемые в пародонтальных карманах. [3-5].

Целью исследования являлось спектральное исследование штаммов трех близкородственных видов стрептококков *Streptococcus mitis*, *Streptococcus oralis* и *Streptococcus pneumoniae* методом спектроскопии комбинационного рассеяния для экспресс-оценки штаммов бактерий при диагностике пародонтита.

В качестве объектов исследований были использованы 4 штамма *S.mitis*, 4 штамма *S.oralis* и 3 штамма *S.pneumoniae*. Все изоляты были получены из клинического материала пациентов с заболеваниями полости рта. Рост культур получен на 5% кровяном агаре (HiMedia, Индия), с добавлением бараньей крови (ООО ГЕМ, Россия). Инкубирование посевов проводилось в микроаэрофильных условиях.

В качестве основного метода анализа штаммов *S.mitis*, *S.oralis*, *S.pneumoniae* был использован метод спектроскопии КР, подробно описанный в работах [6-7]. Для каждого вида были получены спектры: *S.pneumoniae* (45 спектров КР (комбинационного рассеяния)), *S.oralis* (60 спектров КР), *S.mitis* (56 спектров КР). Дальнейшая обработка спектров комбинационного рассеяния осуществлялась на основе ресурса «Ramantool v.1.0.175» и дискриминантного анализа.

Основные спектральные отличия между исследуемыми группами проявляются на линиях КР 527 см⁻¹ (S-S disulfide stretching in proteins, Phosphatidylserine или ν(S-S) gauche-gauche-trans (aminoacid cysteine)), 621 см⁻¹ (C-C twisting mode of phenylalanine (proteins)), 1280 см⁻¹ (Amide III, CH₂ wagging vibrations from glycine backbone или proline side chains), 1333 см⁻¹ (Guanine), 1445 см⁻¹ (CH₂ bending modes, deformation C-H bending proteins, deformation CH₂/CH₃ in lipids), 1525 (Amide II), 1692 см⁻¹ (Stretching CO), 1749 см⁻¹ (C=O, lipids).

На линии КР 621 см^{-1} (C-C twisting mode of phenylalanine (proteins)) у образцов группы *S.mitis* наблюдается заметное увеличение интенсивности пика. На линии КР 1280 см^{-1} (Amide III, CH_2 wagging vibrations from glycine backbone или proline side chains) происходят изменения амплитуды интенсивности всех исследуемых групп. На линии КР 1445 см^{-1} (CH_2 bending modes, deformation C-H bending proteins, deformation CH_2/CH_3 in lipids) наибольшую интенсивность имеет группа образцов *S.oralis*. На линии комбинационного рассеяния 1525 см^{-1} (Amide II) наибольшую интенсивность имеет группа образцов *S.pneumoniae*. На линии КР ~ 1692 см^{-1} группа образцов *S.mitis* имеет заметно меньшую амплитуду. Также, на линии ~ 1749 см^{-1} (C=O, lipids) наибольшую интенсивность имеет группа образцов *S.oralis*.

В результате данного исследования были введены критерии для идентификации групп образцов на основе анализа амплитуды интенсивности линий усредненных спектров комбинационного рассеяния и проведенного дискриминантного анализа. Так для штаммов *S.pneumoniae* соответствуют значения $\text{LD-2} < 2$, для штаммов *S.oralis* соответствуют значения $\text{LD-1} < -8$ и $\text{LD-2} > 1$, а для штаммов *S.mitis* значения $\text{LD-1} > -9$ преимущественно.

С помощью ROC анализа рассчитана специфичность разработанного алгоритма, которая составила 81-91% в зависимости от определяемой группы.

Полученные результаты позволят в дальнейшем проводить экспресс-анализ разных типов штаммов стрептококков с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния.

Список литературы

- 1.Н.А. Тунева, Н.В. Богачева, Ю.О. Тунева Проблемы дентальной имплантации // Вятский медицинский вестник, том 2 (62), сс. 86-93, 2019.
2. А.И. Николаев, Л.М. Цепов Практическая терапевтическая стоматология // Медпресс-информ, с. 928, 2019.
3. Л.Ю. Орехова Заболевания пародонта М.: Поли Медиа Пресс, сс. 218-220, 2004.
4. И.В. Бажутова, Д.Д. Исмагуллин, А.В. Лямин, Д.А. Трунин Видовое разнообразие стрептококков при заболеваниях пародонта. // Иммунопатология, аллергология, инфектология. том 1. сс. 81-86, 2023.
5. Д.Д. Исмагуллин, П.В. Бочкарёва, И.В. Бажутова, А.В. Лямин, Р.Р. Галиева, А.В. Жестков, М.О. Золотов Видовое разнообразие стрептококков при локальных и системных инфекциях // Клиническая лабораторная диагностика, том 68 (10), сс. 597-603, 2023.
- 6.Р.Е. Timchenko, E.V. Timchenko, L.T. Volova, O.O. Frolov Use of Raman spectroscopy for the assessment of dentin materials during their fabrication // Journal of Optical Technology, vol. 88 (9), pp. 485-488, 2021.
7. Р.Е. Timchenko, E.V. Timchenko, L.T. Volova, O.O. Frolov Spectral Analysis of Organic Components of Demineralized Bone Biografts // Optics and Spectroscopy (English translation of Optika i Spektroskopiya), vol. 126 (6), pp. 769-775, 2019.

АНАЛИЗ ИНФОРМАТИВНОСТИ СПЕКТРАЛЬНЫХ ПРИЗНАКОВ В ЗАДАЧЕ ИДЕНТИФИКАЦИИ ЗЛОКАЧЕСТВЕННЫХ НОВООБРАЗОВАНИЙ КОЖИ

И. А. Матвеева

Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева
443086, Российская Федерация, Самара, ул. Московское шоссе, д. 34
*E-mail: m-irene-a@yandex.ru

Работа посвящена анализу информативности спектральных признаков при идентификации злокачественных новообразований кожи. Исследованы рамановские спектры кожи в диапазоне 300-1800 см⁻¹. В качестве признаков выделены спектральные отсчеты и комплексные признаки, полученные в результате разложения спектров методом разрешения многомерных кривых. Построены модели классификации новообразований кожи методами логистической регрессии, дискриминантного анализа с проекцией на латентные структуры и градиентного бустинга. Площадь под ROC-кривой построенных моделей принимает значения от 0,62 до 0,82. Показано, что комплексные признаки содержат достаточно информации о спектральных особенностях участка кожи, и добавление в пространство признаков рамановских отсчетов не влияет на эффективность классификации.

Применение рамановской спектроскопии для исследования рака кожи представлено в многочисленных исследованиях [1]. Происходящие в области новообразования биохимические процессы влияют на концентрацию различных биохимических компонентов, что приводит к изменению измеренных рамановских спектров и позволяет дифференцировать различные патологии. Однако анализ экспериментальных рамановских спектров все еще остается сложной задачей, так как спектры содержат большой объем информации обо всех химических веществах кожи. Это делает актуальным разработку новых методов сокращения размерности данных рамановской спектроскопии без потери информативности.

В исследовании используются *in vivo* рамановские спектры, зарегистрированные с помощью портативного рамановского спектрометра со спектральным разрешением 0,2 нм в диапазоне от 800 до 1000 нм при возбуждении на длине волны 785 нм и временем накопления сигнала 60 секунд [2].

Для анализа использовались как необработанные спектры, так и предварительно обработанные спектры. Предварительная обработка включала обрезку в диапазоне 1200-1800 см⁻¹, удаление базовой линии и сглаживание фильтром Савицкого-Голея. Для каждого исследуемого случая известен истинный диагноз, поставленный на основании гистопатологического анализа.

Всего в работе использовано 197 спектров злокачественных новообразований (65 злокачественных меланом (ММ), 120 базальноклеточных карцином (БСС), 12 плоскоклеточных карцином (ССС)) и 405 спектров доброкачественных новообразований (26 дерматофибром (ДФ), 61 папиллома (РР), 40 гемангиом (НН), 111 образцов себорейного кератоза (СК) и 167 невусов (НН) (всех типов)).

В качестве признаков классификации использовались спектральные отсчеты необработанных спектров в диапазоне 300-1800 см⁻¹ (Raw spectra), отсчеты части необработанных спектров с выраженной автофлуоресценцией в диапазоне 300-1200 см⁻¹ (AF), отсчеты предварительно обработанных спектров в диапазоне 1200-1800 см⁻¹ (Raman) и комплексные признаки, полученные в результате разложения спектров методом разрешения многомерных кривых и отражающие вклад основных восьми компонентов кожи в рамановский спектр исследуемого участка кожи (MCR). Процесс получения комплексных признаков подробно описан в [3].

В качестве методов классификации применяются логистическая регрессия, дискриминантный анализ с проекцией на латентные структуры (PLS-DA) и метод градиентного бустинга (реализация LightGBM). Стабильность полученных классификационных моделей проверялась 10-кратной кросс-валидацией.

ROC-кривые и площади под ROC-кривой (ROC AUC) моделей классификации

злокачественных и доброкачественных новообразований представлены на рис. 1 и в табл. 1.

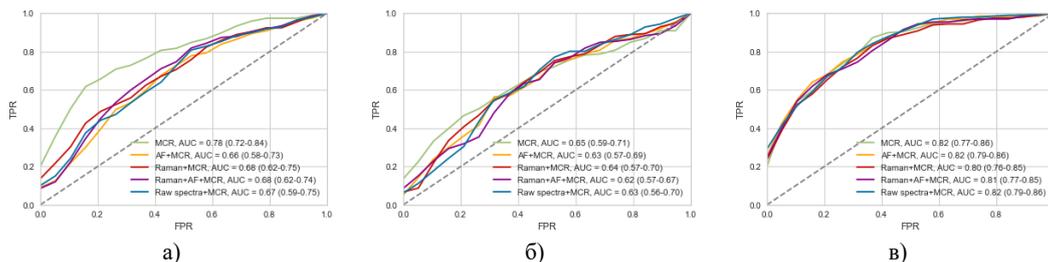


Рис. 1. ROC-кривые моделей классификации злокачественных и доброкачественных новообразований различными методами: а) логистическая регрессия; б) PLS-DA; в) LightGBM. Доверительные интервалы ROC AUC рассчитаны для уровня вероятности не менее 95%

Таблица 1
Значения ROC AUC для моделей классификации, построенных в данной работе. Доверительные интервалы ROC AUC рассчитаны для уровня вероятности не менее 95%

Признаки	Методы	Логистическая регрессия	PLS-DA	LightGBM
MCR		0,78 (0,72-0,84)	0,65 (0,59-0,71)	0,82 (0,77-0,86)
AF (300-1200 cm^{-1}) + MCR		0,66 (0,58-0,73)	0,63 (0,57-0,69)	0,82 (0,79-0,86)
Raman (1200-1800 cm^{-1}) + MCR		0,68 (0,62-0,75)	0,64 (0,57-0,70)	0,80 (0,76-0,85)
Raman (1200-1800 cm^{-1}) + AF (300-1200 cm^{-1}) + MCR		0,68 (0,62-0,74)	0,62 (0,57-0,67)	0,81 (0,77-0,85)
Raw spectra (300-1800 cm^{-1}) + MCR		0,67 (0,59-0,75)	0,63 (0,56-0,70)	0,82 (0,79-0,86)

В случае применения в качестве способа классификации логистической регрессии самое высокое значение ROC AUC составляет 0,78 (0,72-0,84, 95% CI) при использовании только MCR признаков. В случае применения для классификации методов PLS-DA и LightGBM ROC AUC варьируется от 0,62 до 0,65 и от 0,80 до 0,82, соответственно.

Таким образом, сложно определить, при использовании каких спектральных признаков классификация производится более эффективно, так как ROC AUC имеют сравнимые значения. Это позволяет сделать вывод о том, что MCR компоненты содержат достаточно полную информацию о рамановском спектре для идентификации злокачественных и доброкачественных новообразований, и нет необходимости вносить в модели классификации дополнительные признаки помимо комплексных признаков, выделенных в результате MCR анализа. Другими словами, метод MCR позволяет эффективно сокращать размерность спектральных данных рамановского рассеяния без потери информативности.

Список литературы

1. D. Lunter, V. Klang, D. Kocsis, et.al. Novel aspects of Raman spectroscopy in skin research // *Experimental Dermatology*, vol. 31 (9), pp. 1311-1329, 2022.
2. Y. A. Khristoforova, I. A. Bratchenko, O. O. Myakinin, et.al. Portable spectroscopic system for in vivo skin neoplasms diagnostics by Raman and autofluorescence analysis // *Journal of biophotonics*, vol. 12 (4), pp. e201800400, 2019.
3. I. Matveeva, I. Bratchenko, Y. Khristoforova, et.al. Multivariate curve resolution alternating least squares analysis of in vivo skin Raman spectra // *Sensors*, vol. 22 (24), pp. 9588, 2022.

ВОССТАНОВИТЕЛЬНОЕ ФОТОРАСТВОРЕНИЕ НАНОЧАСТИЦ МАГГЕМИТА

Е.О. Моисеева, С. В. Герман, Д.А. Горин

Сколковский институт науки и технологий, г. Москва, 121205, Большой бул., 30, стр. 1

*E-mail: ekaterina.moiseeva@skoltech.ru

Синтезированы магнитные наночастицы маггемита ($\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$) со средним размером ядра 6 ± 1 нм и индексом полидисперсности менее 0.3. Полученные наночастицы $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ подвергались воздействию света видимого диапазона с максимальной длиной волны эмиссии при 460, а также 530 нм. Эффективность восстановительного фоторастворения и количество высвободившихся ионов Fe^{2+} после облучения оценивалось методом спектрофотометрии. Изучено изменение магнитно-резонансных контрастных свойств в ходе реакции фотохимического растворения магнитного оксида посредством оценки скорости протонной релаксации методом ядерно-магнитной релаксометрии.

Наномедицинские препараты, направленные против онкологических заболеваний, в последнее десятилетие привлекают особое внимание научного сообщества, так как, в частности, могут сочетать в себе две функции - терапию и диагностику. Благодаря своим контрастным свойствам и потенциальной токсичности суперпарамагнитные наночастицы на основе оксида железа (SPIONs) являются перспективными агентами для мультимодального применения. Однако, в форме оксида железо мало токсично, поэтому коллоидные SPIONs широко применяются в клинической практике как контрасты для магнитно-резонансной томографии (МРТ), и не эффективны в качестве терапевтических агентов. Известно, что оксиды железа под воздействием солнечного света растворяются при pH ниже 8, а ионы двухвалентного и трёхвалентного железа производят выраженное в цитотоксическое действие живые клетки [1,2].

В данной работе наночастицы маггемита ($\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$) с размером магнитного ядра 6 ± 1 нм получены по методике соосаждения солей двухвалентного и трёхвалентного железа в автоматическом химическом реакторе CR-1 (TetraQuant, Россия) [3]. Гидродинамический диаметр SPIONs в воде, измеренный методом динамического светорассеяния (ДСР), составил 30 нм и дзета-потенциал -35 мВ, что указывает на высокую стабильность полученных коллоидных наночастиц в растворе и отсутствие агрегатов. Для того, чтобы исследовать эффективность фоторастворения под воздействием влияния видимого излучения на SPIONs, концентрацию ионов железа в растворе до и после облучения исследовали спектрофотометрическим методом по реакции с 1,10-фенантролином. Показано, что при облучении раствора SPIONs видимым светом 460 нм преимущественно образуются ионы двухвалентного железа, в то время как воздействие света с длиной волны 530 нм не оказывает существенного влияния, и результирующая концентрация ионов железа слабо отличается от контрольного (темного) эксперимента. При изучении изменения времен релаксации наночастиц маггемита обнаружено, что при облучении раствора светом 460 нм оба времени продольной и поперечной релаксации существенно увеличиваются, что указывает на изменения МРТ-контраста SPIONs при их фоторастворении. Таким образом, полученные результаты имеют практическое значение и актуальны для будущих разработок в контексте триггерного релиза и направленных терапевтических препаратов на основе магнитных наночастиц.

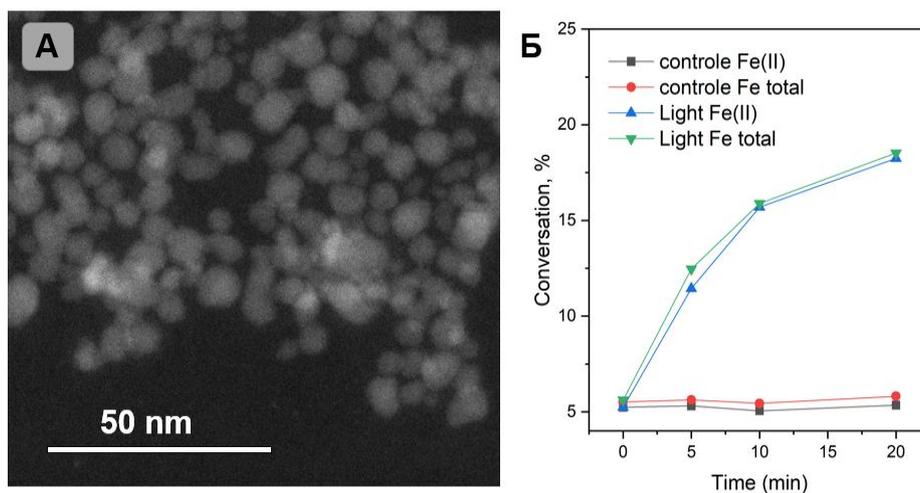


Рис. 1. ПЭМ изображения наночастиц полученных наночастиц маггемита (А), кинетическая кривая растворения полученных наночастиц под воздействием видимого излучения (Б).

Исследование поддержано программой «Клевер»: Совместные проекты Сколтеха, МФТИ и ИТМО.

Список литературы

1. Lv Y. et al. Photoreductive dissolution of iron (hydr) oxides and its geochemical significance // *ACS Earth and Space Chemistry.*, vol. 6(4), pp. 811-829, 2022.
2. Tang Z. et al. Chemodynamic therapy: tumour microenvironment-mediated Fenton and Fenton-like reactions // *Angewandte Chemie.*, vol. 131(4), pp. 958-968, 2019.
3. German, S. V., et al. Synthesis of magnetite hydrosols in inert atmosphere // *Colloid Journal*, vol. 75, pp. 483-486, 2013.

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОВ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА ТИХОХОДОК

А. Н. Омельченко^{1,2*}, К. А. Окотруб²

¹Новосибирский государственный университет
630090, Российская Федерация, Новосибирск, ул. Пирогова, д. 22

*E-mail: omelchenko.an.n@mail.ru

²Институт автоматизи и электрометрии СО РАН
630090, Российская Федерация, Новосибирск, пр. Академика Коптюга, д. 1

В данной работе исследуются возможности спектроскопии комбинационного рассеяния света (КРС) для изучения тихоходок. Рассмотрены спектры КРС от различных внутренних структур тихоходки, в том числе коготков и стилетов. Полученное по спектрам пространственное распределение данных структур хорошо согласуется с изображением светлого поля.

Тихоходки – это микроскопические животные, которые известны своей устойчивостью к экстремальным условиям окружающей среды, для чего переходят в состояние криптобиоза. Несмотря на микроскопический размер, тихоходки являются многоклеточными животными, имеющими отдельные органы и ткани, и их внутренний состав во многом определяется образом жизни животного. Перестройка этих животных в состояние криптобиоза и исследование изменений, происходящих в экстремальных условиях (вакуум, обезвоживание, низкие температуры) требуют внедрения ранее не применявшихся экспериментальных методов.

Для изучения индивидуальных характеристик и внутреннего состава различных биологических объектов успешно применяются методики спектроскопии, в том числе и спектроскопия комбинационного рассеяния света (КРС). Это неинвазивная, бесконтактная и неразрушающая методика, которая обладает высоким пространственным разрешением и позволяет проводить измерения от живых объектов. Однако, на данный момент работ, посвященных спектроскопии КРС тихоходок, мало. Поэтому целью данной работы является поиск оптимальных условий эксперимента КРС для исследования тихоходок и интерпретация их спектров.

В данной работе с помощью спектроскопии КРС исследовались тихоходки неизвестного вида, полученные из образца мха. Животные добывались путем отстаивания мха в минеральной воде и последующего их извлечения из субстрата. Во время проведения эксперимента тихоходки в капле воды были помещены между двух стекол из плавленого кварца и загерметизированы для предотвращения высыхания.

В результате были получены спектры КРС тихоходок и проведены эксперименты по картированию отдельных участков. Применение анализа главных компонент позволило исследовать вариации спектров внутри объекта, по которым возможно идентифицировать полость тела, коготки и отдельные ткани. Также с помощью спектроскопии КРС удалось визуализировать отдельные части стилетов тихоходки по характерному пику на 1084 см^{-1} , отвечающему карбонату кальция. Полученные карты распределения отдельных веществ согласуются с изображением светлого поля. В ходе работы также было выяснено, что тихоходки вполне могут быть жизнеспособны после проведения данной процедуры.

Полученные результаты указывают на перспективность использования спектроскопии КРС в качестве методики исследования изменений, протекающих в тихоходках для выживания в экстремальных условиях.

АНАЛИЗ РАМАНОВСКИХ СПЕКТРОВ СЫВОРОТКИ КРОВИ МЕТОДОМ РАЗРЕШЕНИЯ МНОГОМЕРНЫХ КРИВЫХ

И. А. Пименова*, И. А. Матвеева

Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева,
660074, Российская Федерация, Самара, ул. Московское шоссе, д. 34

*E-mail: pimenova.0312@list.ru

Биологические образцы тканей или жидкостей представляют собой смесь множества различных биомолекул, каждая из которых вносит свой вклад в рамановский спектр образца. Разделение и идентификация чистых биохимических компонентов остается одной из самых востребованных задач в рамановской спектроскопии. Целью данного исследования является изучение возможности применения метода разрешения многомерных кривых с использованием метода чередующихся наименьших квадратов (MCR-ALS) для анализа *in vitro* рамановских спектров образцов сыворотки крови. В результате анализа получены спектральные профили компонентов, входящих в состав исследуемых образцов.

Рамановская спектроскопия является перспективным методом достижения повышения прогностической значимости при исследовании комплекса изменений компонентного состава крови [1]. Это неинвазивный оптический метод, который использует взаимодействие света с молекулами для получения информации о их структуре и состоянии. Основой этого метода является эффект Рамана, который заключается в изменении частоты и интенсивности рассеянного света при взаимодействии со спектрально активными молекулами. При проведении рамановской спектроскопии образец подвергается облучению лазерным светом определенной длины волны. Часть этого света неупруго рассеивается молекулами образца, и рассеянный свет анализируется с помощью спектрометра. В результате анализа можно получить информацию о колебательных и вращательных состояниях молекул, а также о химическом составе образца. Целью данного исследования является изучение возможности применения метода разрешения многомерных кривых с использованием метода чередующихся наименьших квадратов (MCR-ALS) для анализа *in vitro* рамановских спектров образцов сыворотки крови.

В этой работе анализируются *in vitro* рамановские спектры сыворотки крови 100 людей: 50 с сердечной недостаточностью и 50 здоровых. Образцы сыворотки крови отбирали утром натощак и помещали в стерильные пробирки с последующим замораживанием при температуре -16°C . Непосредственно перед спектральным анализом образцы размораживали при комнатной температуре. Запись рамановских спектров проводилась по технологии поверхностно-усиленной рамановской спектроскопии (SERS), подробно описанной в [2]. Каждый образец сыворотки объемом 1,5 мкл наносили на алюминиевую фольгу со слоем серебряных структур и сушили в течение 30 минут. Регистрацию спектров проводили с помощью экспериментального стенда, состоящего из спектрометрической системы и микроскопа ADF U300. Спектры возбуждались в ближнем инфракрасном диапазоне с помощью лазерного модуля с центральной длиной волны 785 нм. Объектив LMP1ap с увеличением 50x использовался для фокусировки излучения на образце и сбора рассеянного излучения. Диаметр лазерного пятна в фокусе составлял 5 мкм, мощность лазера 10 мВт. Записанные спектры подвергались предварительной обработке, описанной в [3]. Далее применялся метод MCR-ALS, описанный в [4].

В результате MCR-анализа из исследуемых рамановских спектров сыворотки крови выделено восемь компонентов (рис.1). На рис. 1, а) пик 714 см^{-1} соответствует метионину, 1005 см^{-1} – растяжению ароматического кольца $\text{C}=\text{C}$, что соответствует фенилаланину, или растяжению $\text{N}-\text{C}-\text{N}$ в мочеvine, 1239 см^{-1} – вкладу липидов и амида III, 1393 см^{-1} – вкладу креатинина. На рис. 1, б) пик 1213 см^{-1} соответствует триптофану и фенилаланину, 1330 см^{-1} полносимметричному валентному колебанию кольца гуанина или аденина, а пик 1437 см^{-1} – липидам, деформация CH_2 . На рис. 1, в) пик на 940 см^{-1} , скорее всего, полоса растяжения $\text{C}-\text{C}$, 1368 см^{-1} – гуанин, TRP (белок), порфирины, липиды. На рис. 1, г) встречается пик 725 см^{-1} , соответствующий влиянию

мочевины и креатинина, пик 1056 см^{-1} – C–N в углеводах, 1330 см^{-1} – полносимметричному валентному колебанию кольца гуанина или аденина. На рис. 1, д) пик 645 см^{-1} соответствует вкладу тирозина, 678 см^{-1} – полносимметричному валентному колебанию кольца гуанина, 1001 см^{-1} – растяжению ароматического кольца C=C, что соответствует фенилаланину, или растяжению N–C–N в мочеvine. На рис. 1, ж) пики соответствуют тирозину (пик на 644 см^{-1}) и липидной и белковой деформации CH_2 (пик на 1440 см^{-1}). На рис. 1, з) видно кольцевую вибрацию целлюлозы на 497 см^{-1} , а пик 635 см^{-1} соответствует мочевой кислоте [5, 6].

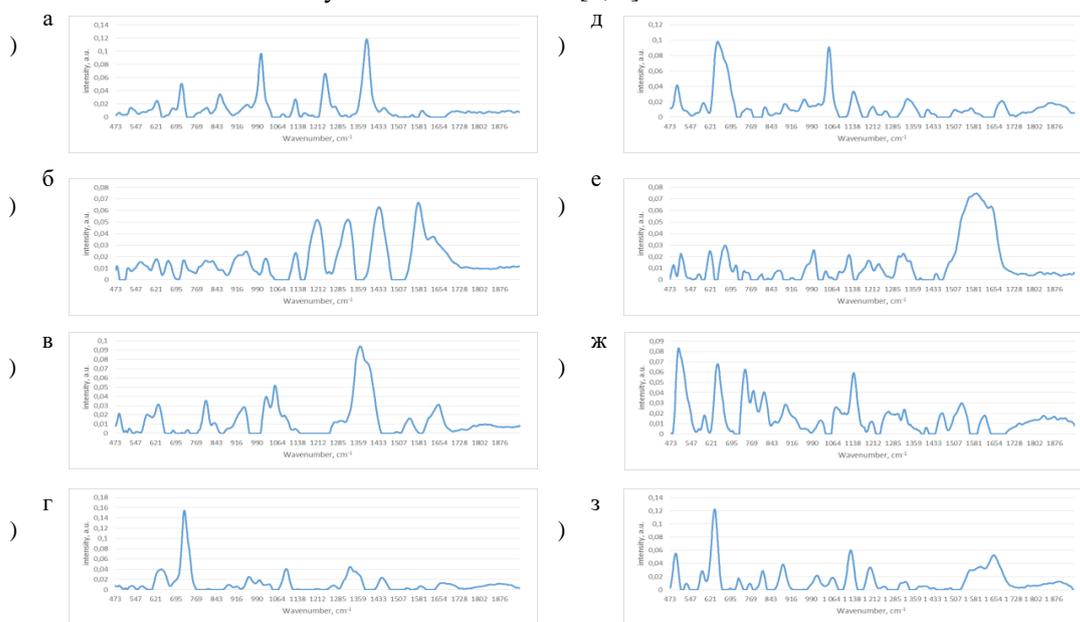


Рис. 1. Рамановские спектры компонентов сыворотки крови, полученные с помощью MCR анализа *in vitro* спектров рамановского рассеяния

В работе показана возможность применения метода MCR-ALS для анализа *in vitro* рамановских спектров образцов сыворотки крови. Полученные в результате анализа спектральные профили отражают основные компоненты, содержащиеся в составе исследуемых образцов. Дальнейшие исследования будут посвящены использованию данных о компонентном составе образцов сыворотки крови в качестве признаков для идентификации заболеваний.

Список литературы

1. Methods of biochemical analysis / ed. D. Glick. New York: John Wiley & Sons, 527 p., 2009.
2. C.G. Atkins, K. Buckley, M.W. Blades, et.al. Raman spectroscopy of blood and blood components // Applied spectroscopy, vol. 71 (5), pp. 767-793, 2017.
3. Y.A. Khristoforova, L.A. Bratchenko, M.A. Skuratova, et.al. Raman spectroscopy in chronic heart failure diagnosis based on human skin analysis // Journal of biophotonics, pp. e202300016, 2023.
4. J. Jaumot, A. Juan, R. Tauler. MCR-ALS GUI 2.0: New features and applications // Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, vol. 140, pp. 1-12, 2015.
5. X. Yue, H. Li, J. Tang, et.al. Rapid and label-free screening of echinococcosis serum profiles through surface-enhanced Raman spectroscopy // Anal. Bioanal. Chem., vol. 412, pp. 279-288, 2020.
6. J. Wang, D. Lin, J. Lin, et.al. Label-free detection of serum proteins using surface-enhanced Raman spectroscopy for colorectal cancer screening // RSC advances, vol. 19 (8), pp. 087003-087003, 2014.

ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ИОННЫХ ФОРМ ЦЕЛЕНТЕРАЗИНА В РАСТВОРЕ И В ФОТОПРОТЕИНОВОМ КОМПЛЕКСЕ: ТЕОРИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТ

А. В. Рогова^{1*}, Ф. Н. Томилин^{1,2}, Н. П. Маликова³, Е. С. Высоцкий³

¹Сибирский федеральный университет
660041, Российская Федерация, Красноярск, пр. Свободный, 79
*E-mail: arogoval924@gmail.com

²Институт физики им. Киренского, Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр СО РАН», 660036, Россия, Красноярск, Академгородок 50/38

³Институт биофизики Федерального исследовательского центра «Красноярский научный центр СО РАН» 660036, Россия, Красноярск, Академгородок 50/50

Обелин, акворин и др. фотопротеины, происходящие в основном от морских биолюминесцентных организмов, обитающих в холодных морях, представляют собой подсемейство Ca^{2+} -регулируемых фотопротеинов. С развитием знаний о пространственной структуре некоторых белков, стало возможным определение свойств фотопротеинов, в частности, роли отдельных аминокислот. Предложены различные механизмы биолюминесцентной реакции белков. Однако, до сих пор неизвестен первый шаг образования активного фотопротеинового комплекса с 2-гидропероксицелентеразином. С помощью квантовохимических расчетов удалось получить недоступную для эксперимента информацию о влиянии pH на образование активного обелина и акворина, кроме того, информацию о структурных изменениях белков и конформационном изменении субстрата в окружении аминокислот.

В настоящее время большой интерес вызывают фотопротеины морских организмов, способные к излучению света при связывании с ионами кальция. Это свойство даёт возможность обнаруживать ионы кальция в живых клетках. Клонирование генов, кодирующих белки (обелин, акворин и др.), обеспечило значительный прорыв в их аналитическом применении путем экспрессии в клетках-мишенях. Апофотопротеины, экспрессированные в клетках, легко превращаются в активные фотопротеины путем внеклеточного добавления целентеразина, поскольку он может свободно диффундировать в клетки через их мембрану. В результате, получается «встроенный» кальциевый индикатор, позволяющий проводить мониторинг клеток в их естественной среде обитания. Данная технология позволяет измерять количество ионов кальция в конкретных компартментах клеток [1].

Проведены многочисленные структурные и мутагенезисные исследования, выясняющие роли отдельных аминокислотных остатков, расположенных во внутренней полости фотопротеинов гидромедуз. По полученным структурным данным предложены различные механизмы запуска биолюминесцентной реакции и образования целентерамида, а также роль некоторых остатков субстрат-связывающей полости в этих процессах [2]. Однако, об образовании активного фотопротеинового комплекса известно гораздо меньше, хотя понимание механизма начала реакции и влияния различных факторов на процесс очень важно, особенно для мониторинга кальция в цитоплазме и др. Таким образом, с помощью экспериментальных и расчетных методов исследовано влияние pH на образование активного обелина и акворина, несмотря на то, что данные фотопротеины очень похожи, тем не менее, они отличаются по спектрам биолюминесценции, кинетики реакций биолюминесценции и чувствительности к кальцию.

Квантовохимические расчёты таутомерных форм субстрата проводились методом функционала плотности с помощью САМ-В3LYP функционала в базисе *aug-cc-pVDZ*. С помощью метода TD-DFT рассчитаны спектры поглощения для каждой формы целентеразина (СТЗ) в газовой фазе и с учётом растворителя. Затем, выбранная форма СТЗ была размещена в активный центр обелина (1QV0), фотопротеиновый комплекс был оптимизирован с помощью метода квантовохимических фрагментов (FMO) [3]. Спектры поглощения для СТЗ в активном центре белка были рассчитаны методом FMO1/TD-B3LYP/6-31Gs/PCM. Максимум спектра поглощения субстрата в полости обелина составил 397 нм. Данное значение соответствует второму пику поглощения ($\lambda_{max} = 400$ нм) активного обелина. Совпадение экспериментальных и теоретических

данных подтверждает гипотезу об расположении анионной формы CTZ в активном центре фотопротейна.

Все расчёты выполнены в программе GAMESS [4].

Список литературы

1. M.T. Alonso, et.al. Use of aequorin-based indicators for monitoring Ca^{2+} in acidic organelles // *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Molecular Cell Research*, vol. 1870, p. 11948, 2023.

2. P.V. Natashin, et al. The role of Tyr-His-Trp triad and water molecule near the N1-atom of 2-hydroperoxycoelenterazine in bioluminescence of hydromedusan photoproteins: Structural and mutagenesis study // *International Journal of Molecular Sciences*, vol. 24, p. 6869, 2023.

3. D.G. Fedorov, The fragment molecular orbital method: theoretical development, implementation in GAMESS, and applications // *WIREs Computational Molecular Science*, vol. 7 (6), p. 1322, 2017.

4. M.W. Schmidt, et al. General atomic and molecular electronic structure system // *Journal of computational chemistry*. Wiley Online Library, vol. 14 (11), pp. 1347-1363, 1993.

МАГНИТОМЕХАНИЧЕСКАЯ ТЕРАПИЯ ЗЛОКАЧЕСТВЕННЫХ НОВООБРАЗОВАНИЙ ОДНОДОМЕННЫМИ МАГНИТНЫМИ НАНОЧАСТИЦАМИ В ПЕРЕМЕННОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

П. Н. Сёмина^{1*}, А. А. Пьяных², И. Л. Исаев³, С. В. Комогорцев⁴, А. С. Костюков¹,
Д. Е. Хренников¹, В. А. Фельк⁴, С. П. Полютов¹, С. В. Карпов^{1,4}

¹Международный научно-исследовательский центр спектроскопии и квантовой химии, Сибирский федеральный университет, 660074, Российская Федерация, Красноярск, ул. Киренского, д. 26;

*E-mail: polina_semina@mail.ru

²Сибирский федеральный университет, 660041, Российская Федерация, Красноярск, пр. Свободный 79;

³Институт вычислительного моделирования СО РАН, 660036, Российская Федерация, Красноярск, ул. Академгородок, 50/44;

⁴Институт физики им. Л. В. Киренского, ФИЦ Красноярский научный центр СО РАН, 660036, Российская Федерация, Красноярск, ул. Академгородок, 50/38.

В работе обсуждаются свойства однодоменных суперпарамагнитных магнетитовых наночастиц, предназначенных для реализации методов избирательного повреждающего воздействия на мембраны злокачественных клеток и противораковой магнитомеханической терапии. Анализируются физические закономерности формирования многочастичных агрегатов, связанных с механорецепторами раковых клеток, в коллективном магнитном поле субагрегатов. Дана интерпретация экспериментальным результатам применения магнитомеханической терапии с использованием магнетитовых наночастиц, что подтверждает возможность успешной реализации метода для высокоэффективного лечения злокачественных новообразований.

Одной из наиболее перспективных и быстро развивающихся стратегий современной биомедицины является нанотераностика. В её основе лежит совокупность физических процессов и средств управления различными наночастицами (НЧ), которые функционализируются под определённые задачи и способны как распознавать конкретные молекулярные мишени, так и воздействовать на них.

Магнитные наночастицы (МНЧ) перспективны для лечения злокачественных новообразований, а методы магнитомеханической терапии, основанные на низкочастотном механическом воздействии на мембрану раковых клеток, обладают рядом преимуществ по сравнению традиционными методами лечения. В частности, преимуществом магнитомеханической терапии является большая глубина проникновения поля, охватывающая весь организм.

В работе [1] *in vivo* и *in vitro* исследовалась эффективность магнитомеханической терапии с использованием как гидрозолей с суперпарамагнитными магнетитовыми и золотыми наночастицами, так и наночастиц "core-shell" с магнетитовым ядром диаметром 12-14 нм и золотой оболочкой с внешним размером до 50 нм и конъюгированными на её поверхности ДНК-аптамерами, что обеспечивало адресную доставку магнитных наночастиц к карциноме Эрлиха мыши *in vivo*. Воздействие переменного магнитного поля частотой 50 Гц в месте локализации опухоли в течение 10-15 минут сопровождалось апоптозом (запрограммированной клеточной гибелью) опухолевых клеток карциномы Эрлиха без их нагрева и подавлением злокачественного процесса. Интерпретация полученных экспериментальных результатов и обсуждение условий запуска апоптоза представлены в работе [2].

В настоящей работе установлены основные закономерности и физические процессы, связанные с реализацией магнитомеханической терапии. Основным фактором воздействия на злокачественные клетки в низкочастотных магнитных полях являются МНЧ, функционализованные аптамерами и распознающие злокачественные ткани. Направленное воздействие МНЧ на мембраны злокачественных клеток, с которыми связываются МНЧ, осуществляется путём механического вращения МНЧ в переменном МП. Соединение МНЧ с элементами мембраны приводит к механическому воздействию на механорецепторы клетки в условиях вращения МНЧ.

Методом броуновской динамики с использованием реалистичных парных потенциалов было установлено, что суперпарамагнитные магнетитовые НЧ с флуктуирующим магнитным дипольным моментом объединяются в цепочечные агрегаты. Образование вытянутых агрегатов из суперпарамагнитных магнетитовых наночастиц может происходить как в присутствии, так и в отсутствие внешнего магнитного поля в условиях постепенного формирования небольших агрегатов и блокировки в них тепловых флуктуаций магнитного момента. Для исследования этого эффекта модель броуновской динамики была дополнена условием сохранения магнитных моментов наночастиц, входящих в состав агрегатов из трёх и более частиц. Структурная анизотропия таких агрегатов возникает вследствие доминантного взаимодействия магнитных моментов частиц друг с другом в условиях сонаправленности их дипольных моментов в цепочечной структуре. Показано, что воздействие на механорецепторы злокачественных клеток для запуска апоптоза, оцениваемое пороговым значением силы (4 пН), невозможно через одиночные магнетитовые НЧ размером 11—14 нм в условиях, соответствующих экспериментальным данным. Методом броуновской динамики установлено, что суперпарамагнитные магнетитовые НЧ с флуктуирующим магнитным моментом могут объединяться в цепочечные агрегаты, рост которых начинается на центрах агрегации. Этими центрами являются биоконъюгаты золотых НЧ, избирательно связанных с механорецепторами злокачественных клеток. В процессе роста магнетитовых агрегатов флуктуации магнитных дипольных моментов в их отдельных частицах прекращаются, что сопровождается формированием суммарного постоянного магнитного дипольного момента. Агрегации магнетитовых наночастиц сопутствуют следующие последствия: подавление тепловых флуктуаций магнитного момента в одиночных суперпарамагнитных НЧ со средним размером порядка 11 нм с учётом того, что сохранение магнитного момента в одиночных магнетитовых частицах возможно при их размерах более 20 нм; взаимодействие магнитных моментов НЧ в условиях их ориентационного упорядочения создаёт коллективное магнитное поле, которое подавляет тепловые флуктуации и позволяет сохранить амплитуду и направление магнитного момента НЧ, что фактически придаёт им ферромагнитные свойства; увеличение суммарного магнитного момента агрегата, что способствует увеличению силы воздействия на мембранные механорецепторы, значительно превышающей пороговое значение.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, проект № ФСРЗ-2023-0006.

Список литературы

1. I.V. Belyanina, T.N. Zамay, G.S. Zамay, et. al. In vivo cancer cells elimination guided by aptamer-functionalized gold-coated magnetic nanoparticles and controlled with low frequency alternating magnetic field // *Theranostics*, vol. 7(13), pp. 3326-3337, 2017.
2. P.N. Semina, I.L. Isaev, S.V. Komogortsev, et. al. Towards understanding the triggering of the malignant cell death in high-efficiency magneto-mechanical anticancer therapy // *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 56(6), p. 065401, 2023.

КОМБИНАЦИЯ ФОТОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕРАПИИ И НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ СИСТЕМ ДОСТАВКИ ЛЕКАРСТВ ДЛЯ ТЕРАПИИ ОНКОЛОГИЧЕСКИХ ЗАБОЛЕВАНИЙ

И.С. Сергеев^{1*}, Е.О. Моисеева¹, Б.Н. Хлебцов², Д.А. Горин¹

¹ Сколковский институт науки и технологий, Москва, Россия

*E-mail: igor.sergeev@skoltech.ru

² ФГБУН институт биохимии и физиологии растений и микроорганизмов РАН, Саратов, Россия

Разработка искусственных ферментов на основе наночастиц, называемых нанозимами, привлекает значительное внимание из-за их экономичности, стабильности и надежности [1]. Нанозимы с каталазоподобной активностью способствуют быстрому расщеплению перекиси водорода на воду и кислород. Фотодинамическая терапия (ФДТ) рассматривается как один из наиболее перспективных методов лечения рака благодаря своей низкой токсичности и минимально инвазивному подходу [2]. Однако микроокружение опухоли часто характеризуется низким рН, недостатком кислорода и высокими уровнями перекиси водорода. Для преодоления проблем, связанных с гипоксией, ФДТ можно сочетать с нанозимами, реагирующими с H_2O_2 и обладающими каталазоподобными свойствами, что повышает общую эффективность терапии. Несмотря на то, что активность нанозимов обычно ниже, чем у природной каталазы, это помогает снизить риск кислородной токсичности в клетках.

Наночастицы золота часто применяются для достижения высокой каталазоподобной активности [3]. Однако в биологических жидкостях с высокой ионной силой эти наночастицы склонны к агрегации [4]. Также существуют проблемы, связанные с высоким содержанием биомолекул в крови, особенно белков, которые формируют так называемую "протеиновую корону" [5]. Эта корона может привести к дестабилизации частиц и пассивации их поверхности [6]. Эти эффекты могут негативно влиять на биораспределение и время циркуляции наночастиц, а также снижать их каталитическую активность.

В данном исследовании изучалась концепция сочетанной фотодинамической терапии и генерации кислорода посредством использования полимерных капсул, содержащих наночастицы золота и фотосенсибилизатор. Субмикронные капсулы были созданы методом пошаговой адсорбции полимеров с последующим растворением ядра из $CaCO_3$. Полученные частицы демонстрируют улучшенную эффективность ФДТ для преодоления гипоксии в опухолевых тканях. Субмикрокапсулы, содержащие наночастицы золота и фотосенсибилизатор, применялись как фотоактивное противоопухолевое средство и каталазоподобный нанокатализатор. Эти капсулы обладают двумя важными характеристиками: они предотвращают агрегацию и неспецифические взаимодействия встроенных молекул с эндогенными компонентами, в частности с белками, а также усиливают фотодинамическое воздействие за счет дополнительного выделения кислорода при переработке внутриклеточной перекиси водорода. Оболочка капсул также защищает наночастицы от опсонизации, предотвращая адсорбцию белков на их поверхности.

Светоактивируемый каталитический микрореактор, созданный на основе этих капсул, представляет собой значительный шаг вперед в развитии фотодинамических терапевтических средств и открывает новые перспективы для лечения рака. Полумаксимальная эффективная концентрация (IC_{50}) для капсул, содержащих фотосенсибилизатор и наночастицы золота, была примерно в 10 раз ниже, чем для капсул с одним лишь фотосенсибилизатором, и в 100 раз ниже по сравнению с чистым фотосенсибилизатором (рис. 1).

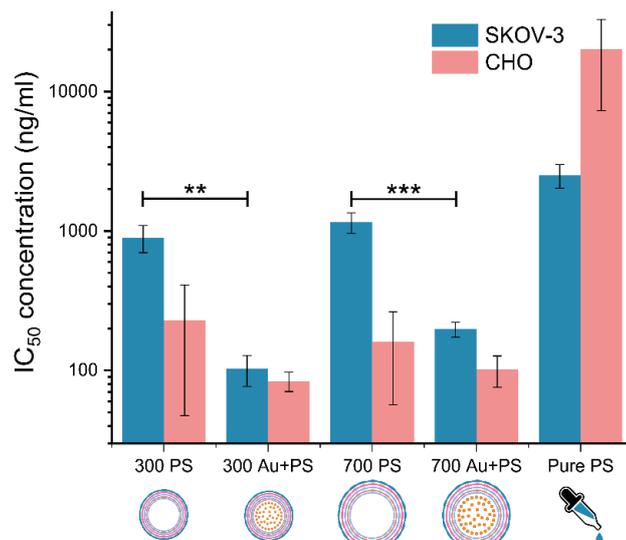


Рис. 1. Расчеты IC₅₀. Синие столбцы обозначает линию клеток SKOV-3, красные – линию клеток CHO. Полосы ошибок обозначают SD (n = 3). Статистически значимая разница, обозначенная ** при P < 0,001 и *** при P < 0,0001, получена с использованием двухуровневого дисперсионного анализа.

Исследование поддержано программой «Клевер»: Совместные проекты Сколтеха, МФТИ и ИТМО

Список литературы

1. Wang, X. et al. Nanozymes in bionanotechnology: from sensing to therapeutics and beyond // *Inorg. Chem. Front.*, vol. 3(1), pp. 41-60, 2016.
2. Huang, L. et al. Photodynamic therapy for hypoxic tumors: Advances and perspectives // *Coord. Chem. Rev.*, vol. 438, p. 213888, 2021.
3. Li, J. et al. Mechanism of pH-switchable peroxidase and catalase-like activities of gold, silver, platinum and palladium // *Biomaterials*, vol. 48, pp. 37-44, 2015.
4. Guerrini, L. et al. Surface Modifications of Nanoparticles for Stability in Biological Fluids // *Materials*, vol. 11(7), p. 1154, 2018.
5. Walkey, C. D. et al. Understanding and controlling the interaction of nanomaterials with proteins in a physiological environment // *Chem. Soc. Rev.*, vol. 41(7), pp. 2780-2799, 2012.
6. Johnston, B. D. et al. Colloidal Stability and Surface Chemistry Are Key Factors for the Composition of the Protein Corona of Inorganic Gold Nanoparticles // *Adv. Funct. Mater.*, vol. 27(42), p. 1701956, 2017.

СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ЛАКТОЗЫ, НАСЫЩЕННОЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИ ОБРАБОТАННЫМ РАСТВОРОМ АНТИТЕЛ, В ОПТИЧЕСКОМ И РАДИОДИАПАЗОНАХ.

Г. О. Степанов^{1*}, Е. А. Слюсарева², Д. Ю. Черников²

¹ООО НПФ «Медика-холдинг»,
127473, Российская Федерация, г.Москва, 3-й Самотечный пер., д.9
*E-mail: stepanovgo@materiamedica.ru

²Институт инженерной физики и радиоэлектроники Сибирского федерального университета,
660028, г. Красноярск, ул. академика Куренского, д.28.

Продемонстрированы возможности контроля радиофизических свойств лактозы, насыщенной технологически обработанным раствором антител, приготовленным по технологии сверхвысоких разбавлений (СВР), сопряженной с механическим воздействием, за счет измерений интенсивности переизлученного радиосигнала сантиметрового диапазона

В работе исследованы спектральные свойства лактозы, предварительно насыщенной технологически обработанным раствором антител, перспективным в том числе для контроля качества биотехнологий, характерных для фармацевтики.

Исследования, проведенные в радиодиапазоне, выполнены методами спектрального анализа отклика на внешнее воздействие в виде направленного монохроматического плоского электромагнитного поля малой мощности. Внешнее электромагнитное воздействие оказывалось посредством направленной рупорной антенны на исследуемый образец (или контроли), размещенные в чашке Петри на расстоянии порядка 0,5 м [1-2]. Анализ отклика осуществлялся за счет измерений плотности потока мощности переизлученного сигнала с помощью измерителя уровня электромагнитного излучения TES-92 [3], а также анализатора спектра реального времени RiGOL RSA 5000 [4]. В качестве источника электромагнитного излучения для воздействия на экспериментальный образец использовался высокостабильный генератор Keysight E8257D ser. PSG opt. 540 [5].

Измерительный эксперимент проводился в подземной безэховой камере [6] с затуханием внешних источников электромагнитного излучения более 50 дБ в диапазоне 100 Гц – 5 ГГц. Измерения производились при температуре исследуемого образца 37 град. С. Оценка интенсивности переизлученного внешнего воздействия регистрировалась по показаниям прибора TES-92 в интервале 700 МГц – 2.5 ГГц за счет усреднения последовательности из 10 измерений для каждого типа, исследуемого экспериментального образца, а также анализатором спектра RiGOL RSA 5000 [4], вход которого был соединен с направленной широкополосной антенной.

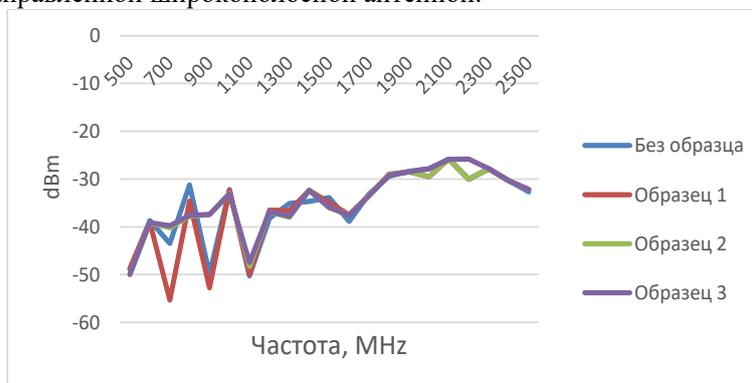


Рис. 1 Результаты измерений интенсивности переизлученного внешнего воздействия

На спектральной кривой (рис. 1) получены характерные резонансные максимумы на частотах вблизи 900 МГц – 1100 МГц, а также ряд менее выраженных полос, которые формируются как свойствами самого исследуемого образца, так и конфигурацией

оборудования измерительного стенда. Основные отличия технологически обработанных образцов зарегистрированы на частотах более 1500 МГц и представлены последовательностью резонансных пиков существенно меньшей интенсивности. Для исследования амплитудных свойств исследуемых образцов мощность генератора для наиболее характерных частот изменялась в интервале от -20 dBm до 15 dBm. Наиболее оптимальная мощность внешнего воздействия составила порядка 0,1 dBm, когда регистрация переизлученного сигнала оказывается возможна обоими типами используемого оборудования.

Полученные результаты свидетельствуют о наличии влияния технологически обработанного раствора антителей, приготовленного по технологии СВР на радиофизические свойства лактозы в диапазоне радиоволн 700-2500 МГц.

В тоже время концентрационная разница между образцами оценивалась методами комбинационного рассеяния (Рис. 2).

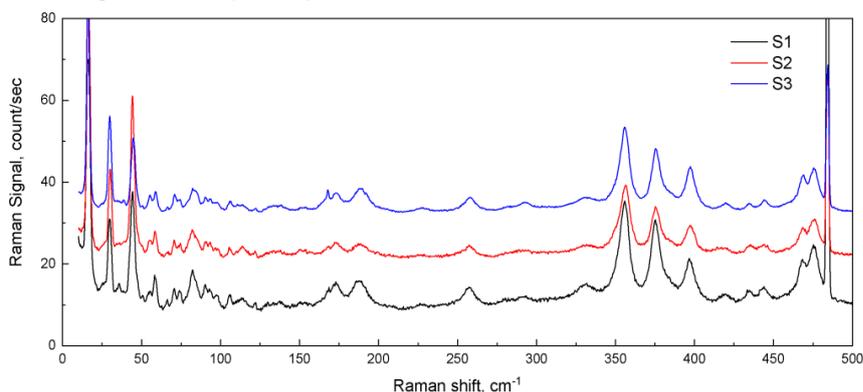


Рис. 2. Спектры образцов, полученные методами комбинационного рассеяния (КРС)

Измерения производились с использованием оборудования Horiba Jobin-Yvon T6400, аналогичного [7]. Эксперименты показали, что в целом образцы являются химически идентичными материалами. Однако для КРС используется малый объем, с которого снимается оптический сигнал — диаметр лазерного пучка около 2 мкм. Если материал не однороден, как в данном случае, то нужна более серьезная статистическая выборка.

Список литературы

1. G.O. Stepanov, V.S. Boriskin, N.N. Rodionova, et.al. The effect of aqueous solutions processed using gradual technology on the emission of a carbohydrate (lactose) in the rf range // *Phys. Wave Phenom.*, vol. 32(1), pp. 43-47, 2024.
2. А.В. Минаков, Д.Ю. Черников, Исследование роли водных растворов технологически обработанных антителей в изменении радиофизических свойств лактозы // В кн.: *Физика водных растворов. Тез. докладов 6-й всероссийской конференции.* Москва, с. 67, 2023.
3. TES Electrical Electronic Corp. URL: https://www.tes.com.tw/en/product_detail.asp?seq=300 (дата обращения: 29.09.2023)
4. Rigol Technologies, Inc. URL: <https://www.rigolna.com/products/spectrum-analyzers/rsa5000/> (дата обращения: 29.09.2023)
5. Keysight Technologies, URL: <https://dipaul.ru/upload/iblock/5cb/5cb9d19aa667ec0f84142f3a059dee91.pdf> (дата обращения: 29.09.2023)
6. Безэховая камера <http://svch.sfu-kras.ru/node/13>, (дата обращения: 29.04.2024)
7. A. Krylov, I. Yushina, E. Slyusareva, et.al. Structureal phase transitions in flexible DUT-8(Ni) under high hydrostatic pressure // *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 24, pp. 3788-3798, 2022.

Секция 5

**ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ
В ФОТОНИКЕ**

ОПТИЧЕСКИЙ ВОЛОКОННЫЙ СЕНСОР С ТАКТИЛЬНЫМ ИНТЕЛЛЕКТОМ

А. Д. Иванов^{1*}, М. В. Попов¹, С. В. Власов¹, И. В. Малышев¹, А. А. Симонян¹,
А. Л. Забровский¹, Л. А. Хромых¹, Д. А. Чермошенцев^{1,2}

¹*Российский квантовый центр
121205, Российская Федерация, Москва, Большой бульвар, д. 30, стр. 1
E-mail: Academi@ya.ru

²*Сколковский институт науки и технологий
121205, Российская Федерация, Москва, Большой бульвар, д. 30, стр. 1*

Совместное применение быстрых оптических сенсоров с алгоритмами искусственного интеллекта является перспективным решением для использования в составе роботизированных систем для захвата объектов и тонких манипуляции с ними. В работе предлагается вариант использования гибкого многоканального волоконного сенсора в качестве прототипа искусственной кожи.

Тактильные сенсоры в роботизированных захватах являются перспективным направлением исследований и разработок, так как позволяют получить обратный отклик, необходимый для проведения сложных манипуляций. Информация с тактильных датчиков особенно важна при контакте с новыми неизвестными предметами. Например, использование тактильного сенсора увеличивает вероятность успешного действия при сортировке различных типов предметов [1]. В процессе проектирования робототехнических комплексов выдвигается ряд требований к сенсору. В первую очередь, это высокая скорость отклика и достаточная чувствительность. Для тонких манипуляций может быть необходимо высокое пространственное разрешение, а также гибкость (упругость) области соприкосновения.

Для решения данной проблемы мы предлагаем программно-аппаратный комплекс, основанный на гибком оптическом сенсоре, выполненном из тейперного (конического) волокна. Тейперное волокно представляет собой оптическое волокно с локальным участком сужения диаметра, на котором часть излучения распространяется в оболочке или снаружи волокна [2]. Принцип функционирования сенсоров основан на изменении сигнала пропускания при деформации участка волокна, содержащего тейпер. После изготовления такие волокна встраиваются в гибкую полимерную основу и закрепляются в необходимом месте для осязания частей робота.

В рамках данной работы было проведено численное моделирование оптических и механических свойств датчика в программных пакетах COMSOL и Lumerical. Собрана установка для исследования характеристик прототипа сенсора. На рис. 1 показана схема работы датчика и моделирование оптических потерь при изгибе. Численное моделирование работы сенсора позволило оптимизировать параметры тейперных волокон, что положительно сказалось на характеристике сенсора. Далее был разработан и опробован прототип многоканального сенсора для параллельного двухпальцевого захвата. Прототип был закреплен на коллаборативной роборуке UR5, оборудованной несколькими камерами глубины.

Многоканальная схема сенсора с массивом волокон позволила увеличить диапазон регистрируемых давлений от единиц грамм до нескольких килограмм (на площади 25 мм). Прототип был экспериментально протестирован на задачах удержания предметов и регистрации выскользывания. В сравнении с коммерческим оптическим датчиком DIGIT [3] предлагаемый нами сенсор позволяет напрямую регистрировать давление, невосприимчив к цвету поверхности контактируемого объекта и имеет лучшее временное разрешение.

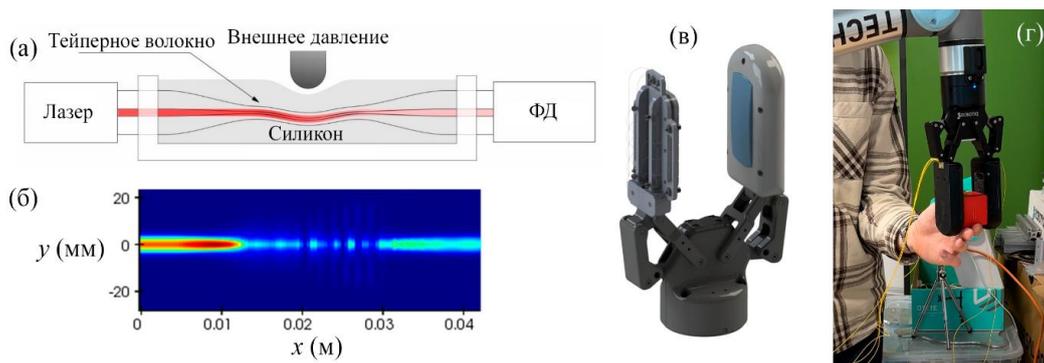


Рис. 1. (а) Принцип работы волоконного датчика. (б) Симуляция прохождения излучения через тейперное волокно. (в) Модель прототипа двухпальцевого захвата, оснащенного сенсором. (г) Экспериментальное исследование сенсора в составе роботизированного комплекса

Помимо аппаратной части, необходимо разработать алгоритм на основе искусственного интеллекта (ИИ) с применением тактильных датчиков. Данные алгоритмы актуальны для решения задач, где объекты и условия среды не стандартизированы. В качестве основы были выбраны алгоритмы Coarse-to-fine q-attention [4] и Perceiver-actor [5]. Важным преимуществом данных алгоритмов является их обучение по демонстрациям, которые собрал человек с помощью робота в процессе выполнения задачи. Эти алгоритмы были доработаны и будут использоваться для построения стратегии движения робота и захвата предметов на основании информации от камер, дополненных новыми тактильными данными. Также при обработке сигналов с сенсора возможно использовать сверточные нейронные сети для восстановления формы пятна контакта по информации от массива таких волокон. Сигнал с датчиков может помочь успешно выполнять операции за счет оценки веса, жесткости и координаты центра масс предметов, формы объектов, шероховатости поверхности, а также регистрации вибраций.

На следующем этапе исследований планируется провести сбор данных о тактильной информации с различных предметов и разработать методологию внедрения ИИ для решения прикладных задач. Дальнейшее обучение моделей с использованием тактильной информации может дать преимущество в тонкой работе с самыми разными объектами и применяться в задачах сортировки, инспекции, сборки и др.

Список литературы

1. Toru Lin, Yu Zhang, Qiyang Li, et.al. Learning Visuotactile Skills with Two Multifingered Hands // arXiv:2404.16823v1, 2024.
2. Limin Tong, et.al. Optical microfibers and nanofibers: A tutorial // Opt. Commun., vol. 285 (23), pp. 4641–4647, 2012.
3. M. Lambeta, et.al. DIGIT: A Novel Design for a Low-Cost Compact High-Resolution Tactile Sensor with Application to In-Hand Manipulation // IEEE Robotics and Automation Letters, vol. 5 (3), pp. 3838–3845, 2020.
4. S. James, K. Wada, T. Laidlow, A. J. Davison Coarse-to-fine q-attention: Efficient learning for visual robotic manipulation via discretization // Computer Vision and Pattern Recognition, pp. 13739–13748, 2022.
5. M. Shridhar, L. Manuelli, D. Fox, Perceiver-Actor: A Multi-Task Transformer for Robotic Manipulation // Proceedings of the 6th Conference on Robot Learning, 28 p., 2022.

ПРИМЕНЕНИЕ ДОМЕННОЙ АДАПТАЦИИ ПРИ ДИАГНОСТИКЕ ИОННОГО СОСТАВА ВОДНЫХ СРЕД С ПОМОЩЬЮ СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА: ПЕРЕХОД ОТ МОДЕЛЬНЫХ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ К РЕЧНЫМ ВОДАМ

К.А. Бузанов^{1*}, О.Э. Сарманова^{1,2}, Т.А. Доленко^{1,2}, С.А. Доленко²

¹*Физический факультет, Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1
E-mail: kirillb270603@gmail.com*

²*Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына, Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1*

Работа посвящена решению задачи определения концентрации 8 ионов Zn^{2+} , Cu^{2+} , Li^+ , Fe^{3+} , Ni^{2+} , NH_4^+ , SO_4^{2-} , NO_3^- по спектрам комбинационного рассеяния (КР) водных растворов в речной воде с использованием нейронных сетей (НС). Применение метода домненной адаптации при обучении НС позволяет расширить базу данных растворов речной воды модельными растворами, приготовленными в дистиллированной воде, благодаря преобразованию спектров к новому виду, где модельные растворы и растворы речной воды неразличимы.

Анализ состава и определение концентрации ионов солей в речных водах является важной задачей во многих областях науки и техники, таких как биология, медицина, экология и другие. Для ее решения требуются дистанционные методы, позволяющие работать в режиме реального времени. В этом смысле спектроскопия КР света, которая позволяет осуществлять быстрый анализ многокомпонентных сред, является прекрасной альтернативой аналитическим методам.

Сложность химического состава и межмолекулярных взаимодействий многокомпонентных водных растворов, к которым относится речная вода, делают анализ спектров КР образцов речной воды невозможным с помощью классических калибровочных методов. В данной работе обратная задача спектроскопии КР по одновременному определению концентраций ионов Zn^{2+} , Cu^{2+} , Li^+ , Fe^{3+} , Ni^{2+} , NH_4^+ , SO_4^{2-} , NO_3^- в речной воде была решена с помощью НС. На первом этапе работы задача была решена с помощью набора спектров КР света модельными растворами с различными концентрациями и соотношением неорганических солей $Zn(NO_3)_2$, $ZnSO_4$, $Cu(NO_3)_2$, $CuSO_4$, $LiNO_3$, $Fe(NO_3)_3$, $NiSO_4$, $Ni(NO_3)_2$, $(NH_4)_2SO_4$, $NH_4(NO_3)$. Для этого экспериментально были приготовлены 3744 модельных раствора в дистиллированной воде и получены их спектры КР. Концентрация катионов в растворах варьировалась в диапазоне от 0 до 1 М.

Далее в работе была предпринята попытка на данных спектроскопии КР света речной водой и модельными растворами неорганических солей с помощью метода домненной адаптации обучить НС решать обратную задачу оптической спектроскопии по определению концентраций указанных выше ионов в речной воде. Для этого экспериментально были приготовлены 1000 растворов в речной воде из четырех рек (Москва-реки, Битцы, Сетунь и Яузы) с различными концентрациями и соотношением неорганических солей и получены их спектры КР (рис. 1).

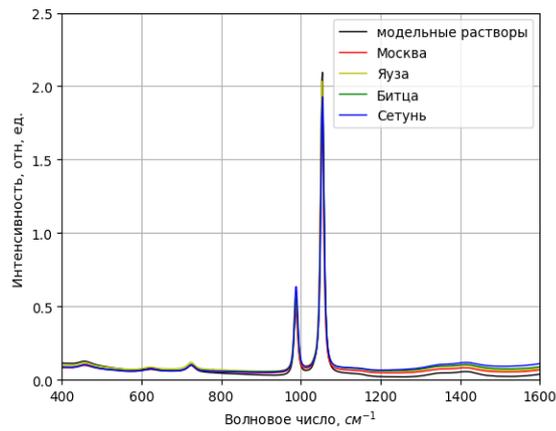


Рис 1. Спектры КР света модельными растворами и растворами, приготовленными на основе воды из рек.

В работе проведён сравнительный анализ качества решения поставленной обратной задачи с помощью НС, обученных лишь на модельных растворах, и с помощью НС, обученных на модельных и речных растворах с применением доменной адаптации.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-11-00266, <https://rscf.ru/project/24-11-00266/>

Список литературы

1. Y. Ganin, et. al. Domain-adversarial training of neural networks // JMLR., vol.17, pp. 1-35, 2016.

РАЗРАБОТКА МУЛЬТИМОДАЛЬНОГО ЛЮМИНЕСЦЕНТНОГО УГЛЕРОДНОГО НАНОСЕНСОРА ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ С ПРИВЛЕЧЕНИЕМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Г. Н. Чугреева^{1*}, К. А. Лаптинский², Т. А. Доленко¹

¹Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Физический факультет
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1с2

*E-mail: chugreeva.gn17@physics.msu.ru

²Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,
НИИЯФ им.Д.В.Скобельцына
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1с2

В работе представлены результаты применения нейронных сетей со сверточной архитектурой для разработки мультимодального фотолюминесцентного наносенсора на основе УТ для решения обратной задачи фотолюминесцентной спектроскопии. Показано, что с помощью 2D-сверточных нейронных сетей по матрицам возбуждения-испускания фотолюминесценции УТ можно одновременно определять концентрации катионов тяжелых металлов Cu^{2+} , Ni^{2+} , Co^{2+} , Al^{3+} , Cr^{3+} и аниона NO_3^- в водных растворах со средней абсолютной ошибкой 0.80 мМ, 0.86 мМ, 0.76 мМ, 0.67 мМ, 0.16 мМ и 1.64 мМ, соответственно. Полученные погрешности удовлетворяют потребностям мониторинга состава технологических и производственных вод.

Углеродные точки (УТ) – наночастицы, обладающие стабильной интенсивной фотолюминесценцией (ФЛ), чрезвычайно чувствительной к условиям синтеза и к изменениям параметров окружения наночастиц [1]. Такое сочетание свойств УТ открывает широкие перспективы для использования УТ в качестве оптических наносенсоров жидких сред [2, 3]. Во всех известных нам работах УТ рассматривались как наносенсоры, максимум, 1-2 параметров среды. В то же время на практике, например, в задачах биомедицины или при контроле состава технологических вод, необходимо с высокой точностью контролировать одновременно несколько параметров окружающей среды, то есть решать многопараметрическую обратную задачу.

В настоящей работе предложен подход к созданию оптического мультимодального наносенсора на основе УТ для одновременного измерения концентрации ионов тяжелых металлов Cu^{2+} , Ni^{2+} , Co^{2+} , Al^{3+} , Cr^{3+} и аниона NO_3^- в водных средах с помощью сверточных нейронных сетей (СНС).

УТ были синтезированы методом гидротермального синтеза из этилендиамина и лимонной кислоты. Экспериментально было установлено, что синтезированные наночастицы обладают интенсивной стабильной ФЛ, чувствительной к изменению концентраций ионов тяжелых металлов Cu^{2+} , Ni^{2+} , Co^{2+} , Al^{3+} , Cr^{3+} в водных растворах.

Были приготовлены водные смеси-растворы 3125 образцов, содержащих УТ с фиксированной концентрацией 5 мг/л и катионы металлов Ni^{2+} , Cu^{2+} , Co^{2+} , Al^{3+} , Cr^{3+} с варьируемой концентрацией от 0 до 6 мМ с шагом по концентрации 1.5 мМ. Концентрация анионов NO_3^- непосредственно зависела от концентрации катионов и изменялась в диапазоне от 0 до 72 мМ.

Были получены матрицы возбуждения-испускания ФЛ всех приготовленных растворов УТ и ионов. Спектры ФЛ растворов регистрировались с помощью спектрофлуориметра Shimadzu RF-6000. Возбуждение сигнала ФЛ образцов осуществлялось излучением на 27 длинах волн: от 280 до 410 нм с шагом 5 нм. Спектры регистрировались в спектральном диапазоне от 375 до 575 нм с шагом 1 нм. Таким образом, спектр ФЛ каждого раствора УТ при возбуждении на одной длине волны содержал 500 признаков. Примеры, подаваемые на вход нейронной сети, представляли собой тензор [1x27x201], в котором на первом месте стоит количество каналов, а на втором - пространственные размеры изображения-матрицы (количество длин волн возбуждения и количество признаков ФЛ).

Для тренировки ИНС, предотвращения их переобучения и оценки результатов работы алгоритмов исходный набор данных был случайным образом разбит на трениро-

вочный, валидационный и тестовый наборы в соотношении 70:20:10, соответственно. Тренировочный набор использовался непосредственно для обучения моделей; валидационный набор - для обеспечения своевременной остановки обучения (обучение останавливалось, если среднеквадратичная ошибка на валидационном наборе не уменьшалась в течение 100 эпох); тестовый набор - для проверки качества обученных моделей на независимых данных. Спектральные данные в наборах не пересекались.

При выборе архитектуры ИНС для решения поставленной задачи учитывалось, что входные примеры представляют собой матрицы возбуждения-испускания ФЛ. В таких матрицах интенсивности ФЛ в соседних спектральных каналах существенно коррелируют. Поэтому были выбраны двумерные сверточные нейронные сети 2D-СНС, которые хорошо зарекомендовали себя при обработке данных с упорядоченными коррелированными признаками (например, изображениями) [4].

Применение нейронных сетей со сверточной архитектурой (рис. 1а) к полученному набору экспериментальных данных обеспечило средние абсолютные ошибки (MAE) определения концентрации ионов Ni^{2+} , Cu^{2+} , Co^{2+} , Al^{3+} , Cr^{3+} и NO_3^- 0.93 ± 0.08 мМ, 0.82 ± 0.04 мМ, 0.81 ± 0.06 мМ, 0.70 ± 0.05 мМ, 0.24 ± 0.04 мМ, 1.84 ± 0.08 мМ. Средние относительные ошибки определения концентрации ионов Ni^{2+} , Cu^{2+} , Co^{2+} , Al^{3+} , Cr^{3+} и NO_3^- составили 15.5%, 13.7 %, 13.5%, 11.7 %, 4.0% и 2.6%, соответственно (рис. 1б). Полученные погрешности удовлетворяют потребностям мониторинга состава технологических и производственных вод.

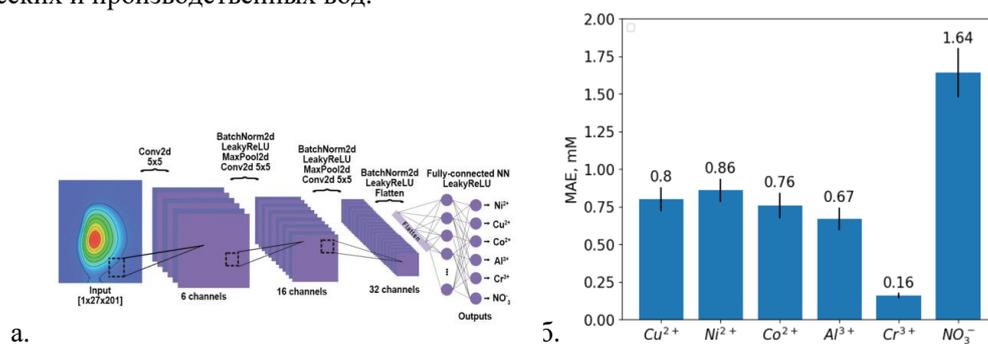


Рис. 1. а. Схема использованной нейронной сети. б. Средняя абсолютная ошибка определения (MAE) концентрации ионов

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 22-12-00138, <https://rscf.ru/project/22-12-00138/>.

Список литературы

1. A.M. Vervald, K.A. Laptinskiy, G.N. Chugreeva, S.A. Burikov, T.A. Dolenko. Quenching of Photoluminescence of Carbon Dots by Metal Cations in Water: Estimation of Contributions of Different Mechanisms // J. Phys. Chem. C, vol. 127, pp. 21617-21628, 2023.
2. Y. Guo, Z. Wang, H. Shao. Hydrothermal synthesis of highly fluorescent carbon nanoparticles from sodium citrate and their use for the detection of mercury ions// Carbon, vol. 52, pp. 583–589, 2013.
3. S. Liu, J. Tian, L. Wang. A general strategy for the production of photoluminescent carbon nitride dots from organic amines and their application as novel peroxidase-like catalysts for colorimetric detection of H_2O_2 and glucose // RSC Adv, vol. 2, pp. 411-413, 2012.
4. Haykin, S. S, Horton, M. J., Dworkin, A., Mars, D., Disanno, S., Dulles, G. Neural networks and learning machines. New Jersey: Pearson. 2009.

МЕТОДЫ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ АНАЛИЗА СПЕКТРОВ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСОВ

С.Д. Казанина^{1*}, Е. А. Слюсарева¹, М. С. Молокеев^{1,2}, А. С. Крылов²

¹Сибирский федеральный университет

660074, Российская Федерация, Красноярск, ул. Киренского, д. 28

²Институт Физики им. Л.В. Киренского СО РАН

660036, Российская Федерация, Красноярск, ул. Академгородок, 50, д. 38

*E-mail: sonyakaznaneena@gmail.com

Исследование посвящено металлоорганическим каркасам (МОК) и применению метода КРС для анализа их структуры. Анализ спектров кристалла DUT-8(Ni) проводился методами машинного обучения (МО) случайный лес и неотрицательного матричного разложения (НМР). Результаты машинного обучения позволяют определить важные параметры в спектрах DUT-8(Ni).

Металлоорганические каркасы (МОК) представляют собой упорядоченные синтетические структуры, которые обладают высокой пористостью, пластичностью и устойчивостью к высоким температурам. Эти свойства делают их перспективными для использования в области катализа, электрохимии и других технологий. Непрерывное изучение структуры МОК, включая механизмы перехода из открытых пор в закрытые поры, является предметом постоянных исследований. Для изучения МОК широко применяется метод комбинационного рассеяния света (КРС).

Спектры комбинационного рассеяния света (КРС) могут содержать множество перекрывающихся пиков, чья амплитуда зависит от поляризации измерения и ориентации кристалла. Интерпретация спектров КРС затруднена из-за этой неоднозначности и большого объема данных. Поэтому для анализа экспериментальных данных спектров КРС МОК все чаще используют методы машинного обучения.

Целью данной работы является оценка возможности использования методов машинного обучения для решения задачи классификации фазы металл - органических каркасов по спектрам КРС в области «отпечатков пальцев».

В работе использовались 80 спектров КРС, полученные для различных поляризационных схем измерения и различных ориентаций кристалла DUT-8(Ni) [1,2]. Особенностью этого МОК является возможность управляемо переходить из открытой фазы (ОР) в закрытую (СР), сохраняя неизменным свой химический состав. Спектры КРС специфичны к фазе МОК (представлено на рисунке) и эта специфичность наиболее ярко проявляется в низкочастотной, до 150 см^{-1} области.

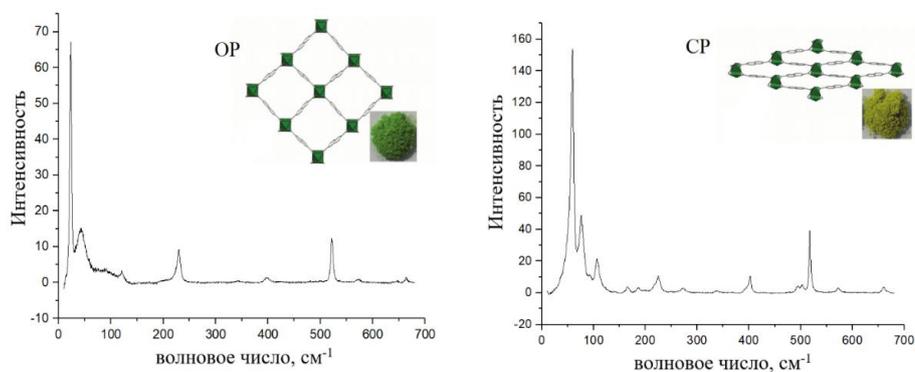


Рис. 1. Спектр комбинационного рассеяния DUT-8(Ni), слева – открытая фаза, справа – закрытая фаза [3]

Мы применяем методы машинного обучения, такие как случайный лес и НМР для решения задачи бинарной классификации, где ОР – 0, СР – 1. Для модели случайного леса было использовано два вида предобработки данных: метод глубокой и средней сложности предобработки данных. Для модели НМР метод лёгкой сложности предобработки данных. Для построения модели «случайный лес» использовали библиотеку Python scikit-learn. Обучение проводилось на 70% данных, и тестировалось на 30% данных.

В методе глубокой предобработки данных было выявлено 16 пиков у закрытой фазы и 11 пиков у открытой. На основе этих параметров была построена модель машинного обучения для выявления значимых параметров DUT-8(Ni).

В методе средней сложности предобработки данные для модели нормировались, при этом не выявлялись пики, как в случае с методом глубокой предобработки, а модели давался вся длина спектра от 150 см^{-1} .

В методе лёгкой сложности предобработки данные не нормировались. Параметром данной модели НМР является количество компонент разложения исходного массива данных. Анализ зависимости точности модели от количества компонент дал количество компонент равное 2, дальнейшее увеличение компонент приводил к уменьшению точности модели.

Для каждого метода МО была рассчитана точность, она представлена в таблице 1. Модель МО является эффективной, если точность метода МО больше точности базовой модели (53,76 %).

Таблица 1

Сравнительный анализ эффективности методов МО

Методы:	Точность метода	Трудоёмкость подготовки данных	Дополнительная физическая информация
Случайный лес. Метод глубокой предобработки данных Важность 20%	0,94	очень высокая	Определение характеристичных частот колебаний, возможность их соотнесения с типами колебаний, независимость от экспериментальной установки
Случайный лес. Метод средней сложности предобработки данных	0,79	средняя	Данные привязаны к экспериментальной установке, частично коррелируют с характеристичными частотами
Метод НМР. Метод лёгкой сложности предобработки данных	0,24	низкая	Базисные спектры напрямую не связаны с частотами и типами колебаний

Для широкого практического применения важна спектральная область «отпечатков пальцев», наиболее доступная для экспериментаторов, а именно от 150 см^{-1} . Данные результаты машинного обучения могут быть использованы для определения фазы каркасов и изучения структурных переходов в кристаллах DUT – 8(Ni), а использованные подходы могут быть обобщены на случай широкого класса подобных задач спектроскопии и материаловедения.

Список литературы

1. A. Krylov, A. Vtyurin, P. Petkov, et.al. Raman spectroscopy studies of the terahertz vibrational modes of a DUT-8 (Ni) metal–organic framework // *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 19, pp. 32099-32104, 2017.
2. A. Krylov, A. Vtyurin, P. Petkov, et.al. Raman spectroscopy studies of the terahertz vibrational modes of a DUT-8 (Ni) metal–organic framework // *Phys.Chem.Chem.Phys.*, vol. 19, pp. 32099–32104, 2017.
3. V. Bon, N. Klein, I. Senkovska, et.al. Exceptional adsorption-induced cluster and network deformation in the flexible metal-organic framework DUT-8(Ni) observed by in situ X-ray diffraction and EXAFS // *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 26, pp. 17471-17479, 2015.
4. A. Krylov, I. Yushina, E. Slyusareva, et.al. Structural phase transitions in flexible DUT-8(Ni) under high hydrostatic pressure // *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 26, pp. 1-15, 2022.

ГЕНЕРАТИВНО-СОСТЯЗАТЕЛЬНАЯ НЕЙРОННАЯ СЕТЬ ДЛЯ РЕКОНСТРУКЦИИ ОБЪЕКТОВ С ГОЛОГРАММ ОБЪЕМНЫХ СЦЕН

С. А. Кирий*, А. С. Свистунов, Д. А. Рымов, А. В. Шифрина, П. А. Черёмхин

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»

115409, г. Москва, Каширское шоссе, д. 31

**E-mail: semakiriy@kiraksa.ru*

Для восстановления изображений с голограмм 3D-сцен предложен, реализован и применен метод на основе генеративно-сопоставительной нейросети, включающей в себя сеть-генератор, который производит восстановление изображений с голограмм, и сеть-дискриминатор, оценивающий качество полученного изображения. Проведена оценка качества восстановленных изображений.

Применение нейронных сетей для задач голографии является перспективным направлением [1]. Например, такой подход может позволить избежать появления нежелательных порядков дифракции при восстановлении изображений [2] в силу обучения модели на исходных изображениях объектов, что позволяет выделить из голограммы только требуемую информацию без использования дополнительной фильтрации.

В работе проведено исследование возможностей восстановления изображений с голограмм с применением генеративно-сопоставительной нейросети (ГСН), состоящей из сети-генератора с архитектурой U-Net [3] и сети-дискриминатора. ГСН представляет из себя одновременное сочетание двух нейронных сетей, одна из которых производит восстановление изображений с голограмм (сеть-генератор), а вторая оценивает качество полученных результатов (сеть-дискриминатор) [4]. Таким образом происходит взаимодействие двух нейросетей, что может способствовать более тщательному обучению сети-генератора и, как следствие, более высокому качеству восстановлению изображений. На (рис. 1) представлены примеры оригинальных изображений (а) и восстановленных при помощи обученных моделей U-Net (б) и ГСН (в) с экспериментально зарегистрированных цифровых голограмм. По численным метрикам предложенный метод также показал хорошие результаты: индекс структурного сходства равен 0,83, коэффициент корреляции равен 0,99.

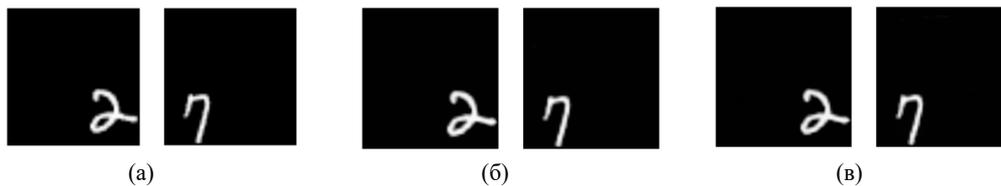


Рис. 1. Примеры оригинальных изображений (а), реконструкций с помощью U-Net, реконструкций с помощью ГСН (в)

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (РНФ), грант № 22-79-10340.

Список литературы

1. G. Situ Deep holography // Light: Advanced Manufacturing, vol. 3, pp. 278–300, 2022.
2. S.A. Kiriy D.A. Rymov, A.S. Svistunov, et.al. Generative adversarial neural network for 3D-hologram reconstruction // Laser Physics Letters, vol. 21. p. 045201, 2024.
3. O. Ronneberger, P. Fischer, T. Brox U-Net: Convolutional Networks for Biomedical Image Segmentation // MICCAI. vol. 9351. pp. 234-241, 2015.
4. A. Khan, Z. Zhijiang, Y. Yu, et al. GAN-Holo: Generative Adversarial Networks-Based Generated Holography Using Deep Learning // Complexity, vol. 2021, p. 6662161, 2021.

АРХИТЕКТУРА СВЕРТОЧНОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ДЛЯ ЗАДАЧИ ДИАГНОСТИКИ НОВООБРАЗОВАНИЙ КОЖИ

А. И. Комлев*, И. А. Матвеева

*Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева
443086, Российская Федерация, Самара, ул. Московское шоссе, д. 34*

*E-mail: andrei.komlev@yandex.ru

Работа посвящена анализу дерматоскопических изображений новообразований кожи с помощью искусственного интеллекта. Разработана архитектура сверточной нейронной сети для классификации новообразований кожи по нозологиям. Представленная нейронная сеть обучена на наборе данных общим объемом 4100 изображений. В результате обучения достигнута точность классификации выше 90%. Это позволяет говорить о возможном эффективном применении сверточных нейронных сетей в системах помощи принятия решений в области дерматологии и онкологии.

Распространение нейронных сетей для анализа медицинских данных носит повсеместный характер. В некоторых сферах деятельности человека внедрение технологий искусственного интеллекта проходит довольно быстро и легко. Однако сфера медицины в этом плане очень осторожна. Новые медицинские приборы, методы и лекарства проходят десятки тестов и годы экспериментальных исследований. Тем не менее, актуальность применения технологий искусственного интеллекта в медицине в системах помощи принятия решений не оспорима. Одной из областей медицины, где применимы технологии искусственного интеллекта, является дерматология. Кожа – это удобный объект для оптической диагностики различными методами, например, рамановской спектроскопии, гиперспектральной диагностики или дерматоскопии [1, 2, 3, 4].

Дерматоскопия – это оптический неинвазивный способ обследования поверхности кожи под увеличением, позволяющий врачу выделить морфологические особенности заболевания и поставить диагноз на основе анализа этих особенностей. Недостатком дерматоскопического исследования является сложность интерпретации морфологических признаков. Так, например, точность диагностики злокачественной меланомы кожи врачом общего профиля составляет около 40% [5]. Требование высокой квалификации врача приводит к тому, что качественный и детальный анализ морфологии новообразования может проводить только квалифицированный врач-онколог с многолетним опытом. Целью работы является разработка архитектуры сверточной нейронной сети для классификации новообразований кожи, которая могла бы использоваться в составе программного обеспечения цифрового дерматоскопа, разработанного ранее [6].

Разработка архитектуры проводилась на языке программирования Python. Основным требованием к архитектуре стало малое количество обучающих параметров. Это связано с необходимостью использовать большие объемы данных для обучения нейронных сетей, причем большее количество обучаемых параметров зачастую требует больших объемов обучающих данных. Однако формирование больших наборов медицинских данных затруднено, так как ряд заболеваний встречается редко, а регистрация дерматоскопических изображений проводилась на базе одного медицинского учреждения – Самарского областного клинического онкологического диспансера [4].

Архитектура сверточной нейронной сети, предлагаемая в данном исследовании, представлена на рис. 1, а. Она состоит из трех чередующихся блоков слоев Conv2D, Max_Pooling2D и Batch_Normalization и нескольких полносвязных слоев на выходе. Общее количество обучаемых параметров равно 815 281. Для обучения представленной архитектуры нейронной сети использован набор черно-белых изображений, полученный с помощью гиперспектральной камеры на 41 различной длине волны [7]: 50 образцов злокачественной меланомы и 50 образцов пигментного невуса. Весь набор данных был разделен на обучающую и валидационную выборки в соотношении 80/20. Графики динамики обучения нейронной сети (рис. 1, б-в) показывают постепенное увеличение

точности и уменьшение ошибки классификации как для обучающей, так и для валидационной выборки. Обучение было остановлено после 50 эпох. При этом точность классификации для обучающей и валидационной выборок составила 92 и 95%, соответственно, а потери для обоих выборок снизились до уровня менее 0,2.

Model: "Test_Neural_Derm"

Layer (type)	Output Shape	Param #
conv2d_97 (Conv2D)	(None, 480, 640, 8)	80
max_pooling2d_7 (MaxPooling2D)	(None, 160, 213, 8)	0
batch_normalization_97 (BatchNormalization)	(None, 160, 213, 8)	32
conv2d_98 (Conv2D)	(None, 160, 213, 16)	1,168
max_pooling2d_8 (MaxPooling2D)	(None, 53, 71, 16)	0
batch_normalization_98 (BatchNormalization)	(None, 53, 71, 16)	64
conv2d_99 (Conv2D)	(None, 53, 71, 32)	4,640
max_pooling2d_9 (MaxPooling2D)	(None, 17, 23, 32)	0
batch_normalization_99 (BatchNormalization)	(None, 17, 23, 32)	128
flatten_1 (Flatten)	(None, 12512)	0
dense_one (Dense)	(None, 64)	800,832
dropout_one (Dropout)	(None, 64)	0
dense_two (Dense)	(None, 128)	8,320
dropout_two (Dropout)	(None, 128)	0
output (Dense)	(None, 1)	129

Total params: 815,393 (3.11 MB)
 Trainable params: 815,281 (3.11 MB)
 Non-trainable params: 112 (440 B)

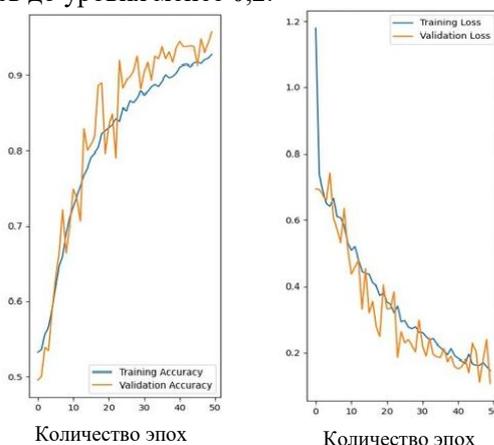


Рис. 1. а) Архитектура нейронной сети дерматоскопического комплекса; б) График зависимости точности обучения от количества эпох для обучающей (Training Accuracy) и валидационной выборок (Validation Accuracy); в) График зависимости ошибки обучения от количества эпох для обучающей (Training Loss) и валидационной выборок (Validation Loss)

Судя по виду графиков (рис. 1, б-в), нейронная сеть обладает потенциалом для дальнейшего обучения. Этому, а также расширению выборки данных, и будут посвящены дальнейшие исследования. Автоматизация процесса распознавания новообразований кожи по дерматоскопическим изображениям делает нейронные сети претендентом на широкое использование в системах контроля принятия решения.

Список литературы

1. M. Wu, B. Gao, X. Wei. Recent advances in Raman spectroscopy for skin diagnosis // *Journal of Innovative Optical Health Sciences*, vol. 16 (03), pp. 2330003, 2023.
2. B. V. Grechkin, V. O. Vinokurov, Y. A. Khristoforova, I. A. Matveeva. VGG convolutional neural network classification of hyperspectral images of skin neoplasms // *J-BPE*, vol. 9 (4), pp. 040304, 2023.
3. H. A. Haenssle, C. Fink, R. Schneiderbauer, et.al. Man against machine: diagnostic performance of a deep learning convolutional neural network for dermoscopic melanoma recognition in comparison to 58 dermatologists // *Ann. Oncol.*, vol. 29 (8), pp. 1836-1842, 2018.
4. В. А. Дерюгина, И. А. Матвеева. Сверточные нейронные сети для задачи классификации дерматоскопических изображений // Всероссийская научно-техническая конференция «Актуальные проблемы радиоэлектроники и телекоммуникаций», с. 142-144, 2023.
5. M. Ulrich, S., Lange-Asschenfeldt, S., González. In vivo reflectance confocal microscopy for early diagnosis of nonmelanoma skin cancer // *Actas Dermo-Sifiliográficas (English Edition)*, vol. 103 (9), pp. 784-789, 2012.
6. А.И. Комлев, И.А. Матвеева. Разработка мультиспектральной подсветки для цифрового дерматоскопа // *Оптические методы исследования потоков: Труды XVII Международной научно-технической конференции*, с. 208-212, 2023.
7. S. G. Konovalov, O. A. Melsitov, O. O. Myakinin, et.al. Dermatology software tool for in vivo automatic malignant lesions detection // *J-BPE*, vol. 4 (4), pp. 040302, 2018.

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ДИФРАКЦИОННОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ, ИЗГОТОВЛИВАЕМОЙ МЕТОДОМ ДВУХФОТОННОЙ ЛАЗЕРНОЙ ЛИТОГРАФИИ

А. В. Коновалова*, А. А. Попкова, Д. И. Печкурова, Т. Г. Балуюн, А. А. Федянин

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1
E-mail: konovalova.av18@physics.msu.ru

Активное развитие нейронных сетей сопряжено с возрастающей потребностью в вычислительных ресурсах. Одним из перспективных направлений развития может стать применение фотонных технологий для повышения энергоэффективности и скорости вычислений. В работе демонстрируется возможность изготовления фазовых масок для дифракционной нейронной сети в пространстве Фурье при помощи двухфотонной лазерной литографии, а также описаны применяемые методы оптимизации компьютерной модели сети.

Нейроморфная фотоника в настоящее время набирает популярность в качестве потенциальной альтернативы электронным процессорам в области решения задач машинного обучения. Фотоника обладает рядом преимуществ перед электроникой, такими как малые тепловые потери, высокое быстродействие и пропускная способность, простота реализации параллельных вычислений за счёт использования различных степеней свободы, присущих световому сигналу (длина волны, поляризация, мода). Использование фотонных технологий для построения оптических нейронных сетей может способствовать как ускорению и улучшению энергоэффективности вычислений по сравнению с современными процессорами, так и построению более естественных нейросетевых архитектур, принципиально отличающихся от классической архитектуры фон Неймана.

Одной из распространенных архитектур оптических нейроморфных систем является дифракционная нейронная сеть [1]. Такая архитектура представляется перспективной для использования в матричных вычислениях и при полностью оптической обработке изображений. В роли слоев в дифракционной нейронной сети выступают амплитудные и/или фазовые маски, параметры которых служат синаптическими весами, определяемыми в ходе обучения модели сети на компьютере.

В данной работе исследуется нейронная сеть, работающая в пространстве Фурье [2] и решающая задачу классификации в видимом спектральном диапазоне. Для модуляции сигнала в сети используются фазовые маски, изготовленные при помощи двухфотонной лазерной литографии — метода, зарекомендовавшего себя для изготовления фотонных устройств, в том числе оптического линейного перцептрона [3]. Рассматривается вопрос оптимизации выбора макропараметров дифракционной сети, а также приемы моделирования, используемые для улучшения качества работы с учетом ограничений, накладываемых методом изготовления фазовых масок.

Исследование поддержано некоммерческим фондом развития науки и образования «Интеллект».

Список литературы

1. X. Lin, Y. Rivenson, N.T. Yardimci, M. Veli, et.al. All-optical machine learning using diffractive deep neural networks // *Science*, vol. 361 (6406), pp. 1004-1008, 2018.
2. T. Yan, J. Wu, T. Zhou, H. Xie, et.al. Fourier-space diffractive deep neural network // *Phys. Rev. Lett.*, vol. 123 (2), p. 023901, 2019.
3. E. Goi, X. Chen, Q. Zhang, et.al. Nanoprinted high-neuron-density optical linear perceptrons performing near-infrared inference on a CMOS chip // *Light Sci. Appl.*, vol. 10 (1), p. 40, 2021.

КОРРЕКЦИЯ АББЕРАЦИЙ В ГОЛОГРАФИЧЕСКОМ ОПТИЧЕСКОМ ПИНЦЕТЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПОЛИНОМОВ ЦЕРНИКЕ

Г. А. Романенко^{1,2*}, А. Ю. Кохановский¹, Н. А. Костина¹, М. С. Вдовиченко¹,
М. П. Петров¹

¹Физико-технический факультет, Университет ИТМО,
197101, Российская Федерация, Санкт-Петербург, ул. Ломоносова, д. 9
*E-mail: gavrill.romanenko@metalab.ifmo.ru

²Институт электроники и телекоммуникаций, СПбГУ Петра Великого
195251, Российская Федерация, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29

В работе представлены результаты коррекции абберации в голографическом оптическом пинцете. При учете полиномов Цернике с применением алгоритмов машинного обучения численно и экспериментально продемонстрирована возможность увеличения коэффициента жесткости оптической ловушки.

В голографическом оптическом пинцете применяются пространственные модуляторы света, которые позволяют управлять пространственной фазой улавливающего излучения для: формирования нескольких оптических ловушек, создания лучей со сложным волновым фронтом, уменьшения аббераций в оптической системе[1]. Абберации в оптической системе возникают из-за отклонения лучей при распространении их через неидеальные оптические элементы. В общем случае коррекция аббераций заключается в формировании пучков с плоским волновым фронтом на выходе из оптической системы. Существует несколько методов для коррекции аббераций в системе путем введения: амплитудных масок, голографических или диффракционных элементов. Диффракционный оптический элемент в виде пространственного модулятора позволяет задавать нужную фазу улавливающего излучения для коррекции всех видов аббераций, которые задаются при помощи полиномов Цернике[2]. Такие полиномы являются ортогональными в единичном круге и вполне подходят для описания аббераций. Метод расчета фазовых масок пространственного модулятора света для коррекции аббераций лазерного излучения актуальна как в лазерной физике, астрономии, офтальмологии, так и в технологии получения изображений с высоким разрешением.

В работе мы численно в программе Optical Tweezers Software и экспериментально на примере захвата гауссовым пучком частицы SiO₂ продемонстрировали увеличение коэффициента жесткости захвата оптической ловушки после коррекции аббераций в оптических элементах. Методами машинного обучения осуществлен подбор весовых коэффициентов полиномов Цернике для увеличения коэффициента жесткости.

Исследование было поддержано Российским научным фондом (проект № 22-42-04420).

Список литературы

1. K. D. Wulff, D. G. Cole, R. L. Clark, R. DiLeonardo, J. Leach, J. Cooper, G. Gibson, and M. J. Padgett Aberration correction in holographic optical tweezers // Optics Express, vol. 14(9), pp. 4169-4174, 2006.
2. Kuo Niu and Chao Tian Zernike polynomials and their applications // Nanophotonics, J. Opt., vol. 24(12), 123001, 2022.

РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА АНАЛИЗА ИЗОБРАЖЕНИЙ МОЛЕКУЛЯРНО-ГО МЕТАБОЛИЧЕСКОГО ИМИДЖИНГА FLIM НА ОСНОВЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

И.Д. Щечкин^{1,2}, С.А. Родимова¹, Н.В. Бобров^{1,3}, А.М. Можеров¹,
Д.С. Кузнецова¹

¹ФГБОУ ВО «Приволжский исследовательский медицинский университет» Минздрава России, Нижний Новгород, площадь Минина и Пожарского, 10/1

²ННГУ им. Лобачевского, Россия, Нижний Новгород, проспект Гагарина, 23

³ФБУЗ «Приволжский окружной медицинский центр» ФМБА России, Россия, Нижний Новгород, Нижний Новгород, ул. Маршала Воронова, 20а

Флуоресцентная время-разрешенная микроскопия FLIM позволяет анализировать метаболические изменения в клетках на основе времени жизни эндогенных флуорофоров. Данный метод исследования может быть использован в масштабных биомедицинских исследованиях, а также для интраоперационной оценки метаболического статуса. Обработка результатов FLIM связана с человеческим фактором и компетенциями исследователя, в связи с этим перспективным направлением выглядит разработка независимого стабильного метода, способного с высокой точностью воспроизводить результаты на основе методов машинного обучения. Разработанный алгоритм показал себя более точным, относительно ручного варианта обработки, а также способным обрабатывать большие объемы данных в короткие сроки.

Флуоресцентная время-разрешенная микроскопия FLIM — это метод исследования, основанный на измерении времен жизни флуоресценции внутриклеточных эндогенных флуорофоров, в частности никотинамидадениндинуклеотида НАД(Ф)Н. Для описания времен жизни флуоресценции НАД(Ф)Н используется модель, где параметрам a_1 , a_2 и a_3 соответствуют вклады свободной, связанной и фосфорилированной форм НАД(Ф)Н в общее время жизни флуоресценции, а также их времена t_1 , t_2 , t_3 . Эти параметры связаны с анаэробным гликолизом, окислительным фосфорилированием и синтетической функцией ткани, соответственно. При использовании метода накапливается большое количество изображений, требующих обработки, при этом при ручной обработке существует высокий вклад человеческого фактора. В связи с этим существует потребность в автоматизации и унификации обработки изображений, что возможно с применением нейронных сетей (НС). Целью работы являлась разработка алгоритма автоматического анализа FLIM-изображений на основе сверточных НС.

Было получено 330 FLIM-изображений печени на разных этапах регенеративного процесса при развитии патологии печени. Для изображений в Fiji (ImageJ) были размечены границы клеток и ядер. Изображения аугментировали, таким образом было накоплено 988 изображений. В качестве НС была выбрана архитектура Unet++ с использованием многокомпонентной функции потерь, включающей в себя: BCE, Focal и Dice функции потерь.

Набор изображений был использован для обучения НС для выделения границ клеток ($F1 = 0.77$, $AUC = 0.9$) и для определения ядер ($F1 = 0.65$, $AUC = 0.98$). Также были получены маски интенсивности. Предсказания использовались для проведения Instance сегментации. Полученные ROI использовались для расчета затухания флуоресценции на основе экспоненциально модифицированной гауссовой функции поклеточно. Было показано, что автоматическая обработка сопоставима с вариантом ручной обработки для анализа изменения паттернов, а разбросы результатов анализа для автоматической обработки меньше или равны. Был проведен анализ предсказательной способности перцептрона для кривых затухания флуоресценции, было показано сохранение точности расчетов со значительным увеличением скорости анализа. Также был проведен анализ главных компонент, который показал, что распределение данных параметров аппроксимации кривых затухания можно анализировать с его помощью, сохраняя точность расчетов.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-25-00100).

ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОСЕТЕЙ К ЗАДАЧЕ ПОВЫШЕНИЯ КАЧЕСТВА ВОССТАНОВЛЕННОГО ИЗОБРАЖЕНИЯ С ЦИФРОВЫХ ГОЛОГРАММ, ЗАПИСАННЫХ ПРИ РАЗЛИЧНОЙ СТЕПЕНИ ОСВЕЩЕННОСТИ

А. С. Свистунов*, Д. А. Рымов, Р. С. Стариков, П. А. Черёмхин, Н. Н. Евтихийев

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
115409, Российская Федерация, Москва, Каширское шоссе, д. 31
*E-mail: svistunov.andrey.sergeevich@gmail.com

Применен нейросетевой подход для извлечения информации об объектах с голограмм, записанных в различных условиях, включая освещение. Предложенный метод демонстрирует существенное улучшение качества восстановления амплитуды объектной волны по сравнению с традиционным методом расчёта дифракции.

В разнообразных сферах знаний, включая компьютерную и цифровую голографию [1-2], активно используются нейросетевые методы. Машинное обучение находит применение в таких задачах, как подавление нулевого порядка дифракции в голографии с внеосевой ориентацией [3], восстановление информации о трехмерных сценах на основе осевых голограмм [4] и др.

В данной работе была исследована возможность восстановления информации с цифровых голограмм, записанных в условиях избыточной освещённости.

Был создан обучающий набор данных из 25000 пар голограмма-изображение и тестовый из 5000 пар. В данном наборе данных каждая голограмма, нормированная от 0 до 1, засвечивалась в n раз, где n – случайное число в интервале от 1 до 100. Таким образом, на выходе получалась голограмма с нормированной яркостью от 0 до 1, которая далее приводилась к 8-битному виду и сохранялась на компьютере.

Для реализации была использована архитектура U-Net, на вход которой подавалась засвеченная голограмма, а на выходе было восстановленное изображение. Обучение проходило за 20 эпох, после чего значение функции потерь, которая представляла собой среднеквадратичное отклонение, переставало уменьшаться.

Тестирование проводилось на голограммах, которые были засвечены в 2, 4, 8, 16, 32, 64, 128, 256, 512, 1024 раз. Таким образом, покрывая большой диапазон есть возможность узнать, как о динамике качества восстановления на ранних стадиях засветки, так границу качественной работы нейронной сети. На рис. 1 представлены графики зависимости метрик качества восстановления от степени засветки (рис. 1).

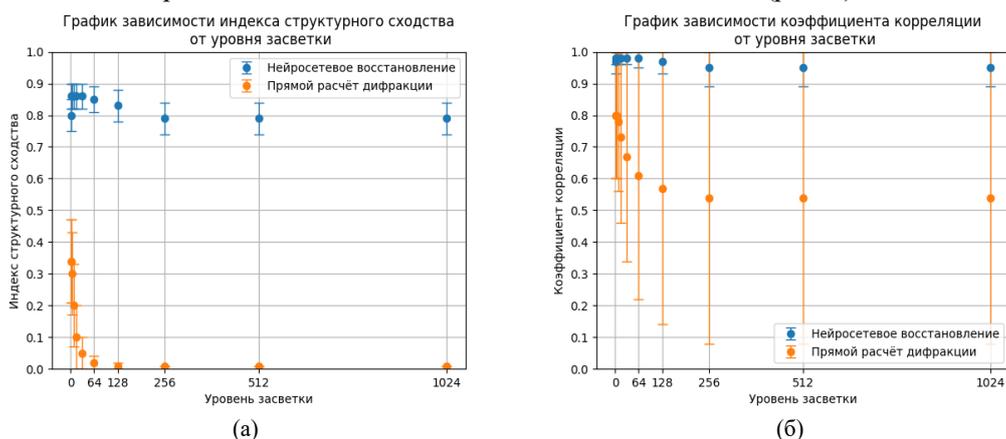


Рис. 1. Графики зависимости ИСС (а) и КК (б) от степени засветки

Из графиков можно сделать вывод, что значения метрик для прямого расчёта дифракции оказываются ниже, чем в случае нейросетевого подхода к восстановлению. Кроме этого качество восстановления методом прямого расчёта дифракции сильно падает при увеличении засветки при том, что качество восстановления с помощью нейро-

сети оказывается более стабильным, согласно графику индекса структурного сходства (ИСС).

Оптимальное качество восстановления наблюдается при засветке в 128 раз. В этом случае голограмма содержит лишь порядка 4 % информативных пикселей. В этом случае при восстановлении с помощью нейросети изображение получается более размытым, чем оригинал, но при этом практически полностью сохраняется форма объекта. При засветке в 1024 раза информативных пикселей остаётся меньше 2 % от общего их числа. В этом случае нейросети удаётся распознать объект и примерно передать его форму (рис. 2).

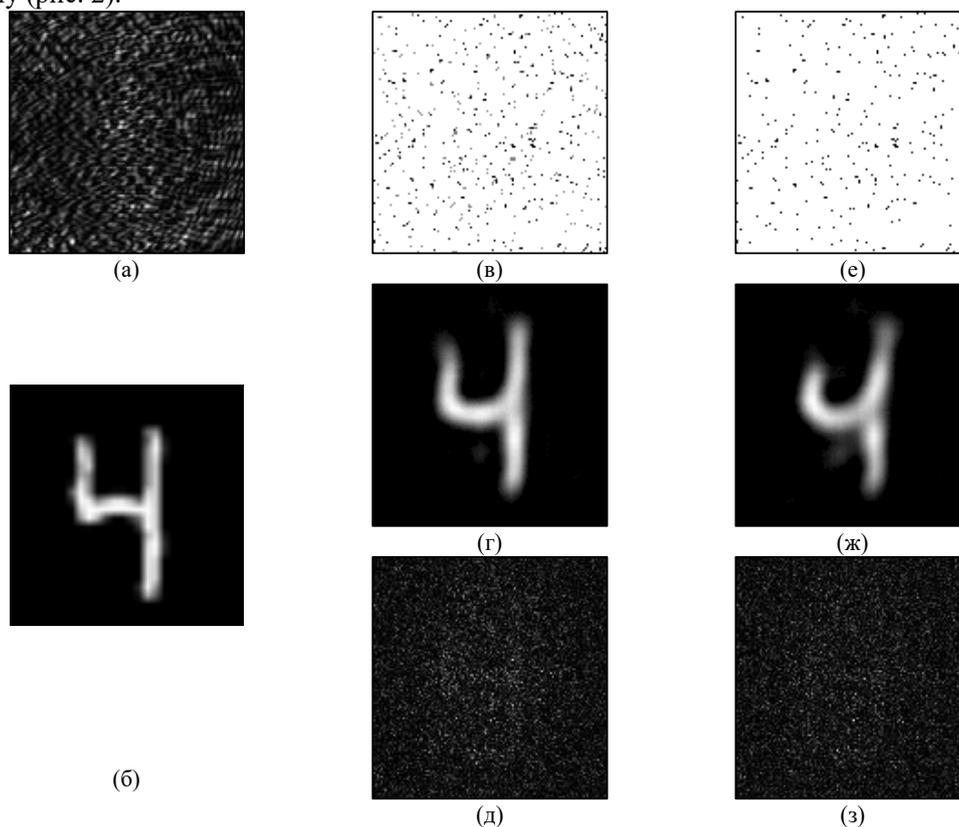


Рис. 2. Результаты экспериментов: а – оригинальная голограмма, б – оригинальное изображение, в, е – голограммы засвеченные в 128 и 1024 раза соответственно, г, д – изображения восстановленные при помощи нейросети и методом прямого расчёта дифракции с голограммы (в), ж, з – изображения восстановленные при помощи нейросети и методом прямого расчёта дифракции с голограммы (е).

Таким образом, для голограмм, засвеченных в 128 раз, удалось получить качество восстановления $0,83 \pm 0,05$ по метрике индекса структурного сходства.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (РНФ), грант № 24-19-00899.

Список литературы

1. G. Situ Deep holography // Light: Advanced Manufacturing. vol. 3. p. 1, 2022.
2. П.А. Черёмхин, Д.А. Рымов, А.С. Свистунов, Е.Ю. Злоказов, Р.С. Стариков Нейросетевые методы в цифровой и компьютерной голографии. Обзор // Оптический журнал. Т. 91. № 3. С. 62-78, 2024.
3. H. Wang, K. Li, X. Jiang, et al. Zero-order term suppression in off-axis holography based on deep learning method // Optics Communications. vol. 537. p. 129264, 2023.
4. A.S. Svistunov et al. HoloForkNet: Digital Hologram Reconstruction via Multibranch Neural Network // Applied Sciences. vol. 13. pp. 6125-6125, 2023.

АНАЛИЗ РАМАНОВСКИХ СПЕКТРОВ КОЖИ С ПОМОЩЬЮ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА

К. Е. Томникова*, И. А. Матвеева

Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева
443086, Российская Федерация, Самара, ул. Московское шоссе, д. 34

*E-mail: ksetomnikova@yandex.ru

Данная работа посвящена проблеме классификации спектров рамановского рассеяния здоровой кожи и кожи с различными заболеваниями, зарегистрированных *in vivo*. В качестве методов классификации используются логистическая регрессия, случайный лес, метод *k*-средних, градиентный бустинг и многослойный перцептрон. Изучены следующие классификационные случаи: здоровая кожа по сравнению с кожей с заболеваниями, доброкачественные новообразования по сравнению со злокачественными новообразованиями, злокачественная меланома по сравнению с пигментным невусом. Обучены и построены классификационные модели для каждого случая. Площадь под ROC-кривой моделей классификации варьируется от 0,59 до 0,91. Результаты исследования показывают возможность применения методов машинного обучения в составе программного обеспечения медицинских систем помощи принятия решений.

Онкологические заболевания кожи остаются одними из самых распространенных заболеваний в мире. Ускорить диагностику и сделать ее безболезненной для пациента возможно с помощью рамановской спектроскопии [1]. Однако не смотря на развитие технической базы и появление новых моделей рамановских спектрометров, анализ регистрируемых спектров все еще является нетривиальной задачей [2]. Поэтому актуальной задачей становится поиск новых интеллектуальных методов анализа спектральных данных. Целью данной работы является исследование различных методов искусственного интеллекта для анализа *in vivo* спектров рамановского рассеяния кожи.

Экспериментальные исследования проводились в Самарском областном клиническом онкологическом диспансере (табл. 1.). Помимо спектров для каждого пациента известен истинный диагноз (поставлен врачом на основе гистологического анализа).

Таблица 1

Информация о наборе данных

Заболевание (истинный диагноз)	Количество рамановских спектров
Здоровая кожа	609
Дерматофиброма	26
Гемангиома	40
Себорейный кератоз	113
Кожный рог	1
Базальноклеточная карцинома	122
Плоскоклеточная карцинома	12
Злокачественная меланома	70
Пигментный невус	170

Для решения задачи классификации рамановских спектров кожи применялись следующие алгоритмы машинного обучения: логистическая регрессия, случайный лес, метод *k*-ближайших соседей, градиентный бустинг (реализация LightGBM), многослойный перцептрон. Для всех методов классификации, кроме многослойного перцептрона, на первом этапе анализа для сокращения размерности данных использовался метод разрешения многомерных кривых с использованием метода частичных наименьших квадратов (MCR-ALS) [3]. В результате MCR-ALS были выделены тридцать компонентов кожи и произведена оценка их относительных концентраций в исследуемом участке кожи. Эти данные в дальнейшем применялись в качестве признаков классификации. В случае применения многослойного перцептрона метод MCR-ALS не применялся, и в качестве признаков классификации использовались отсчеты зарегистрированных спектров рамановского рассеяния.

В работе рассмотрены следующие случаи классификации:

- здоровая кожа (n = 602) против кожи с заболеваниями (n = 602);
- доброкачественные новообразования (n = 405) против злокачественных (n = 197);
- злокачественная меланома (n = 65) против пигментного невуса (n = 167).

В результате было построено 15 моделей классификации (табл. 2). Все классификаторы реализованы на языке программирования Python. Точность моделей классификации оценивалась по такой метрике, как площадь под ROC-кривой (ROC AUC). ROC AUC может принимать значения от 0 до 1, чем значение ближе к 1, тем лучше. Площадь, равную более 0,75 принято считать достаточно высокой точностью.

Таблица 2

ROC AUC для различных случаев классификаций и методов машинного обучения

Случай классификации	Здоровая кожа против кожи с заболеваниями	Доброкачественные новообразования против злокачественных новообразований	Злокачественная меланома против пигментного невуса
Логистическая регрессия	0,87	0,67	0,70
Случайный лес	0,90	0,73	0,81
Метод k-средних	0,82	0,73	0,78
Градиентный бустинг (LightGBM)	0,91	0,72	0,77
Многослойный перцептрон	0,80	0,59	0,77

Классификация здоровой кожи против кожи с заболеваниями оказалась самой точной (ROC AUC 0,90). Данная точность была достигнута путем реализации алгоритма LightGBM. Самой сложной задачей оказалась классификация доброкачественных и злокачественных новообразований. Наилучший результат классификации в этом случае показали метод случайного леса (ROC AUC 0,73) и метод k-средних (ROC AUC 0,73). Эффективность классификации злокачественной меланомы и пигментного невуса достигла ROC AUC 0,81 в результате реализации алгоритма случайного леса.

Таким образом, в работе проведено сравнение различных методов машинного обучения для задачи классификации рамановских спектров новообразований кожи. Площадь под ROC-кривой моделей классификации варьируется от 0,59 до 0,91. Точность классификации новообразований кожи с использованием рассмотренных методов машинного обучения больше, чем точность обычных медицинских специалистов в результате визуального осмотра новообразования, хотя и не превышает точность золотого стандарта онкологии – гистологического исследования. Тем не менее, использование методов машинного обучения показывает возможности быстрой и неинвазивную диагностики новообразований кожи в рамках скрининга населения или при первичном осмотре.

Список литературы

1. I.A. Bratchenko, L.A. Bratchenko, A.A. Moryatov, et.al. In vivo diagnosis of skin cancer with a portable Raman spectroscopic device // *Exp. Dermatol.*, vol. 30 (5), pp. 652-663, 2021.
2. M. Wu, B. Gao, X. Wei. Recent advances in Raman spectroscopy for skin diagnosis // *Journal of Innovative Optical Health Sciences*, vol. 16 (03), pp. 2330003, 2023.
3. I.A. Matveeva, A.I. Komlev, O.I. Kaganov, et.al. Multidimensional Analysis of Dermoscopic Images and Spectral Information for the Diagnosis of Skin Tumors // *Journal of Biomedical Photonics & Engineering*, vol. 10(1), p. 010307, 2024.

ДОМЕННО-СОСТЯЗАТЕЛЬНЫЙ ПОДХОД К ОБУЧЕНИЮ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ СОСТАВА ВИН С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАЗЛИЧНЫХ ТЕХНИК ИЗМЕРЕНИЯ СПЕКТРОВ ИК-ПОГЛОЩЕНИЯ

Л. С. Утегенова^{1*}, О. Э. Сарманова^{1,2}, С. А. Буриков^{1,2}, И. В. Пластинин^{1,2},
Т. А. Доленко^{1,2}, С. А. Доленко²

¹*Физический факультет, Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1
E-mail: utegenova.ls20@physics.msu.ru

²*Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына, Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1*

Работа посвящена решению задачи одновременного определения концентрации 5 компонентов вин (этанола, смеси глюкозы, фруктозы и сахарозы, винной, яблочной и лимонной кислот, глицерина и диоксид серы) по спектрам ИК-поглощения вин с использованием нейронных сетей. Применение доменно-состязательного обучения нейронных сетей для предсказания концентрации компонент вина позволило преодолеть проблему влияния способа регистрации ИК-спектров на их форму и обеспечило одновременное определение концентрации искомых компонентов с удовлетворительной точностью.

Внедрение наукоемких подходов позволяет значительно повысить эффективность различных производственных процессов, в том числе и виноделия. С химической точки зрения вино является чрезвычайно сложным объектом, содержащим различные спирты (этанол, метанол, глицерин, алифатические и ароматические спирты), сложные эфиры, ацетали, воски и масла, углеводы, органические кислоты, минеральные и фенольные соединения, витаминopodobные вещества и т.д. [1]. Все эти параметры необходимо контролировать в процессе производства вина, причем метод контроля должен быть дешевым, экспрессным и неразрушающим образец в процессе анализа.

В настоящей работе была решена задача определения состава вин по спектрам их ИК-поглощения с помощью нейронных сетей (НС). ИК-спектр вина состоит из набора перекрывающихся полос разной формы и интенсивности, характерных для входящих в него веществ, и деформируется вследствие взаимодействий между их молекулами. Использование ИК-спектров для обучения адаптивных моделей требует получения представительного набора данных, что может быть затруднительно сделать экспериментально. В настоящей работе предложен ряд подходов, призванных обойти проблему нехватки данных.

Во-первых, рассматривается обучение НС на спектрах ИК-поглощения растворов, моделирующих белые и красные вина, с последующим применением обученных моделей для анализа спектров ИК-поглощения реальных вин. Так, в работе был проведен подбор основных компонент вин таким образом, чтобы спектры ИК-поглощения модельных растворов были подобны спектрам ИК и белых, и красных вин (Рис.1). Такой подход позволяет экспериментально получить представительный набор спектров ИК с известными концентрациями основных компонент вин для обучения НС и с помощью обученных НС определять концентрации этих компонент в реальных винах.

В качестве модельных использовались водные растворы, содержащие этанол, смесь глюкозы, фруктозы и сахарозы, винную, яблочную и лимонные кислоты, глицерин и диоксид серы. Диапазоны изменения концентраций указанных компонентов в модельных растворах выбраны в соответствии с ГОСТ РФ 32030-2021 и варьировались в пределах от 8 до 18 об.% для этанола, от 10 до 200 г/л для сахаров (глюкозы, фруктозы и сахарозы), от 3 до 12 г/л для кислот (винной, яблочной и лимонной), от 5 до 25 г/л для глицерина, от 0.1 до 1 г/л для диоксида серы.

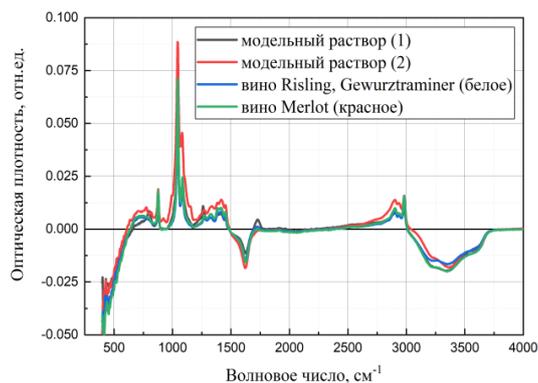


Рис. 1. Спектры ИК поглощения образцов модельного вина с концентрацией компонентов (1) этанола: 8 об. %, сахаров: 10 г/л, кислот: 12 г/л, глицерина: 5 г/л, диоксида серы: 0.2 г/л; (2) этанола: 12 об. %, сахаров: 100 г/л, кислот: 3 г/л, глицерина: 15 г/л, диоксида серы: 0.5 г/л; реальных белого и красного вин.

Во-вторых, ответом на проблему объединения разрозненных баз данных, необходимых для обучения НС, может стать доменная адаптация (ДА) – направление в машинном обучении, связанное с преобразованием признаков и выборок данных с целью объединения примеров, полученных из разных источников (например, на разных экспериментальных установках). В настоящей работе были применены два подхода к измерению спектров ИК-поглощения модельных растворов на ИК Фурье-спектрометре: 1) с использованием системы прокачки образца в схеме неполного внутреннего отражения (НПВО); 2) из капли. Таким образом, две схемы измерения порождали два домена данных. Процедура ДА была проведена с использованием доменно-состязательных нейронных сетей (ДСНС) [2] (рис. 2).

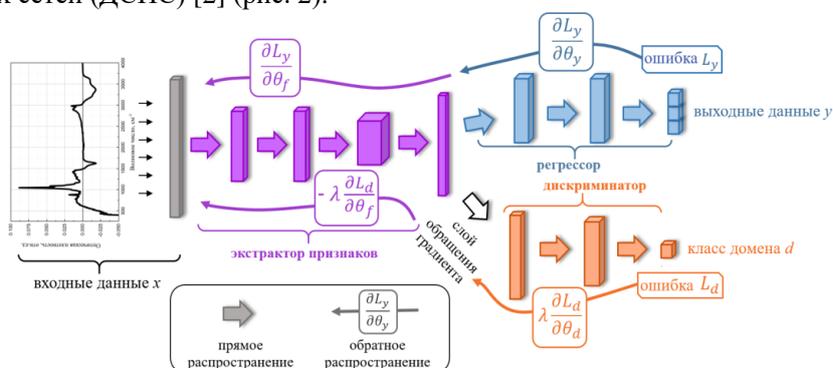


Рис. 2. Схема архитектуры ДСНС.

Применение доменно-состязательного подхода к спектрам ИК-поглощения модельных растворов обеспечивает следующие точности определения компонент вин: 0.568 ± 0.022 об. % для этанола, 4.4 ± 0.7 г/л для сахара, 0.88 ± 0.11 г/л для кислот, 2.8 ± 0.5 г/л для глицерина, 0.258 ± 0.019 г/л для диоксида серы.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-11-00266, <https://rscf.ru/project/24-11-00266/>

Список литературы

1. M. Butnariu, A. Butu, Qualitative and Quantitative Chemical Composition of Wine // Quality Control in the Beverage Industry, vol. 17, pp. 385-417, 2019.
2. Y. Ganin, E. Ustinova, H. Ajakan, P. Germain, H. Larochelle et.al. Domain-adversarial training of neural networks // J. Mach. Learn. Res. vol. 17(1), pp. 2096-2030, 2016.

ПРЯМОЙ РАСЧЕТ СПЕКТРОВ ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ПЛАЗМОННЫХ НАНОЧАСТИЦ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

И. А. Викленко^{1*}, В. В. Срабионян¹, В. А. Дурыманов¹, Я. Н. Гладченко-Джевелекис¹

¹Южный федеральный университет

344006, Российская Федерация, г. Ростов-на-Дону, ул. Большая Садовая, д. 105/42

*E-mail: viklenko@sfedu.ru, ivan.v2000@mail.ru

Спектроскопия оптического поглощения является мощным инструментом при анализе нанокompозитов. Однако анализ этих спектров является сложной и ресурсоемкой задачей. Для оптимизации процесса моделирования оптических спектров в данной работе использована модель машинного обучения на основе метода градиентного бустинга CATBOOST. Обученная модель демонстрирует высокую точность, коэффициент детерминации на тестовых наборах данных превышает 97%, а время расчета спектра моделью сокращено в 700 раз.

В настоящее время при решении сложных технических задач и разработке новых технологий все большее внимание уделяется использованию плазмонных материалов, обладающих выдающимися оптическими свойствами. Для определения структурных характеристик и физических свойств такого рода материалов используют различные методы структурного анализа, в том числе и спектроскопию оптического поглощения, которая в совокупности с сопутствующими методами позволяет определять средние размеры наночастиц (НЧ) в образце, степень их агломерации, компонентный состав и архитектуру наночастиц. Однако сама по себе процедура анализа спектров является достаточно ресурсоемкой, особенно в случае близкорасположенных взаимодействующих НЧ или при наличии существенных неоднородностей в матрице [1].

Обычно определение параметров, характеризующих НЧ и их агрегаты, осуществляется следующим образом: 1) на основе сведений из дополнительных методов анализа структуры (ТЕМ, EDX, XANES, EXAFS) выдвигается гипотеза об этих параметрах (размер НЧ, архитектура, показатель преломления среды и т.д.); 2) для стартового агрегата запускается прямой расчет спектров оптического поглощения; 3) на основе функции невязки между экспериментальным и теоретическим спектрами осуществляется подгонка параметров агрегата, заложенных в гипотетической модели. Таким образом для определения параметров агрегата необходимо провести большое количество прямых расчетов спектров поглощения, и поэтому сокращение времени каждого отдельного расчета может существенно упростить и ускорить процесс такого анализа.

Описанная задача может быть упрощена с применением методов машинного обучения (МО), причем следует отметить, что можно выделить два способа решения обозначенных проблем: 1) решение задачи прямого расчета оптических спектров за существенно меньшее время; 2) решение обратной задачи, т.е. прямое определение параметров агрегата НЧ из анализа спектра оптического поглощения. Оба подхода имеют свои преимущества и недостатки. В рамках данной работы мы решили остановиться на первом методе, т.к. он более простой для проверки и последующей оценки качества результатов. Также следует отметить, что в рамках решения задачи прямого расчета оптических спектров можно установить некоторое подмножество агрегатов, дающих близкий результат, что позволит явным образом оценить как общие статистические параметры агрегатов в подмножестве, так и достигаемую моделью среднюю точность, что в последствии позволит упростить решение обратной задачи.

При генерации обучающего набора данных для прямого расчета спектров оптического поглощения использовалась программа MSTM-Studio [2]. Для расчета спектров необходимо указать координаты каждой частицы, их размеры, значения диэлектрической функции в исследуемой области длин волн (300-800 нм), а также показатель преломления среды. Таким образом было сгенерировано ~ 7000 спектров для монометал-

лических наночастиц серебра, золота, и их монометаллических агрегатов (до 3 НЧ). На основе полученных данных можно решать поставленную задачу 2 способами: 1) расчет значения спектра поглощения для конкретной точки (на конкретной длине волны) с использованием всех доступных данных для данной длины волны; 2) расчет всего спектра поглощения на заданной сетке длин волн. Применение первого способа видится нам более привлекательным по следующим причинам: 1) предсказание спектров не на фиксированной сетке длин волн может позволить предсказывать спектры с произвольным разрешением; 2) из-за рассмотрения каждой точки спектра как отдельного экземпляра в выборке можно рассчитывать на более надежный результат; 3) ввиду линейности уравнений Максвелла и того, что вся информация о материале содержится в значениях действительной и мнимой частей диэлектрической функции плазмонного материала, можно рассчитывать на то, что удастся обучить универсальную модель предсказания спектров для произвольных материалов. Таким образом, решаемая задача является задачей регрессии над табличными данными, которая может быть эффективно решена с применением методов МО на основе градиентного бустинга [3].

С помощью алгоритма градиентного бустинга CATBOOST нами были обучены модели, определяющие значения оптического поглощения одиночных НЧ Ag и Au, и их агломератов, состоящих из двух, трёх НЧ Ag или Au. Значение коэффициента детерминации (R^2) для таких моделей на тестовой выборке данных составило $\sim 97\%$. Кроме того, была получена «единая» модель, обученная на всем объеме данных, доступных для тренировки. Значение R^2 для такой модели составило также 97% . Средняя продолжительность прямого расчета спектра оптического поглощения с применением методов МО составило ~ 2 мс, что более чем в 700 раз быстрее, чем расчет в MSTM-Studio.

Исследование поддержано РФФ №23-21-00526.

Список литературы

1. G. Shakhgildyan et al. Effect of Gold Nanoparticles on the Crystallization and Optical Properties of Glass in ZnO-MgO-Al₂O₃-SiO₂ System // Crystals, vol. 12, № 2. p. 287, 2022.
2. L.A. Avakyan et al. Insight on agglomerates of gold nanoparticles in glass based on surface plasmon resonance spectrum: study by multi-spheres T-matrix method // J. Phys. Condens. Matter, vol. 30, № 4. p. 045901, 2018.
3. L. Grinsztajn, E. Oyallon, G. Varoquaux Why do tree-based models still outperform deep learning on tabular data? // 2022.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРОВ ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫХ МОДУЛЯТОРОВ СВЕТА НА БЫСТРОДЕЙСТВИЕ ДИФРАКЦИОННЫХ НЕЙРОСЕТЕЙ

А. А. Волков*, А. С. Овчинников, А. С. Свистунов, Т. З. Миниханов,
А. В. Шифрина, Е. Ю. Злоказов

*Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
115409, Россия, Москва, Каширское шоссе, 31*

*E-mail: mr.a.a.volkov@gmail.com

Исследована временная динамика модуляции фазы и отклик фазовых жидкокристаллических и цифровых пространственно-временных модуляторов света различных моделей с применением бинарных фокусирующих фазовых дифракционных оптических элементов. Проанализировано влияние характеристик пространственно-временных модуляторов света различных типов на производительность и быстродействие дифракционных оптических нейронных сетей.

Цифровые искусственные нейросети представляют собой удобный инструмент обработки больших объёмов данных. Тем не менее рост производительности искусственных нейронных сетей на основе вычислительных машин с архитектурой фон Неймана в значительной степени осложнён на фоне нарушения закона Мура и закона масштабирования Деннарда. Дальнейшее увеличение производительности таких нейросетей происходит с исключительно высоким ростом энергопотребления [1]. Среди решений, направленных на решение проблемы увеличения вычислительной мощности, можно выделить использование технологий оптической обработки данных для построения оптических нейронных сетей.

Дифракционные нейронные сети – разновидность оптических нейросетей, использующих дифракцию как основной принцип для управления синапсами, манипулируя амплитудой, фазой или направлением когерентного излучения в пространстве как средствами межнейронной связи. В таких нейронных сетях формирование слоёв нейронов осуществляется с помощью фазовых масок или дифракционных оптических элементов (ДОЭ). Возможная архитектура дифракционной нейросети предполагает использование $4f$ -схемы и пространственно-временных модуляторов света (ПВМС) для вывода ДОЭ в фурье-плоскости системы. Использование динамически изменяемых ДОЭ, выводимых на ПВМС, позволяет осуществлять в реальном времени обработку изображений и вычисления в оптической нейросети [2].

Опуская быстродействие регистрирующей фотоаппаратуры, фактическая производительность дифракционных нейросетей зависит от характеристик и временной динамики модуляции фазы пространственно-временных модуляторов. Среди значимых характеристик ПВМС следует отметить пространственное разрешение матрицы и размер пиксела, частоту смены кадров. Кроме того, важными оказываются временные параметры отклика модулятора на управляющий сигнал: время нарастания переднего фронта, время спада заднего фронта, уровень межкадровой помехи [3].

В работе исследована временная динамика модуляции фазы нескольких моделей микрзеркальных и жидкокристаллических пространственно-временных модуляторов, а также влияние характеристик и временных параметров отклика модуляторов на производительность дифракционной нейронной сети.

Схема экспериментальной установки, используемой для измерения параметров жидкокристаллических модуляторов, приведена на рис. 1: 1 – лазер; 2 – ослабляющий фильтр; 3 – собирающая линза; 4 – микроапертура (пинхол); 5 – светоделительный куб; 6 – жидкокристаллический ПВМС; 7 – цифровая фотокамера.

Схема экспериментальной установки, используемой для измерения параметров микрзеркальных модуляторов, приведена на рис. 2: 1 – лазер; 2 – ослабляющий фильтр; 3 – собирающая линза; 4 – микроапертура (пинхол); 5 – собирающая линза;

6 – микрозеркальный ПВМС; 7 – фотодиод, подключенный к управляющей плате.

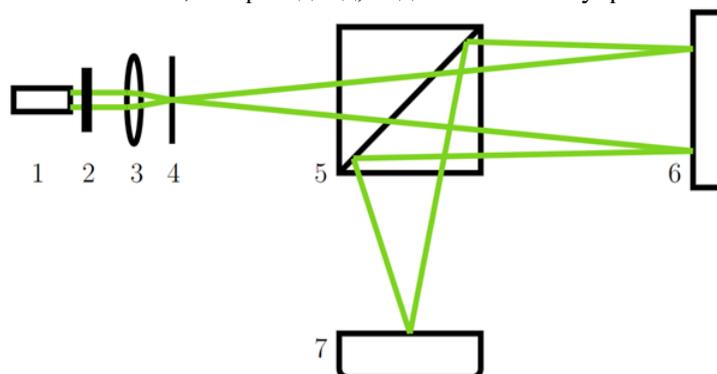


Рис. 1. Установка для исследования жидкокристаллических модуляторов

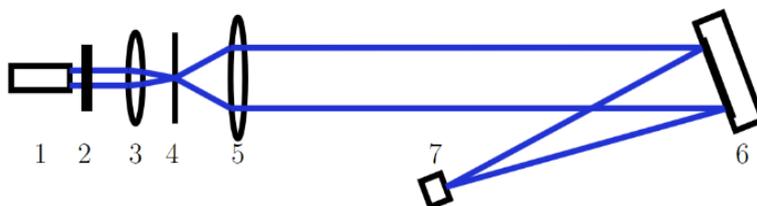


Рис. 2. Установка для исследования микрозеркальных модуляторов



Рис. 3. Пример формируемого изображения

Для проведения эксперимента в качестве ДОО были использованы бинарные осевые фазовые голограммы. Расчёт голограмм осуществлялся итерационным методом поиска со случайной траекторией для сферически расходящегося считывающего пучка [4]. Пример формируемого изображения приведён на рис. 3.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (РНФ), грант № 23-12-00336.

Список литературы

1. R. Xu, P. Lv, F. Xu, Y. Shi, A survey of approaches for implementing optical neural networks // *Optics & Laser Technology*, vol. 136, p. 106787, 2021.
2. X. Sui, Q. Wu, J. Liu, Q. Chen, G. Gu A Review of Optical Neural Networks // *IEEE Access*, vol. 8, pp. 70773-70783, 2020.
3. Т.З. Миниханов, Е.Ю. Злоказов, Р.С. Стариков, П.А. Черёмхин, Временная динамика модуляции фазы жидкокристаллического пространственно-временного модулятора света // *Измерительная техника*, № 12, с. 35-39, 2023.
4. P.A. Cheremkhin, N.N. Evtikhiev, V.V. Krasnov, R.S. Starikov, E.Yu. Zlokazov Iterative synthesis of binary inline Fresnel holograms for high-quality reconstruction in divergent beams with DMD // *Optics and Lasers in Engineering*, vol. 150, p. 106859, 2022.

Секция 6

КВАНТОВЫЕ КОММУНИКАЦИИ

ИССЛЕДОВАНИЕ УЯЗВИМОСТЕЙ СИСТЕМ КВАНТОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КЛЮЧЕЙ ПРИ ВЫСОКОИНТЕНСИВНОМ ЛАЗЕРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

А.Н. Цыпкин^{1*}, Е.Н. Опарин¹, А.А. Гайдаш^{1,2}, М.С. Гусельников¹, А.О. Исмагилов¹,
Б.А. Наседкин^{1,2}, С.А. Козлов¹, А.В. Козубов^{1,2}

¹Университет ИТМО

197101, Российская Федерация, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., д. 49

*E-mail: tsypkinan@itmo.ru

²ООО "СМАРТС-Кванттелеком"

199178, Российская Федерация, Санкт-Петербург, 6 лин. ВО, д. 59

В работе представлены экспериментальные исследования изменения свойств элементов защиты систем квантового распределения ключей – изоляторов при воздействии на них высокоинтенсивного лазерного излучения. Показаны отличительные особенности свойств оптических волоконных изоляторов и CWDM фильтров при воздействии непрерывного излучения и импульсного с длительностями порядка сотен фемтосекунд. Определены уязвимости при использовании фемтосекундного излучения в случае использования в качестве защиты систем квантового распределения ключей оптических волоконных изоляторов и CWDM фильтров.

В системах квантового распределения ключей (КРК) оптические изоляторы используются для защиты от ряда атак на техническую реализацию. Примером такой атаки является атака с оптическим зондированием или «троянский конь» [1]. Для ее проведения нарушитель запускает в блок отправителя системы КРК импульсы света. Эти импульсы достигают кодирующего устройства, где кодируются той же информацией, что фотоны, отправляемые к получателю. После этого часть «троянских» фотонов отражается и выходит из блока получателя, доставляя нарушителю приватную информацию и компрометируя безопасность системы КРК. Не допустить этого и призваны оптические изоляторы, которые препятствуют попаданию в блок отправителя излучения извне.

Вспомогательной к «троянскому коню» является атака с лазерным воздействием на оптические элементы. Наиболее явным эффектом от этого воздействия является нагрев, влекущий за собой изменение оптических свойств: изменение коэффициента деления светоделителей, ослепление детекторов, изменение коэффициента изоляции изоляторов. Обычно, для этого используются лазерное излучение с центральной длиной волны, попадающей в область поглощения оптических элементов, из которых состоят оптические волоконные изоляторы. В представленной литературе широко используются лазерные источники с длинами волн 1050-1060 нм [2]. Именно это и накладывает актуальность исследовать оптический волоконный изолятор для излучения этого спектрального диапазона.

Для измерения изменения пропускания оптического волоконного изолятора была собрана экспериментальная установка, позволяющая параллельно воздействовать высокоинтенсивным лазерным излучением с центральной длиной волны 1050 нм и слабоинтенсивным излучением на 1550 нм. Продемонстрированы зависимости изменения изоляции и прямых потерь от мощности лазерного излучения накачки на 1050 нм в непрерывном лазерном режиме генерации.

Дополнительно исследованы пропускания оптического волоконного изолятора и CWDM фильтра в зависимости от режимов лазерного излучения (непрерывная и фемтосекундная импульсная генерация). Представлены зависимости пропускания для разных мощностей в непрерывном и импульсном фемтосекундном режиме (Рис.1). В качестве источника использовался лазер Avesta Project ТЕМА-150, запущенный в фемтосекундном режиме с центральной длиной волны 1050 нм и длительностью в импульсе 150 фс.

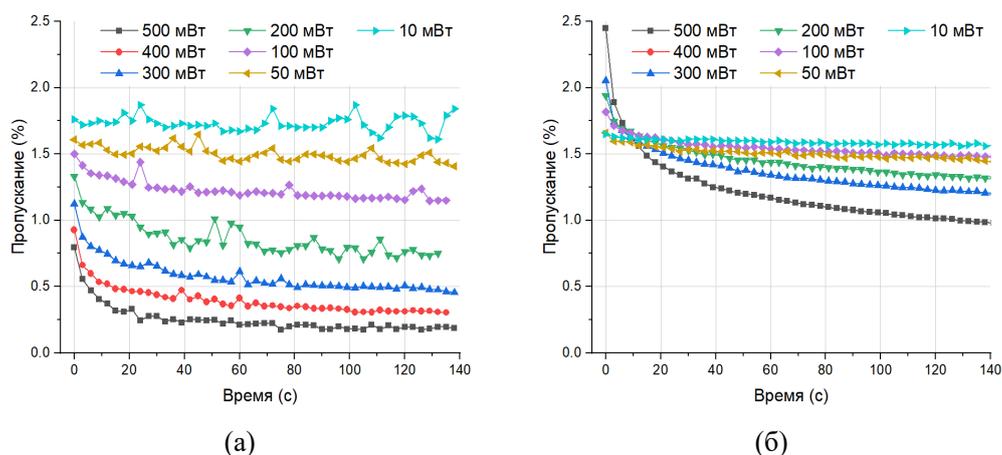


Рис. 1. Динамика пропускания оптическим изолятором (а) непрерывного и (б) фемтосекундного излучения с центральной длиной волны 1050 нм и различными средними мощностями

Как видно из результатов, фемтосекундное излучение демонстрирует отличительные способности для оптических волоконных изоляторов. Интересные особенности пропускания в фемтосекундном режиме лазерного излучения продемонстрированы будут в докладе для стандартных CWDM фильтров. Все представленные отклонения от технических характеристик необходимо учитывать при разработке КРК систем и анализе их защиты.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках Государственного задания (Паспорт № 2019-0903).

Список литературы

1. B. Nasedkin, F. Kiselev, I. Filipov, et al. Loopholes in the 1500–2100-nm Range for Quantum-Key-Distribution Components: Prospects for Trojan-Horse Attacks //Phys. Rev. Appl., vol. 20 (1), p. 014038, 2023.
2. D. D. Ruzhitskaya, I.V. Zhluktova, M.A. Petrov, et al. Vulnerabilities in the quantum key distribution system induced under a pulsed laser attack // JSTO ИТМО., vol. 136 (6), p. 837, 2021.

КВАНТОВЫЕ КОМПЬЮТЕРЫ И СИСТЕМЫ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КЛЮЧЕЙ ДЛЯ ОБУЧЕНИЯ СТУДЕНТОВ

А. И. Андрюнин^{1*}

*ООО «Специальные Системы. Фотоника», Российская Федерация, Санкт-Петербург,
Выборгская набережная, д. 49*

**E-mail: ax@sphotonics.ru*

Квантовый компьютер для образования основанный на спиновом магнитном резонансе азотно-вакансионного центра в алмазе. Квантовые компьютеры на основе ЯМР. Учебные установки для моделирования и изучения систем передачи данных с квантовым распределением ключей.

Мы рассмотрим передовые технологии и возможности для обучения студентов в сфере квантовых коммуникаций и вычислений. Рассмотрим такие решения, как:

- DIAMOND I - алмазный квантовый компьютер для обучения
- Серия квантовых компьютеров на основе ЯМР
- Учебные установки для изучения систем передачи с квантовым распределением ключей

Diamond I - первый в мире квантовый компьютер для образования основанный на спиновом магнитном резонансе азотно-вакансионного (NV) центра в алмазе.

Управляя основными физическими величинами, такими как оптика, электричество и магнетизм, устройство реализует квантовые манипуляции и считывание спинов NV-центров, что позволяет демонстрировать основные концепции квантовых вычислений, такие как кубиты, квантовые вентили и квантовые алгоритмы.

Diamond I работает в условиях окружающей среды и не нуждается в криогенных средах, что позволяет проводить экспериментальные курсы по квантовой механике и квантовым вычислениям в обычной студенческой аудитории или лаборатории.

Примеры экспериментов:

- Осцилляции Раби.
- T2 измерения.
- Алгоритм Дойча – Йожи.
- Динамическая развязка.
- Непрерывная волна.
- Спиновое эхо.

WT-ESS-BBO - установка для изучения явления квантовой запутанности

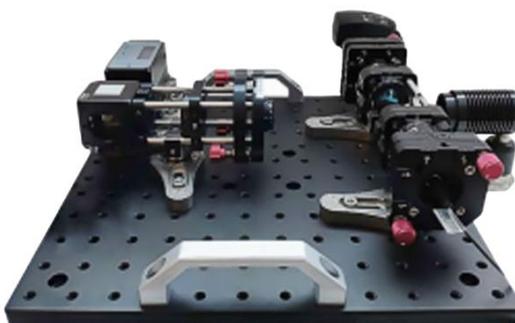


Рис.1 Установка для изучения явления квантовой запутанности

Эта система основана на параметрическом процессе преобразования в кристалле ВВО(β -Барий-Борат) с понижением частоты. Световой пучок лазера накачки падает на кристалл параметрического преобразования и при условии синхронности фаз генерируется поляризационно-сопряженные запутанная пара фотонов. Благодаря системе высокоточного позиционирования положения пространственного коллиматора можно с легкостью направить сгенерированную пару запутанных фотонов в волокно. Другой конец волокна подключается к однофотонному детектору, который преобразует свет в электрические импульсы. Электрический импульс отправляется на счетчик зарегистрированных фотонов, и выводится на его экране для реализации измерений параметров запутанности.

Так же в данном докладе будет рассмотрена линейка квантовых компьютеров, которые позволяют производить вычисления с различным числом кубитов. В частности линейка Gemini и Triangulum.

Список литературы

1. Feng G., Hou Sh.Ya., ZOU H., SHI W., YU SH., SHENG Z., RAO X., MA K., CHEN CH., REN B., MIAO G., XIANG J., ZENG B. SpinQ Triangulum: a commercial three-qubit desktop quantum computer // IEEE NANOTECHNOLOGY MAGAZINE, vol. 16, pp. 20–29, 2022.
2. GURUDEV DUTT M.V., CHILDRESS L., JIANG L., et.al. Quantum register based on individual electronic and nuclear spin qubits in diamond // SCIENCE, vol. 316, pp. 1312-1316, 2007.

РАБОТА СИСТЕМЫ КРК С ФАЗО-ВРЕМЕННЫМ КОДИРОВАНИЕМ ПРИ СОВМЕСТНОЙ ПЕРЕДАЧЕ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ И КЛАССИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ С-ДИАПАЗОНА

А. В. Борисова^{1*}, А. Н. Климов², А. С. Тимошенко¹, И. В. Гриценко¹

¹ АО «Информационные технологии и коммуникационные системы»
127273, Российская Федерация, г. Москва, улица Отрадная, 2Б, стр. 1

² Центр квантовых технологий МГУ имени М. В. Ломоносова
119991, Российская Федерация, г. Москва, Ленинские горы, 1, стр. 35

*E-mail: borisova_alina_95@mail.ru

Представлены результаты исследований поведения системы квантового распределения ключей при передаче квантовых состояний совместно с классическими сигналами, передаваемых как попутно, так и навстречу квантовым состояниям. При этом квантовый канал размещен в О-диапазоне спектра, а классические данные – в С-диапазоне. Определены граничные условия для работы данной системы: максимальная дальность при подключении классических каналов суммарной мощностью 20 мВт составляет 50 км.

Одной из важных задач в развитии квантового распределения ключей (КРК) является интегрирование квантовых каналов в существующие линии связи. На данный момент в оптических транспортных сетях используются две основные технологии мультиплексирования, CWDM и DWDM. Из-за более высокой пропускной способности и увеличения дальности за счет применения усилителей все большее распространение получают именно DWDM-сети. В связи с этим, большой интерес вызывает совмещение квантовых каналов именно с DWDM-каналами, расположенными в С-диапазоне спектра [1]. При таком мультиплексировании исследователи и инженеры сталкиваются с проблемой высокого уровня шума в квантовом канале. Он вызван нелинейными эффектами, возникающими в волокне при распространении мощных, по сравнению с одиночными фотонами, классических сигналов [1-2]. Шумы, в свою очередь, ограничивают дальность КРК [3]. Для снижения уровня шума используют комплексный подход: перемещают квантовый канал в О-диапазон спектра, применяют высокочастотные узкополосные спектральные фильтры, сокращают длительность стробирующего импульса однофотонного детектора (gate).

Указанные меры были применены при построении экспериментального макета системы КРК, предназначенной для интегрирования в DWDM-сети и реализующей протокол фазо-временного кодирования на дискретных переменных. Длина волны квантового канала выбрана 1310 нм, длительность стробирующего импульса – около 2 нс, а ширина спектрального фильтра на полувысоте – 0,5 нм. Среднее число фотонов в импульсе на выходе передающего модуля QKD Tx составляло $\mu = 0,5$ фотон/импульс. Для объединения квантового канала, канала синхронизации и классических данных, а также для их разделения были собраны мультиплексор MUX и демультиплексор DeMUX, состоящие из комбинации фильтров и мультиплексоров типов FWDM, CWDM. Для лабораторного тестирования системы КРК классические каналы имитировались с помощью двух лазеров ECL и суперлюминесцентного диода SLD, работающих в непрерывном режиме (рис. 1). Исследования производились как при сонаправленной, так и при встречной передаче квантовых и классических сигналов.

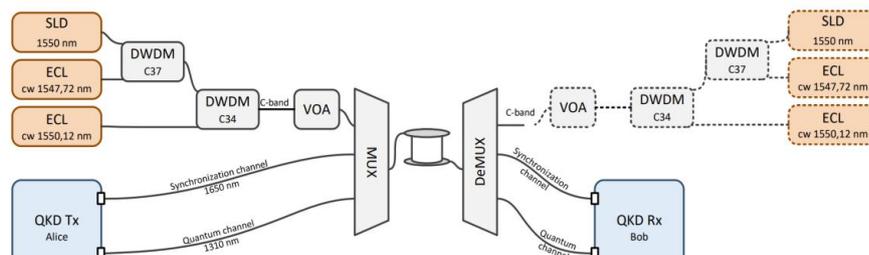


Рис. 1. Схема стенда для исследования поведения системы КРК при передаче квантовых состояний и мощных классических сигналов по одному волокну. Пунктиром показано подключение классических источников при тестировании во встречном направлении.

В результате продемонстрирована стабильная работа системы КРК на расстояниях до 50 км при мощности классических сигналов до 20 мВт при сонаправленной передаче и до 15 мВт при встречной передаче классических сигналов (рис. 2). При этом максимальная дальность КРК при отсутствии классических каналов составляет около 60 км. Стабильная работа тестируемой системы КРК обеспечивается при доли квантовых ошибок в просеянном ключе менее 10%. Теоретически и экспериментально показано, что для фазо-временного кодирования QBER не превышает 10% при отношении квантовый сигнал/шум (QSNR) более 5 (рис. 3). Отметим также, что на расстояниях более 40 км соотношение сигнал/шум выше для случая сонаправленной передачи классических и квантовых сигналов. Это обусловлено тем, что интенсивность прямого рассеяния уменьшается с ростом расстояния, а интенсивность обратного практически не изменяется [4].

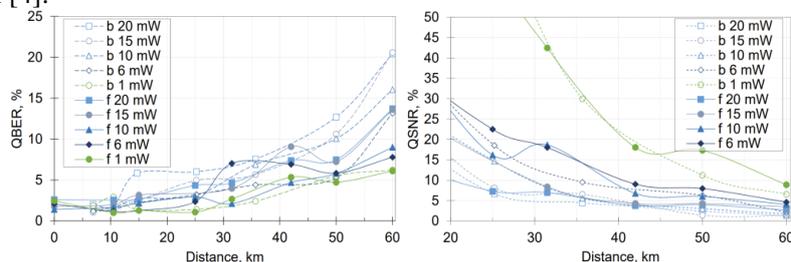


Рис. 2. Зависимость от расстояния доли квантовых ошибок в просеянном ключе QBER (слева) и соотношения квантовый сигнал/шум QSNR (справа) при разной мощности классических сигналов.

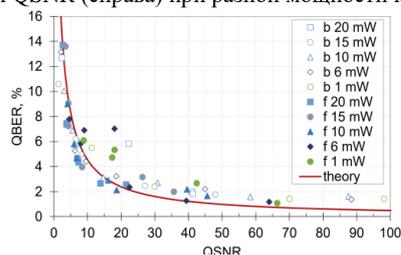


Рис. 3. Зависимость доли квантовых ошибок в просеянном ключе QBER от отношения квантовый сигнал/шум QSNR при разной мощности классических сигналов.

Данная работа является небольшим, но значительным шагом на пути интегрирования сетей КРК в оптические транспортные сети, так как показана принципиальная возможность мультиплексирования квантовых и классических каналов.

Список литературы

1. Gerhátné Udvary E. Integration of QKD Channels to Classical High-speed Optical Communication Networks // Infocommunications Journal, vol. 15(4), pp. 2-9, 2023.
2. Wang, Liu-Jun, et al. Long-distance copropagation of quantum key distribution and terabit classical optical data channels // Physical Review A, 95(1), p. 012301, 2017.
3. Eraerds P. et al. Quantum key distribution and 1 Gbps data encryption over a single fibre // New Journal of Physics, vol. 12(6), p. 063027, 2010.
4. Iris Choi, Robert J. Young, and Paul D. Townsend Quantum key distribution on a 10Gb/s WDM-PON // Opt. Express, vol. 18, pp. 9600-9612, 2010.

ИНТЕГРАЛЬНО-ВОЛОКОННАЯ СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ ЛАЗЕРНЫМ ЛУЧОМ ДЛЯ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СВЯЗИ НА ОСНОВЕ ОПТИЧЕСКОЙ ФАЗИРОВАННОЙ АНТЕННОЙ РЕШЕТКИ

Н.С. Ласкавый*, А. А. Журавлев

Публичное акционерное общество «Пермская научно-производственная приборостроительная компания»

614007, Российская Федерация, Пермь, ул. 25 Октября, д. 106

**E-mail: LaskavyiNS@gmail.com*

В работе кратко описываются пространственные оптические линии связи в атмосфере и безвоздушном пространстве, существующие и перспективные системы отклонения лазерного луча в терминалах оптической связи, технология оптических фазированных антенных решеток. Приведено объяснение преимуществ реализации фазированных антенных решеток на фотонных интегральных схемах. Кратко описана экспериментальная установка и состав разработанной системы.

Оптические пространственные линии связи используются при необходимости создать неподверженный радиопомехам высокоскоростной и защищенный канал связи. Конструктивно они представляют из себя комбинацию передающего устройства, предназначенного для генерации и модуляции электромагнитных волн в инфракрасном диапазоне и излучения этого сигнала в пространство и принимающего устройства, которое регистрирует и демодулирует сигнал. Основным ограничением в использовании подобных систем является необходимость прямой видимости между передающим и принимающим элементом, поэтому при проектировании пространственных линий связи в атмосфере стоит учитывать вероятность возникновения погодных условий, ухудшающих видимость (туман, снег, дождь). В безвоздушном пространстве перечисленные выше факторы отсутствуют, поэтому данный способ передачи информации в последние годы получает широкое распространение в космических системах связи.

На данный момент в основном в оптических терминалах космических систем связи для задачи управления лазерным лучом используют оптико-механические устройства, которые представляют из себя фокусирующие оптические элементы и вращающиеся зеркала либо призмы. Однако, применение движущихся элементов имеет ряд существенных недостатков, основными из которых можно считать: инертность управления, высокое потребление электроэнергии, недолговечность, большие массу и габариты.

Применение подобных терминалов возможно на крупногабаритных спутниках, если же необходимо реализовать оптическую связь между микроспутниками, то стоит обратиться к иным технологиям управления оптическим лучом. Наиболее перспективной, по мнению автора, из таких технологий, считается оптическая фазированная антенная решетка. Действует она по принципу радиочастотной антенной решетки, а именно, управление лучом осуществляется за счет изменения формы диаграммы направленности антенны, которая, в свою очередь, формируется, путем изменения амплитуды и фазы электромагнитного сигнала на каждом отдельном элементе антенной решетки.

Предложено множество реализаций данной технологии, но наиболее перспективным считается исполнение на основе фотонных интегральных схем [1-3]. Данный тезис был выдвинут, основываясь на следующих аргументах:

- 1) высокая скорость управления лучом, за счет крайне слабой инертности материалов;
- 2) большие расстояния работы системы, за счет возможности работы с электромагнитным излучением высокой мощности;
- 3) большой диапазон сканирования;
- 4) низкое электропотребление;
- 5) высокая стабильность управления лучом.

На практике была реализована экспериментальная установка по измерению параметров отклоняющей системы и фазированная антенная решетка, которая представляла из себя лазерный источник оптического излучения, излучающий квазимонохроматический сигнал с длиной волны $\lambda = 1550$ нм, комплекс фазовых оптических модуляторов, вносящих разность фаз за счет прикладывания электрического поля и семиканальной волоконной излучающей системы, схема экспериментальной установки оказана на рисунке 1.

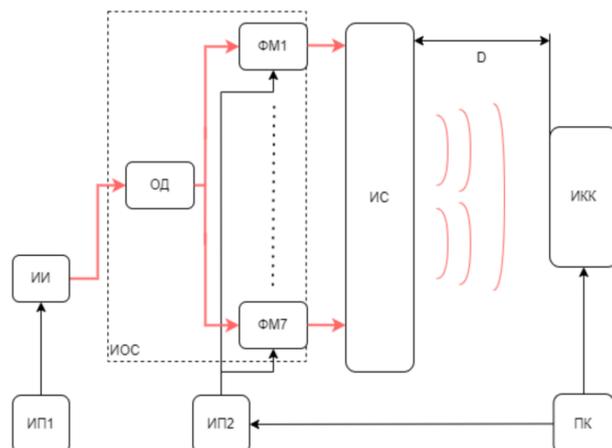


Рис. 1. Схема экспериментальной установки; ИП – блок питания, ИИ – источник излучения, ИОС - интегральная оптическая схема, ОД – оптический делитель, ФМ – фазовый модулятор, ИС – излучающая система, ИКК – инфракрасная камера, ПК – персональный компьютер; D - расстояние от системы излучения до инфракрасной камеры;

Было произведено моделирование фазированной антенной решетки в Matlab Phased Array System Toolbox. Учитывалось, что рабочая длина волны λ используемая в эксперименте равна 1550 нм и расстояние между элементами примерно равно 40λ . На рисунке 2 представлены результаты моделирования.

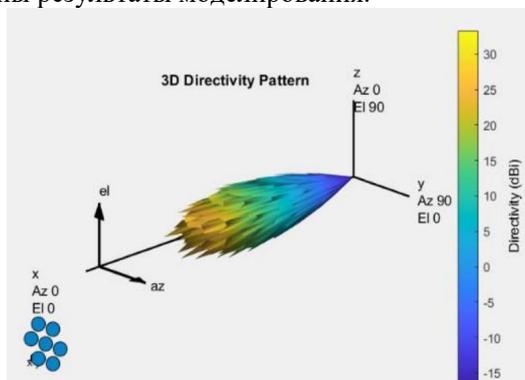


Рис. 2. Трехмерный вид диаграммы направленности исследуемой фазированной решетки
 Результатом работы является модель, соответствующая экспериментальным данным и реализованная оптическая фазированная антенная решетка, имеющая диапазон управления лучом $\pm 7,5^\circ$ и полуширину основного максимума 2° .

Список литературы

1. Guo, Y.; Guo, Y.; Li, C.; Zhang, H.; Zhou, X.; Zhang, L. Integrated Optical Phased Arrays for Beam Forming and Steering. Appl. Sci. 2021, 11, 4017.
2. Zhao, S.; Chen, J.; Shi, Y. All-Solid-State Beam Steering via Integrated Optical Phased Array Technology. Micromachines 2022, 13, 894.
3. Qu, R.H., Ye, Q., Dong, Z.R., et al.: Progress of optical phased array technology based on electro-optic material [J]. Chin. J. Lasers 35(12), 1861–1867 (2008)

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ВНОСИМЫХ ПОТЕРЬ ОПТИЧЕСКИМИ ЭЛЕМЕНТАМИ СИСТЕМ КВАНТОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КЛЮЧЕЙ

Б. А. Наседкин^{1,2*}, А. О. Исмагилов¹, Е. Н. Опарин¹,
А. А. Гайдаш^{1,2,3}, А. Н. Цыпкин¹, А. В. Козубов^{1,2,3}

¹Университет ИТМО

199034, Российская Федерация, Санкт-Петербург, ул. Кадетская линия В.О., д. 3Б

*E-mail: banasedkin@itmo.ru

²ООО "СМАРТС-Кванттелеком"

199178, Российская Федерация, Санкт-Петербург, 6 лин. ВО, д. 59

³Математический институт им. В. А. Стеклова Российской академии наук

119991, Российская Федерация, Москва, ул. Губкина, д. 8

Спектральные зависимости вносимых потерь волоконно-оптических элементов систем квантового распределения ключей исследовались в различных диапазонах длин волн поскольку они могут быть использованы нарушителем для реализации атак. В данной работе продемонстрировано, что наличие температурных зависимостей вносимых потерь в диапазоне 1250–1650 нм для волоконно-оптических элементов может привести к появлению каналов утечки информации.

Квантовое распределение ключей (КРК) является одним из способов формирования симметричных битовых последовательностей между легитимными пользователями, который защищён на уровне фундаментальных законов физики. Однако, подход при котором распределение ключей можно считать защищённым справедлив для идеальных систем, свойства которых не изменяются под воздействием внешних факторов. В то же самое время свойства используемого оборудования подвержены влиянию сторонних факторов. При этом изменения свойств могут быть обусловлены как целенаправленными действиями нарушителя, которые называются атаками [1, 2], так и появляться в результате штатной работы оборудования. В результате таких изменений могут появляться каналы утечки информации. Одним из параметров, который может на это повлиять, является температура волоконно-оптических элементов, используемых в системах КРК.

Изменение температуры при работе систем КРК может быть обусловлено внешними условиями, нагревом системы в процессе работы или действиями нарушителя [3]. В таком случае важным является необходимость исследования зависимостей вносимых потерь, для используемых в КРК, волоконно-оптических элементов от их температуры и оценка влияния данного изменения на возможности нарушителя к полному или частичному извлечению формируемых последовательностей.

Для измерения спектров пропускания была собрана установка, включающая в себя источник суперконтинуума, печь для нагрева и охлаждения исследуемых элементов и спектроанализатор. Измерения проводились в диапазоне температур от 0 до 90 °С. На основе измеренных спектров пропускания рассчитывались вносимые потери исследуемого элемента.

В качестве примера волоконно-оптического элемента, свойства которого зависят от температуры, в данной работе приведены рассчитанные значения вносимых потерь изолятора для обратного подключения, характерного для случая использования изолятора в качестве меры противодействия атакам [4]. Результаты измерений представлены на рис. 1.

Видно, что вносимые потери исследуемого изолятора значительно изменяются в зависимости от температуры. Изменение вносимых потерь рассматривалось относительно температуры 25 °С. При нагреве изолятора пропускание уменьшалось в длинноволновой части исследуемого спектра. На рабочей длине волны (1550 нм) максимальное изменение вносимых потерь составило 14 дБ для температуры 90 °С. Охлаждение изолятора приводило к увеличению пропускания в коротковолновой части рассматриваемого спектрального диапазона. Отдельно стоит отметить, что ввиду ограничений

динамического диапазона измерений спектроанализатора, фактическое изменение вносимых потерь могло составлять большую величину.

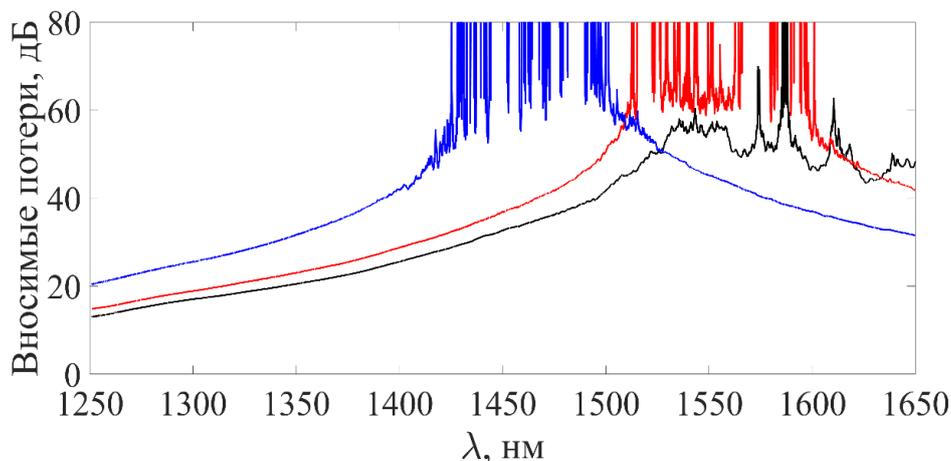


Рис. 1. Рассчитанные зависимости вносимых потерь изолятора от длины волны для различных температур (красная линия соответствует температуре изолятора 25 °С, синяя – 90 °С и чёрная – 0 °С)

Таким образом, в работе продемонстрировано, что вносимые потери волоконно-оптических элементов изменяются при изменении температуры. Для рассмотренного изолятора, используемого в качестве меры противодействия в системах КРК, изменение составило 14 дБ на длине волны 1550 нм при нагреве изолятора до 90 °С. Такие изменения могут привести к появлению сторонних каналов утечки информации. Одним из способов решения обнаруженной проблемы может являться контроль температуры критически-важных элементов и предъявление более строгих требований к рабочей температуре конкретных реализаций систем КРК.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках Государственного задания (Паспорт № 2019-0903).

Список литературы

1. F. Y. Lu, P. Ye, ZH. Wang, et al. Hacking measurement-device-independent quantum key distribution // *Optica*, vol. 10 (4), pp. 520–527, 2023.
2. A. Huang, R. Li, V. Egorov, et al. Laser-damage attack against optical attenuators in quantum key distribution // *Phys. Rev. Appl.*, vol. 13 (3), p. 034017, 2022.
3. D. D. Ruzhitskaya, I.V. Zhluktova, M.A. Petrov, et al. Vulnerabilities in the quantum key distribution system induced under a pulsed laser attack // *JSTO ИТМО.*, vol. 136 (6), p. 837, 2021.
4. A. Ponosova, D. Ruzhitskaya, P. Chaiwongkhot, et al. Protecting fiber-optic quantum key distribution sources against light-injection attacks // *PRX Quantum*, vol. 3 (4), p. 040307, 2022.

РАСЧЕТ ХАРАКТЕРИСТИК ЛАВИННЫХ ФОТОДИОДОВ НА ОСНОВЕ Ge/Si НА ДЛИНУ ВОЛНЫ 1310 НМ

К.И. Швалева, Х. Диб, К.А. Лозовой, А.П. Коханенко

*Национальный исследовательский Томский государственный университет
634050, Российская Федерация, Томск, пр. Ленина, д. 36
E-mail: hkris05@yandex.ru

В статье смоделирована планарная структура лавинного фотодиода на основе Ge/Si. Представлены зависимости коэффициента усиления и полосы пропускания от напряжения смещения для различных толщин поглощающего и умножающего слоев лавинного фотодиода Ge/Si на длину волны 1310 нм.

Инфракрасная фотоэлектроника как специального, так и двойного назначения является одним из высокотехнологичных и быстро развивающихся направлений современной оптоэлектроники. Особый интерес представляют исследования по созданию высокочувствительных и высокоскоростных фотоприемников для области информационных технологий, систем определения времени полета лидаров, распределения квантовых ключей, дистанционного зондирования газа, квантовой оптики, квантовых вычислений и квантовых коммуникационных приложений [1-2].

В данной работе были спроектированы структуры лавинных фотодиодов (ЛФД) на основе Ge/Si с различной толщиной поглощающего слоя и слоя умножения. В структуре ЛФД при обратном напряжении смещения электрическое поле должно быть значительно ниже поля пробоя ЛФД, а также поле в слой умножения должно быть больше чем поле пробоя ЛФД, чтобы обеспечить ударную ионизацию [2]. Эти устройства имеют цилиндрическую форму диаметром 30 микрон.

В ходе моделирования сравнивались ЛФД на основе Ge/Si с различной толщиной поглощающих слоев Ge (1 мкм, 1,5 мкм, 2 мкм) и умножением на Si (0,5 мкм, 1 мкм, 1,5 мкм) по коэффициенту усиления, полосе пропускания и произведению коэффициента усиления на полосу пропускания, которые существенно влияют на работу устройства.

Расчет характеристик лавинных фотодиодов был проведен с помощью TCAD при освещении с входной оптической мощностью -20 дБм при длине волны 1310 нм. Программа основана на трех основных уравнениях: уравнении Пуассона, уравнениях неразрывности и уравнениях переноса. Уравнение Пуассона связано с изменениями электростатического потенциала в зависимости от локальной плотности заряда. Уравнения неразрывности и переноса описывают процессы переноса, генерации и рекомбинации носителей заряда.

Таким образом, в результате анализа полученных данных оптимальным вариантом по коэффициенту усиления, полосе пропускания и произведению коэффициента усиления на полосу пропускания являются два ЛФД с толщинами слоя поглощения (1 мкм, 1,5 мкм) и слоем умножения 0,5 мкм. Представленные результаты моделирования параметров ЛФД послужат для создания экспериментальных структур и исследования их практических параметров.

Исследование поддержано РФФ № 21-72-10031.

Список литературы

1. F. E. Thorburn, L. L. Huddleston, J. Kirdoda, et.al. High efficiency, planar geometry germanium-on-silicon single-photon avalanche diode detectors // *Advanced Photon Counting Techniques*, vol. 11386, pp. 113860N-1, 2020.
2. M. Huang, S. Li, P. Cai, et.al. Germanium on Silicon Avalanche Photodiode // *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, vol. 24, pp. 1-11, 2018.

МОДЕЛИ КВАНТОВЫХ МЕМРИСТОРОВ НА ЗАХВАЧЕННЫХ ИОНАХ Yb^+

С.Ю. Стремоухов^{1,2,*}, П.А. Форш^{1,2}, К.Ю. Хабарова², Н.Н. Колачевский²

¹Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
119991, Российская Федерация, Москва, ул. Ленинские горы, д. 1

²Физический институт имени П.Н. Лебедева Российской академии наук,
119991 Российская Федерация, Москва, Ленинский проспект, д. 53

*E-mail: sustrem@gmail.com

Обсуждаются концепции реализации квантового мемристора на основе ультрахолодных ионах Yb^+ , захваченных в ловушки Пауля. Анализируются два набора схем уровней иона, отвечающих необходимым значениям времен жизни для реализации мемристивной зависимости населенностей уровней и удобных для осуществления движения населенностей между уровнями за счет резонансного воздействия лазерных полей. Рассматривается также возможность передачи мемристивного состояния по цепочке связанных низкочастотной колебательной модой центра масс ультрахолодных ионов. Предложенные методы создания квантовых мемристоров позволяют создавать многослойные квантовые перцептроны, которые являются основой нейронных сетей.

Термин «мемристор» был введен в начале 1970-х годов в [1]. Основное свойство мемристора заключается в том, что его сопротивление зависит от протекшего заряда, следовательно, это устройство сохраняет память о прошлых состояниях. Интерес к устройствам подобного рода обусловлен возможностью хранения информации без источника питания и выполнения логических операций [2], а также имитации поведения нейронных синапсов [3]. В настоящее время активно развиваются как классические мемристоры и нейроморфные вычислительные устройства на их основе [4], так и квантовые мемристоры («мемристивное поведение» в которых определяется для математических ожиданий квантовых наблюдаемых) на различных платформах [5].

Недавно нами была предложена реализация квантового мемристора на ультрахолодных ионах [6]. В рамках данной работы обсуждаются концепции квантового мемристора на основе ультрахолодных ионов Yb^+ . Показано, что при определенных значениях параметров лазерных импульсов, которые обеспечивают движение населенности выделенных уровней иона, осуществляется «мемристивная зависимость» выходного сигнала от входного (которыми являются населенность одного из уровней в различные моменты времени, соотнесенные с действием двух лазерных полей). Предложено два варианта создания квантового мемристора: на одиночном ультрахолодном ионе и на цепочке связанных низкочастотной колебательной модой центра масс ультрахолодных ионах. Это делает подобные связанные квантовые мемристоры перспективными с точки зрения использования в нейроморфных вычислениях.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-12-00415, <https://rscf.ru/project/24-12-00415/>.

Список литературы

1. L. Chua Memristor—the missing circuit element// IEEE Trans. Circuit Theory, V. 18, pp. 507–519, 1971.
2. J. Borghetti et al. ‘Memristive’ switches enable ‘stateful’ logic operations via material implication.// Nature, V. 464, pp. 873–876, 2010.
3. F. Alibart et al. An organic nanoparticle transistor behaving as a biological spiking synapse// Adv. Funct. Mater, V. 20, pp. 330–337, 2010.
4. A.N. Matsukatova et. al. Scalable nanocomposite parylene-based memristors: Multifilamentary resistive switching and neuromorphic applications// Nano Res. 16, 3207 (2023).
5. C. Hernani-Morales et al. Machine Learning for Maximizing the Memristivity of Single and Coupled Quantum Memristors// Adv. Quantum Techn., 2300294, 2024.

6. С.Ю. Стремоухов и др. Модель связанных квантовых мемристоров на основе пойманного в ловушку одиночного иона $^{171}\text{Yb}^{+//}$ Письма в ЖЭТФ, т. 119, с. 343, 2024.

ИЗМЕРЕНИЕ УРОВНЯ БИТОВЫХ ОШИБОК ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ АДАПТИВНОЙ ОПТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ ЗАДАЧ КВАНТОВЫХ КОММУНИКАЦИЙ

Топоровский В.В.^{1*}, Казанцев С. Ю.², Пчелкина Н. В.², Бушуев Э. Ю.², Никитин А. Н.¹,
Галактионов И. В.¹, Кудряшов А. В.¹

¹Институт динамик геосфер РАН имени М.А. Садовского
119334, Российская Федерация, Москва, Ленинский пр-т., 38к1

*E-mail: topor@activeoptics.ru

²Московский технический университет связи и информатики
111024, Российская Федерация, Москва, ул. Авиамоторная, 8А

В работе рассмотрена зависимость уровня битовых ошибок при распространении лазерного излучения длиной волны 830 нм через атмосферную турбулентную среду в трех режимах: без введения искажений волнового фронта, с генерацией искусственной турбулентности при помощи тепловентилятора и в режиме коррекции aberrаций волнового фронта при помощи биморфного деформируемого зеркала диаметром 50 мм с 31 управляющим элементом. Величина уровня битовых ошибок был оценена путем фокусировки излучения на оптоволоконный вывод, присоединенный к цифровому анализатору BERcut-SDH.

С точки зрения создания линий связи передача информации посредством оптического излучения обладает некоторыми преимуществами в сравнении с традиционными радиочастотными и микроволновыми системами, так как обеспечивается широкая полоса пропускания, низкая задержка, также высокая стойкость к электромагнитным помехам [1, 2]. Более того, подобного рода системы позволяют создать терминалы связи в труднодоступной местности. Тем не менее, при распространении лазерного излучения через турбулентную атмосферу возникают локальные флуктуации показателя преломления, что приводит к появлению изменения (мерцанию) интенсивности, а также перераспределению плотности мощности на мишени. Подобные эффекты влекут к задержкам по скорости приема сигнала, а также к потерям информации. Для подавления влияния атмосферной турбулентности на волновой фронт распространяющегося лазерного излучения используются различные методы: пассивные и активные. К пассивным относят пространственное/временное разнесение и алгоритмизация [3]. Активные методы включают в себя когерентное сложение пучков либо инструменты адаптивной оптики [4-6]. Свою эффективность использования в реальных системах показал последний способ в ряде исследований [7].

Традиционная адаптивная оптическая система представляет собой корректор волнового фронта, анализатор характеристик волнового фронта и блок управления [8]. С точки зрения коррекции aberrаций волнового фронта существует два принципиально разных подхода: метод фазового сопряжения и метод апертурного зондирования (пробных возмущений). Первый метод представляет собой быстрый способ компенсации искажений, однако подразумевает использование датчика волнового фронта в качестве источника обратной связи. В системах передачи лазерного излучения на расстояние широкое применение получили бессенсорные модификации, где улучшение качества передаваемого пучка происходит путем прямой оценки сигнала на мишени после подачи величины единичного напряжения на корректор.

В работе была разработана адаптивная оптическая система с биморфным деформируемым зеркалом в качестве корректора волнового фронта (Рис. 1.). Для получения наилучшей конфигурации электродов деформируемого зеркала методом апертурного зондирования оценивалась величина сигнала с анализатора мощности, подключенного к оптическому волокну, которая была выбрана в качестве критерия эффективности работы системы.

Для измерения коэффициента битовых ошибок использовался коммерчески доступный анализатор Bercut-SDH, применяющийся для диагностики транспортных сетей.

В качестве источника искусственной атмосферной турбулентности на лабораторном стенде использовался тепловентилятор, который располагался между коллимирующей линзой 3 и отражающим зеркалом 4.

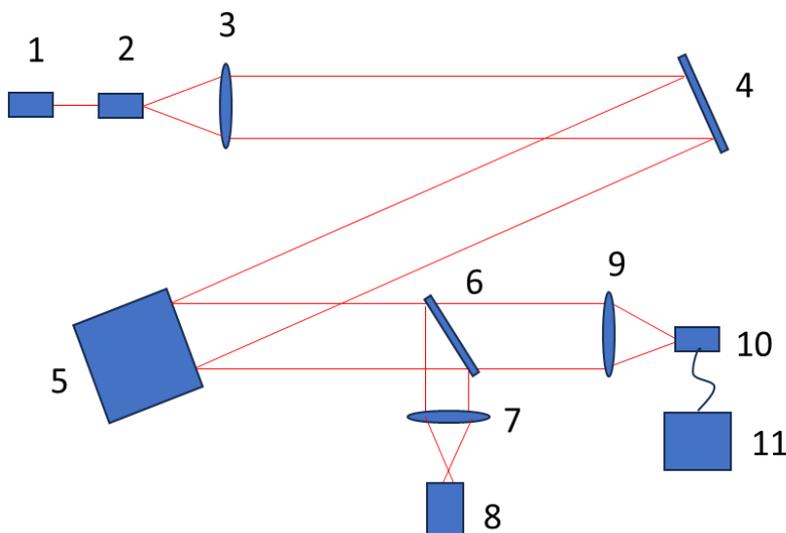


Рис. 1. Принципиальная оптическая схема системы для оценки уровня битовых ошибок при использовании адаптивной оптической системы для коррекции aberrаций волнового фронта лазерного излучения после распространения через атмосферную турбулентность: 1 – трассировочный лазер, 2 – диагностический лазер, 3 – коллимирующая линза, 4 – отражающее зеркало, 5 – адаптивное зеркало, 6 – светоделительная пластина, 7 – согласующая линза, 8 – датчик волнового фронта, 9 – собирающая линза, 10 – приемное волокно, 11 – анализатор BERcut-SDH

Исследование поддержано РФФ №20-19-00597.

Список литературы

1. Z. Qu, I. B. Djordjevic. 500 Gb/s free-space optical transmission over strong atmospheric turbulence channels // *Optics Letters*, vol. 41, pp. 3285–3288, 2016.
2. Z. Li, J. Cao, X. Zhao, W. Liu. Combinational-deformable-mirror adaptive optics system for atmospheric compensation in free space communication // *Optics Communications*, vol. 320, pp. 162–168, 2014.
3. J. Churnside. Aperture averaging of optical scintillation in the turbulent atmosphere // *Appl. Opt.*, vol. 30, pp. 1982–1994, 1991.
4. V. Toporovsky, V. Samarkin, A. Kudryashov, et.al. Robust stack-array deformable mirror for laser beam control // *Proc. SPIE*, vol. 11987, pp. 119870M, 2022.
5. V. Samarkin, A. Alexandrov, I. Galaktionov et al. Wide-Aperture Bimorph Deformable Mirror for Beam Focusing in 4.2 PW Ti:Sa Laser // *Appl. Sci.*, vol. 12, pp. 1144, 2022.
6. V. Toporovsky, V. Samarkin, A. Kudryashov, I. Galaktionov, A. Panich, A. Malykhin. Investigation of PZT Materials for Reliable Piezostack Deformable Mirror with Modular Design // *Micromachines*, vol. 14, pp. 2004, 2023.
7. Y. Wang, H. Xu, D. Li, R. Wang, C. Jin, X. Yin, S. Gao, Q. Mu, L. Xuan, Z. Cao. Performance analysis of an adaptive optics system for free-space optics communication through atmospheric turbulence // *Scientific Reports*, vol. 8, pp. 1124, 2018.
8. A. Rukosuev, A. Nikitin, V. Belousov, J. Sheldakova, V. Toporovsky, A. Kudryashov. Expansion of the Laser Beam Wavefront in Terms of Zernike Polynomials in the Problem of Turbulence Testing // *Appl. Sci.*, vol. 11, pp. 12112, 2021.

ГЕТЕРОДИННОЕ ДЕТЕКТИРОВАНИЕ С ПОВТОРНОЙ ФАЗОВОЙ МОДУЛЯЦИИ В СХЕМЕ НА БОКОВЫХ ЧАСТОТАХ ДЛЯ КВАНТОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КЛЮЧА НА НЕПРЕРЫВНЫХ ПЕРЕМЕННЫХ

И. М. Филипов^{1*}, В. В. Чистяков¹

¹Университет ИТМО

197101, Российская Федерация, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., д. 49, лит. А.

*E-mail: imfilipov@itmo.ru

Представлен метод детектирования двух квадратур одновременно для квантового распределения ключа на непрерывных переменных для многомодовых когерентных состояний, получаемых в результате фазовой модуляции. В основе представленного метода лежит повторная фазовая модуляция на стороне получателя на частоте, отстоящей на величину промежуточной частоты гетеродинного детектирования от частоты отправителя. Проведено сравнение выхода предложенного метода с ранее существующими методами гетеродинного детектирования многомодовых когерентных состояний.

Квантовое распределение ключа (далее – КРК) является технологией, которая позволяет распределить идентичные случайные последовательности между двумя удаленными сторонами, основываясь на физических законах [1]. Протоколы КРК можно разделить на протоколы на дискретных переменных и непрерывных переменных. Для детектирования квантовых состояний в протоколах КРК на непрерывных переменных используются гомодинное и гетеродинное детектирование, ограниченные дробовым шумом.

В рамках данной работы предлагается новый метод гетеродинного детектирования многомодовых когерентных состояний на боковых частотах фазово-модулированного излучения, который не имеет ограничения снизу частоты модуляции из-за спектральной фильтрации, что характерно для схемы, описанной в [2, 3]. Предлагаемая схема гетеродинного детектирования представлена на (рис. 1). Оптическая часть схемы детектирования идентична схеме гомодинного детектирования, предложенной в [2]. Основное отличие состоит в смещении частоты электрического сигнала при повторной фазовой модуляции в блоке получателя.

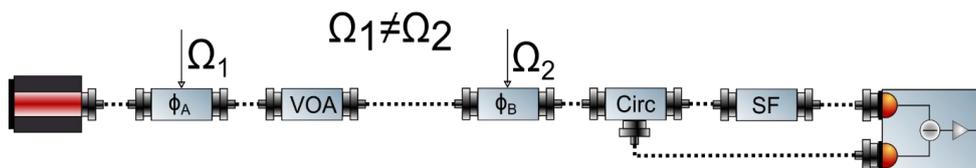


Рис. 1. Схема гетеродинного детектирования многомодовых когерентных состояний на боковых частотах фазово-модулированного излучения, где VOA – перестраиваемый аттенюатор, ϕ_A и ϕ_B – фазовые модуляторы отправителя и получателя соответственно, Circ – циркулятор, SF – спектральный фильтр, отражающий боковые частоты

Контроль промежуточной частоты детектирования осуществляется за счет изменения частоты повторной фазовой модуляции и определяется по формуле:

$$\Delta\omega = \Omega_2 - \Omega_1, \quad (1)$$

где $\Omega_{1,2}$ – частоты фазовой модуляции на стороне отправителя и получателя соответственно.

Согласно [2] выход балансного детектора в случае гомодинного детектирования можно описать формулой:

$$V = GE_0^2(1 - J_0^2(m)), \quad (2)$$

где G – усиление преобразования, E_0 – амплитуда поля, J_0 – функция Бесселя первого рода нулевого порядка, m – эффективный индекс модуляции.

В свою очередь эффективный индекс модуляции выражается через индексы модуляции отправителя и получателя и разности фаз:

$$m = \sqrt{m_A^2 + m_B^2 + 2m_A m_B \cos(\varphi_A - \varphi_B)}, \quad (3)$$

где $m_{A,B}$ – индексы модуляции отправителя и получателя соответственно, $\varphi_{A,B}$ – фаза отправителя и получателя соответственно.

В случае, если фаза получателя зависит от времени следующим образом:

$$\varphi_B(t) = \Delta\omega t + \varphi_0,$$

где φ_0 – начальная фаза получателя, а $\Delta\omega$ – промежуточная частота согласно формуле (1), t – время, то эффективный индекс модуляции (3) представим следующим образом:

$$m(t) = \sqrt{m_A^2 + m_B^2 + 2m_A m_B \cos(\Delta\omega t - \varphi_A + \varphi_0)}, \quad (4)$$

На (рис. 2) приведен график сравнения выходов гетеродинного детектирования для одинаковой промежуточной частоты в случае стандартного гетеродинного детектирования за счет 3 дБ светоделителя [4], метода на основе спектрального разделения без повторной фазовой модуляции из работ [2, 3] и предложенного метода детектирования, используя формулы (2) и (4). Можно видеть, что выход предложенной схемы с повторной фазовой модуляции схож с существующими методами и позволяет получить желаемую промежуточную частоту, что свидетельствует о возможности проведения гетеродинного детектирования.

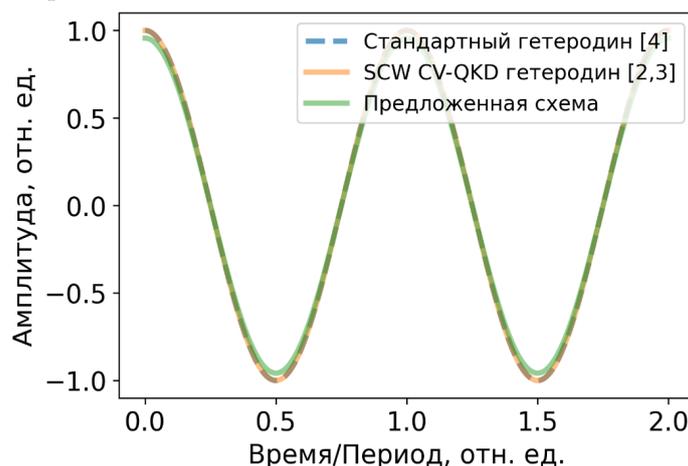


Рис. 2. Сравнение выхода гетеродинного детектирования в случае классического гетеродина [4] (голубая линия), схемы со спектральным разделением боковых частот [2,3] (оранжевая линия) и предложенной схемы детектирования многомодовых когерентных состояний на боковых частотах фазово-модулированного излучения (зеленая линия)

Список литературы

1. Pirandola S. et al. Advances in quantum cryptography //Advances in optics and photonics. – 2020. – Т. 12. – №. 4. – С. 1012-1236.
2. Samsonov E. et al. Coherent detection schemes for subcarrier wave continuous variable quantum key distribution //JOSA B. – 2021. – Т. 38. – №. 7. – С. 2215-2222.
3. Goncharov R. K. et al. Heterodyne-based subcarrier wave quantum cryptography under the chromatic dispersion impact //Наносистемы: физика, химия, математика. – 2021. – Т. 12. – №. 2. – С. 161-166.
4. Su Z. et al. Experimental demonstration of phase-sensitive multimode continuous variable quantum key distribution with improved secure key rate //Photonics Research. – 2023. – Т. 11. – №. 11. – С. 1861-1869.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРАКТИЧЕСКОЙ РЕАЛИЗАЦИИ АТАКИ С ВРЕМЕННЫМ СДВИГОМ ЗОНДИРУЮЩИХ ИМПУЛЬСОВ НА СИСТЕМУ КВАНТОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КЛЮЧЕЙ НА БОКОВЫХ ЧАСТОТАХ

М. Е. Геллерт^{1*}, Б. А. Наседкин², В. В. Чистяков¹

¹Университет ИТМО

197101, Российская Федерация, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., д.49, лит. А

*E-mail: mihailgellert@yandex.ru

На данный момент можно найти много работ, исследующих атаки с временным сдвигом на более простых системах, однако система на боковых частотах также уязвима к такому типу атак. Поэтому основной целью данной работы было разработать атаку на систему КРК БЧ, использующую временной сдвиг. Также планировалось провести экспериментальный анализ возможности проведения такой атаки.

Наиболее безопасным способом передачи информации на данный момент являются системы квантового распределения ключей (КРК). В таких системах безопасность гарантируется фундаментальными законами квантовой механики [1]. Хотя теоретически ряд протоколов КРК являются безопасными [2-4], практические реализации данных систем могут иметь уязвимости, которыми может воспользоваться злоумышленник для извлечения информации о ключе [5-6]. Одной из таких уязвимостей является временное окно чувствительности детектора одиночных фотонов (ДОФ). В настоящее время многие системы используют оптические волокна в качестве квантовых каналов и работают на телекоммуникационных длинах волн. Обнаружение одиночных фотонов в таких системах часто осуществляется лавинным фотодиодом InGaAs. Чтобы минимизировать темновые отсчеты, данный тип детекторов работает в режиме стробирования. Таким образом, изменив время попадания импульса на детектор получателя, можно управлять информацией, регистрируемой получателем. Также управление вероятностью детектирования можно реализовать, используя мультифотонные импульсы. В данной работе производились исследования возможности проведения атаки с временным сдвигом на систему квантового распределения ключей на боковых частотах (КРК БЧ).

С этой целью в данной работе была экспериментально проверена зависимость вероятности детектирования ДОФ от временного сдвига (рис. 1). А также зависимость вероятности детектирования ДОФ от среднего количества фотонов в импульсе

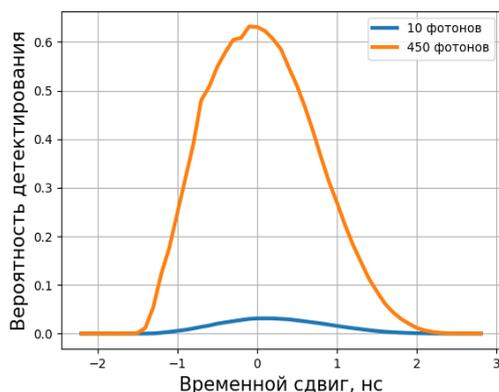


Рис. 1. График зависимости вероятности срабатывания ДОФ от временного сдвига

Также в данной работе был предложен алгоритм проведения атаки:

- 1) Ева перехватывает сигнал, отправленный Алисой.
- 2) Ева проводит измерения перехваченного сигнала на своей стороне.
- 3) Ева отправляет излучение с определенным временным сдвигом и количеством фотонов на боковых частотах. Число фотонов и временной сдвиг определяют-

ся так, чтобы в случае конструктивной интерференции вероятность срабатывания стремилась к 100%, а в случае деструктивной к 0%

4) Ева отправляет подготовленное излучение Бобу.

Для проведения наиболее эффективной атаки в данной работе была найдена поверхность иллюстрирующая зависимость от количества фотонов и временного сдвига (рис. 2), которую можно использовать для поиска оптимальных параметров.

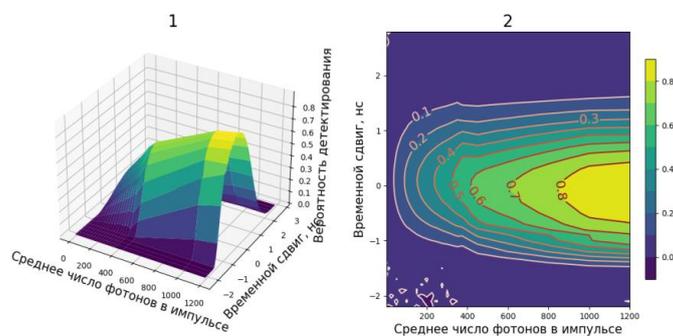


Рис. 2. График зависимости вероятности срабатывания детектора от среднего числа фотонов в импульсе и временного сдвига. (1) – трехмерное представление, (2) – контурный график

Также в данной работе на эксперименте и при помощи моделирования была рассмотрена возможность применения атаки к системам КРК БЧ

Полученный результат говорит о возможности использования атаки данной по отношению к системам квантового распределения ключей на боковых частотах.

Список литературы

1. Bennett C. H., Brassard G. Quantum cryptography: Public key distribution and coin tossing // Theoretical computer science. – 2014. – Т. 560. – С. 7-11.
2. Lo H. K., Chau H. F. Unconditional security of quantum key distribution over arbitrarily long distances // science. – 1999. – Т. 283. – №. 5410. – С. 2050-2056.
3. Shor P. W., Preskill J. Simple proof of security of the BB84 quantum key distribution protocol // Physical review letters. – 2000. – Т. 85. – №. 2. – С. 441.
4. Gottesman D. et al. Security of quantum key distribution with imperfect devices // International Symposium on Information Theory, 2004. ISIT 2004. Proceedings. – IEEE, 2004. – С. 136.
5. Brassard G. et al. Limitations on practical quantum cryptography // Physical review letters. – 2000. – Т. 85. – №. 6. – С. 1330.
6. Sun S., Huang A. A review of security evaluation of practical quantum key distribution system // Entropy. – 2022. – Т. 24. – №. 2. – С. 260.
- 7.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОТОННО-ИНТЕГРИРОВАННОГО 90-ГРАДУСНОГО ОПТИЧЕСКОГО ГИБРИДА В ПРИМЕНЕНИИ К СИСТЕМЕ КВАНТОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КЛЮЧА НА НЕПРЕРЫВНЫХ ПЕРЕМЕННЫХ

Ф. М. Гончаров^{1*}, Р. К. Гончаров¹, Ф. Д. Киселев¹

¹Университет ИТМО

197101, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Кронверкский проспект, д.49, литер А.

*E-mail: fedor_goncharov@itmo.ru

Интеграция системы квантового распределения ключа на непрерывных переменных (КРК НП) ведет к широкому внедрению этой технологии в различные области жизни. 90-градусный оптический гибрид играет ключевую роль в гетеродинном детектировании, применяемом в КРК НП. В настоящей работе рассматривается способ учета влияния данного устройства, реализованного в виде фотонной интегральной схемы (ФИС) на скорость генерации, а также приводится формула для расчета коэффициента усиления синфазного сигнала (CMRR), учитывающего несбалансированность как оптического гибрида, так и балансных детекторов совместно.

Квантовое распределение ключа (КРК) позволяет безопасно сгенерировать ключ двум легитимным пользователям вне зависимости от действий злоумышленника [1]. Для широкого внедрения данной технологии естественным развитием систем КРК является их реализация в виде фотонных интегральных схем, поскольку они позволяют организовать масштабируемое и дешевое производства миниатюрных и стабильных устройств. Протоколы, основанные на непрерывных переменных (НП) [1], наиболее перспективны для интеграции на чип ввиду когерентных методов детектирования квантовых состояний, позволяющих измерять квадратурные составляющие поля, в которых кодируется информация. Гетеродинный метод детектирования, в отличие от гомодинного, позволяет измерять одновременно две квадратуры. В такой конфигурации важным элементом становится 90-градусный оптический гибрид.

90-градусный оптический гибрид – это устройство, имеющее два входа под сигнал и так называемый локальный осциллятор (ЛО) и четыре выхода, подключаемые к двум балансным детекторам. При реализации гибрида на ФИС чаще всего используют светоделители, основанные на эффекте многомодовой интерференции (ММИ) Устройство и поля на его выходах представлены на рис. 1а. В настоящей работе проведено моделирование интегрированного ММИ 90-градусного оптического гибрида на Si₃N₄ [2] технологической платформе, отличающейся ультранизкими потерями и широким окном прозрачности. Устройство и поля на его выходах представлены на рис. 1а. Было проведено моделирование гибрида проведено методом распространения собственных мод (рис. 1б). Выходными данными моделирования является матрица S-параметров.

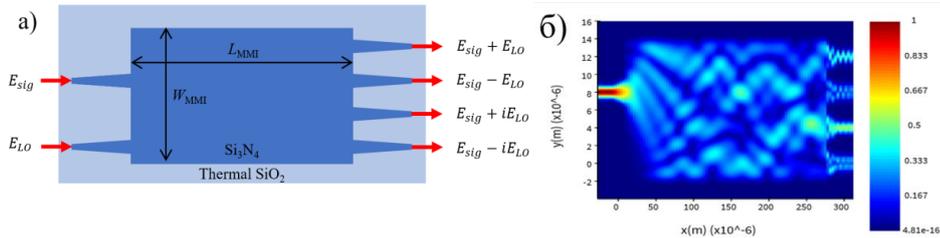


Рис. 1. а) Схематичное изображение Si₃N₄ ФИС ММИ 90-градусного оптического гибрида с обозначением входных и выходных полей; б) Результат моделирования распределения поля 90-градусного оптического гибрида

Основной задачей работы была оценка влияния результатов моделирования 90-градусного гибрида на скорость генерации секретного ключа КРК НП, которая зависит от пропуска и избыточного шума системы КРК НП [1]. Потери, вносимые оптическим гибридом необходимо учитывать выше 6 дБ, поскольку потери на делении сигнала уже учтены в теоретической модели. Также для расчетов стойкости выбирается канал с наибольшими потерями. В рассмотренной модели они составили 0,5 дБ для 1550

нм. Кроме этого, гибрид влияет посредством величины CMRR. При этом в теоретической модели влияние гибрида не учитывается, а берется в расчет аналогичная величина для детектора [1]. В настоящей работе оба подхода были объединены в единую формулу:

$$CMRR_{full} = -20 \log_{10} \left| \frac{P_i g - P_j (g + g_s)}{P_i g + P_j (g + g_s)} \right|,$$

где P_i и P_j – мощности на выходах i и j , g и g_s – коэффициенты усиления квадратурной и синфазной составляющей, соответственно.

Избыточный шум от CMRR рассчитывается как [1]:

$$\xi_{CMRR} = \frac{\mu}{4CMRR^2} \left(\frac{hfV_{mod}^2}{4\tau P_{LO}} RIN_{sig} B + \frac{\tau}{hf} P_{LO} RIN_{LO} B \right),$$

где $\mu=2$ для гетеродина, f – частота излучения, V_{mod} – квадратурная дисперсия, τ – длительность импульса, P_{LO} – мощность ЛО, RIN_{sig} и RIN_{LO} – шум лазера для сигнала и ЛО, B – полоса лазера.

Также в модели для расчета скорости генерации ключа учитывался шум детектора. Результаты для различных длин канала и мощностей ЛО представлены на рис. 2.

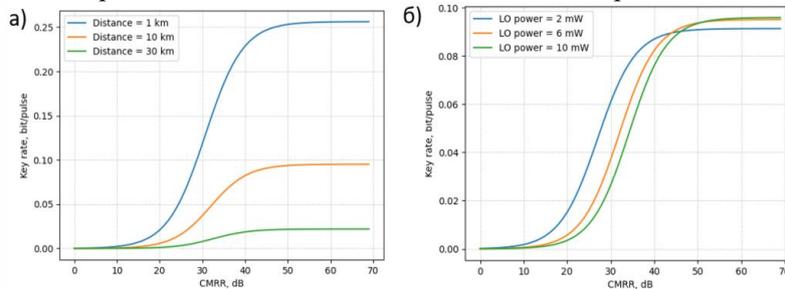


Рис. 2. Скорость генерации ключа в зависимости от полного CMRR для различной а) длины канала; б) мощности ЛО

Кроме этого, проведено сравнение скорости генерации ключа для CMRR, включающих в себя только оптический гибрид, только детектор, и полный CMRR (рис.3)

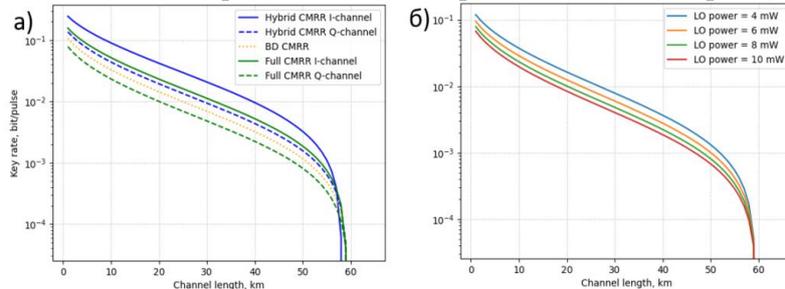


Рис. 3. Скорость генерации ключа в зависимости от длины канала для различных а) моделей CMRR; б) мощности ЛО

Таким образом, в результате работы был приведен метод более точного расчета скорости генерации секретного ключа, учитывающий CMRR и гибрида, и балансного детектора, а также продемонстрирован метод учета проведенного моделирования ФИС гибрида в теоретической модели для расчета скорости генерации ключа КПК НП.

Исследование поддержано РФФ №24-11-00398.

Список литературы

1. Laudenbach F. et al. Continuous-variable quantum key distribution with Gaussian modulation—the theory of practical implementations //Advanced Quantum Technologies. – 2018. – Т. 1. – №. 1. – С. 1800011.
2. Yu J. et al. High-performance 90 hybrids based on MMI couplers in Si3N4 technology //Optics Communications. – 2020. – Т. 465. – С. 125620.

ВЛИЯНИЕ МОДИФИКАЦИИ ЗАЩИТНОЙ ОБОЛОЧКИ ВОЛОКНА В ПЕРЕДАТЧИКЕ КРК, СОДЕРЖАЩЕМ АТТЕНЮАТОР С ПРОДОЛЬНЫМ СМЕЩЕНИЕМ

С. В. Алфёров, М. В. Орлова, М. М. Швыгина*

АО «ИнфоТеКС»
127273, г. Москва, ул. Отрадная, дом 2Б, строение 1
*E-mail: Maria.Shvygina@infotecs.ru

В данной работе рассмотрено влияние модификации защитной оболочки волокна на ослабление в оптическом тракте передатчика КРК, содержащего аттенюатор с продольным смещением.

Традиционно в системах КРК используются оптические импульсы, ослабленные до квазиоднофотонного уровня. Ослабление осуществляется при помощи оптического аттенюатора. Существуют различные типы и конфигурации аттенюаторов, например, аттенюаторы, в которых ослабление достигается за счет поглощения, или за счет потерь при согласовании ввода-вывода света в волокно [1]. Последний вариант, представляют собой аттенюаторы на основе смещения волокон в продольном или поперечном направлении. На наш взгляд, аттенюаторы со смещением являются наиболее распространенными в силу своей простоты, дешевизны и широкого диапазона вносимых потерь (ослабление), причем в случае аттенюатора с поперечным смещением (сварка волокон) ослабление может задаваться пользователем в зависимости от смещения.

Известна атака с лазерным повреждением компонентов (LDA), направленная на модификацию параметров оптических элементов. Модификация приводит к увеличению пропускания оптического тракта, возрастанию среднего числа фотонов, что негативно сказывается на секретности квантового ключа. Указанная модификация производится с помощью мощного излучения, однако, на наш взгляд, возможен и другой способ.

Распространение оболочечных мод зависит [2] от соотношения показателей преломления на границе раздела «оболочка-защитное покрытие». Обычно показатель преломления защитного покрытия подбирают таким образом, чтобы на указанной границе полное внутреннее отражение (ПВО) не возникало, вследствие чего излучение в оболочке затухает. В работе [1] было показано, что в сварном аттенюаторе защитная оболочка играет роль фильтра оболочечных мод и при её удалении среднее число фотонов на выходе из передатчика может возрасти из-за наличия мод оболочки. Поэтому, если злоумышленник сможет произвести указанную модификацию волокна и создать условия для ПВО в оболочке, это может привести к уязвимости системы КРК.

Целью данной работы является исследование влияния модификации защитной оболочки на ослабление в оптическом тракте передатчика КРК, содержащего аттенюатор с продольным смещением.

Аттенюаторы с продольным смещением бывают двух типов: Female-Female и Male-Female [3]. В данной работе был исследован первый тип номиналом 20 дБ, состоящий из двух керамических втулок “female” между которыми установлено ограничительное кольцо, которое формирует воздушный зазор и не позволяет торцам волокон соприкасаться. Для исследования использовались стандартные одномодовые волокна с диаметром сердцевины 9 мкм, оболочки 125 мкм и защитным покрытием 250 мкм. В качестве источника излучения использовался импульсный лазер 1550 нм, для детектирования проходящего излучения применялся измеритель мощности на основе InGaAs.

Схема эксперимента показана на (рис. 1). Сначала (рис. 1а) измерялось ослабление в оптическом тракте передатчика КРК (вводящее и выводящее волокна, аттенюатор) без удаленного защитного покрытия на выводящем волокне. В остальных случаях (рис. 1б-1е) производились измерения с разной степенью удаления покрытия на выводящем волокне (после аттенюатора).

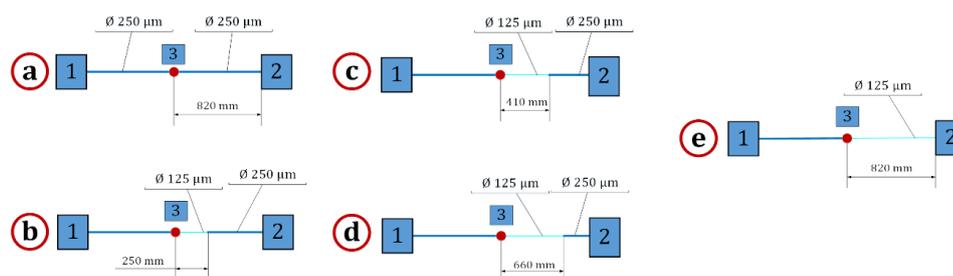


Рис 1. Схема эксперимента. 1- лазер, 2 –измеритель мощности, 3 – исследуемый аттенюатор

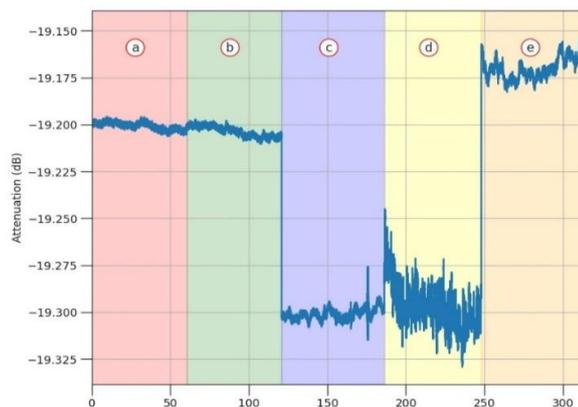


Рис 2. Изменение ослабления по мере удаления защитного покрытия

На (рис. 2) представлены результаты измерения ослабления излучения в зависимости от длины участка без защитного покрытия (этапы указаны согласно (рис. 1)). Отметим, что в отличие от сварного волоконного аттенюатора [1], однонаправленного тренда изменения мощности не наблюдается, кроме того изменение ослабления значительно меньше и сопоставимо с типовыми потерями в разъемном соединении.

Возможной причиной отличия является конструкция аттенюатора. Сплавной волоконный аттенюатор основан на *поперечном смещении* волокна при сварке. При таком смещении и последующей сварке, сердцевина одного волокна сваривается с частью оболочки другого волокна, что способствует возбуждению оболочечных мод. При удалении защитного покрытия оболочечные моды, возникшие после аттенюатора, перестают затухать и это отражается в увеличении регистрируемой мощности. В аттенюаторе с *продольным смещением*, за счет расходимости пучка, часть излучения из сердцевины одного волокна вводится в оболочку второго, но доля излучения, попадающего в оболочку после аттенюатора, значительно меньше по сравнению со сплавным аттенюатором.

Таким образом, при наличии доступа к оптическим компонентам системы КРК, модификация структуры волокна приводит к небольшому изменению ослабления. В реальных условиях доступ к оборудованию КРК ограничен, поэтому описанная модификация не несет уязвимости системам КРК.

Список литературы

1. S.V. Alferov, M.V. Orlova, M.M. Shvygina. Investigation of the effect of attenuator made by fusion splicing offset fiber ends on the excitation of cladding modes in a single-mode fiber // 7th International School on Quantum Technologies, pp. 70-71, 2024.
2. Оболочечные моды волоконных световодов и длиннопериодные волоконные решетки / О.В. Иванов, С.А. Никитов. Издательство Физматлит, стр.17, 2012.
3. A. Huang, R.Li, and V. Makarov. Laser-damage attack against optical attenuators in quantum key distribution // Ph. Rev. App., vol.13 (034017), 2020.

КОНТРОЛЬ ПОЗИЦИОНИРОВАНИЯ ФАЗОВОГО МОДУЛЯТОРА ВНУТРИ ИНТЕРФЕРОМЕТРА САНЬЯКА В СИСТЕМАХ КРК

К. В. Степанов^{1*}, А. В. Борисова¹, А. Г. Втюрина¹

¹Акционерное общество «Информационные технологии и коммуникационные системы»
127273, Российская Федерация, Москва, ул. Отрадная, 2Б стр. 1
*E-mail: Konstantin.Stepanov@infotecs.ru

Предложен обладающий высокой точностью и повторяемостью способ измерения разницы времени распространения излучения во встречных направлениях до модулирующего устройства внутри интерферометра Саньяка в системах квантового распределения ключей (КРК).

Кодирование квантовых состояний в ряде систем КРК осуществляется путем модуляции фазы, используя электрооптические фазовые модуляторы (ФМ). Известны системы КРК, в которых ФМ помещается в интерферометр Саньяка таким образом, что оптические длины путей от светоделителя интерферометра Саньяка до ФМ по и против часовой стрелки неодинаковы, то есть ФМ расположен асимметрично. В работах [1,2] было показано, что в такой оптической схеме путем выбора коэффициента деления светоделителя, разности длин оптический путей до ФМ и параметров электрических импульсов, подаваемых на ФМ, можно реализовать модуляцию квантовых состояний по фазе, поляризации или интенсивности. В таких интерферометрах важным параметром, требующим контроля, является разность задержек между встречными импульсами, достигающими ФМ.

В области волоконно-оптических распределенных датчиков известны способы измерения расстояния, а также связанные с ним задержки до источника вибрационных, акустических или температурных воздействий на базе интерферометра Саньяка [3,4]. Для систем подобного типа характерны длины волокна в интерферометре Саньяка порядка десятков-сотен км, а погрешность соответствует десяткам метров, то есть сотням нс. В свою очередь, для систем КРК характерны меньшие расстояния и требуется более высокая точность. Так, импульсы, подаваемые на фазовый модулятор, согласуются с лазерными импульсами и составляют порядка единиц нс. При этом погрешность позиционирования фазового модулятора в интерферометре Саньяка должна составлять порядка нескольких десятков - сотен пс.

Для измерения времени распространения встречного излучения до ФМ в интерферометре Саньяка была предложена схема (рис. 1). В данной схеме анализируется сигнал, сформированный от непрерывного излучения лазера, проходящего через интерферометр Саньяка при прикладывании напряжения к ФМ.

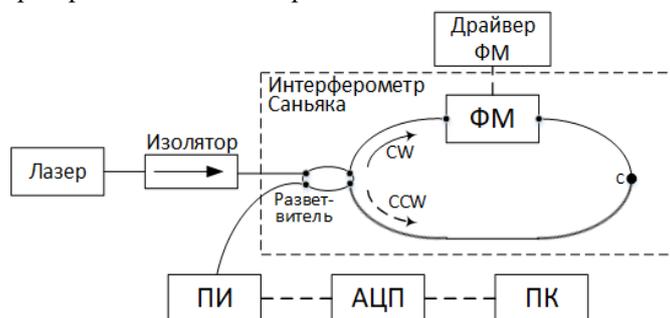


Рис. 1. Схема измерения разницы времени распространения излучения до ФМ в интерферометре Саньяка по и против часовой стрелки

При асимметричном расположении фазового модулятора внутри интерферометра Саньяка при подаче на него электрического импульса на выходе интерферометра наблюдается модуляция интенсивности вследствие возникновения разности фаз интерферирующих волн. Один мгновенный сдвиг фазы вызывает появление разности фаз между интерферирующими волнами в два момента времени с интервалом, соответствующим

шим разнице времени распространения излучения до фазового модулятора по и против часовой стрелки. При подаче на ФМ электрического импульса длительностью $t_{pulse} < |t_{CCW} - t_{CW}|$ на выходе интерферометра Саньяка получим два импульса изменения интенсивности, длительность каждого из которых t_{pulse} , причем импульсы следуют с интервалом $|t_{CCW} - t_{CW}|$ и могут быть зарегистрированы с высокой точностью высокоскоростными рп-детекторами и АЦП или осциллографом.

В качестве примера было проведено измерение разности задержек при подаче на ФМ электрических импульсов длительностью 2 нс с частотой 62,5 МГц (период 16 нс). В результате были получены осциллограммы, показанные на рисунке 2. Для повышения точности сигнал усреднялся по 25 точкам и затем вычислялась разница между локальными максимумами. В проведенном эксперименте разница времени распространения составила $\tau = 4,12$ нс с погрешностью не выше $\Delta\tau = 40$ пс. Погрешность данного метода ограничивается быстродействием измерительного оборудования: шириной полосы осциллографа и фотодетектора. Кроме того, по сравнению с ручным измерением данный метод удобно использовать при диагностике интерферометра, если доступ к петле Саньяка ограничен.

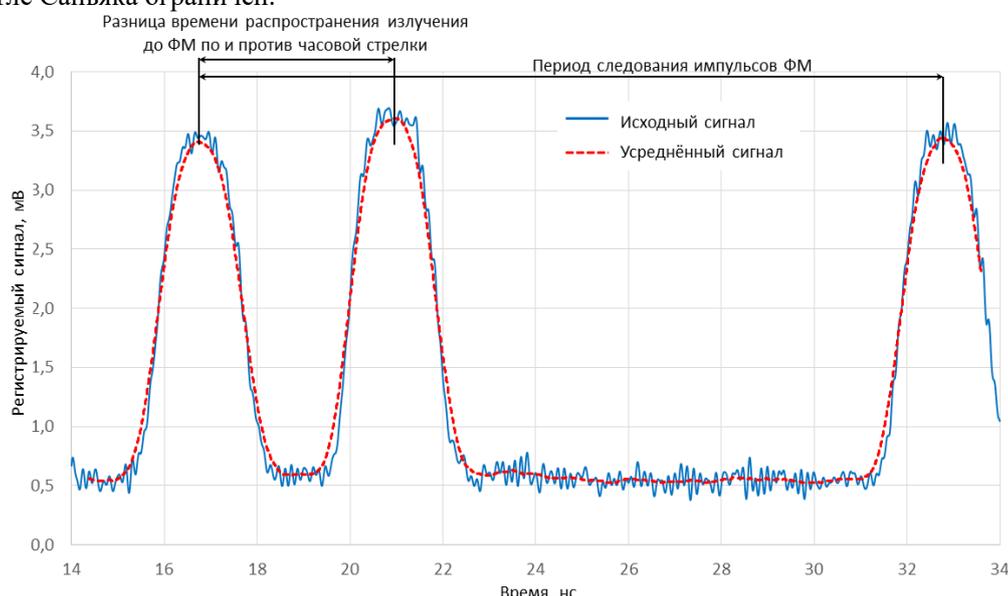


Рис. 2. Зарегистрированный осциллографом сигнал за период следования электрических импульсов: а) исходный сигнал, без усреднения; б) усреднение по 25 точкам.

Список литературы

1. Roberts G.L., Pittaluga M., Minder M., Lucamarini M., Dynes J.F., Yuan Z.L., Shields A.J. Patterning-effect mitigating intensity modulator for secure decoy-state quantum key distribution // *Opt. Lett.* 2018. V. 43. P. 5110-5113. <https://doi.org/10.1364/OL.43.005110>
2. Алфёров С.В., Паргачёв И.А. Способ и устройство генерации квантовых состояний в системе квантового распределения ключей с фазовым кодированием // Патент РФ № RU2777422C1. Бюл. 2022. № 22.
3. Dakin, J. P., Pearce, D. A. J., Strong, A. P., & Wade, C. A. A Novel Distributed Optical Fibre Sensing System Enabling Location Of Disturbances In A Sagnac Loop Interferometer // *Fiber optic and laser sensors V.* SPIE. 1988. V. 838. P. 325-328. <https://doi.org/10.1117/12.942527>
4. Zhirnov A.A., Choban T.V., Stepanov K.V., Koshelev K.I., Chernutsky A.O., Pnev A.B., Karasik V.E. Distributed acoustic sensor using a double Sagnac interferometer based on wavelength division multiplexing // *Sensors.* 2022. V. 22. № 7. P. 2772. <https://doi.org/10.3390/s2207277>

Секция 7

**КРЕАТИВНЫЕ ИНДУСТРИИ
ФОТОНИКИ**

«ЦИФРОВОЙ» БРИЛЛИАНТ КАК ИНВЕСТИЦИОННЫЙ ФИНАНСОВЫЙ ИНСТРУМЕНТ: РАЗРАБОТКА ЛАЗЕРНОЙ ТЕХНОЛОГИИ НЕВИДИМОЙ ФОТОЛОМИНЕСЦЕНТНОЙ МИКРОМАРКИРОВКИ ДЛЯ ГАРАНТИРОВАННОЙ ЦИФРОВОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ БРИЛЛИАНТОВ

С. И. Кудряшов*, А. О. Левченко, П. А. Данилов, Н. А. Смирнов

*Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинский пр-кт, д. 53*

*E-mail: kudryashovsi@lebedev.ru

Впервые в мире реализована лазерная технология невидимой фотоломинесцентной микромаркировки в объеме бриллиантов для их объективного цифрового трейсинга в качестве инвестиционного финансового инструмента, основанная на новых физических принципах высокочувствительной количественной оптической идентификации и направленной лазерной модификации основных азотных центров. Данная технология маркировки, которая, в отличие от всех аналогов, не портит камень и не снижает его рыночную стоимость, активно внедряется крупнейшей в мире добывающей компанией АК «АЛРОСА».

Добыча и продажа алмазов АК «АЛРОСА» (ПАО) (крупнейшая в мире компания отрасли) дают 1% ВВП РФ. Однако, в последнее время вырос процент синтетических алмазов, выдаваемых за природные недобросовестными торговцами. Экспертиза алмазов в геммологических лабораториях сложна и неоднозначна т.к. нет стандартов отнесения камней к натуральным или искусственным. Мошенник может подменить камень при обратном выкупе на синтетический или дешевый природный, поэтому бриллианты ограниченно используются как инвестиционный инструмент. Тем не менее, АЛРОСА продвигает инвестиционные бриллианты [1]. Разработка научной группы ФИАН решает указанную проблему [2], как и проблему контрафактных, синтетических, и «кровяных» алмазов.

Технология позволяет записать в объеме камня с помощью фемтосекундного лазера информацию, напр. в виде QR- или dot- кода, и т.п. Метка «неинвазивна» и состоит из микронных областей, в которых повышено содержание атомарных дефектов решетки. Метка «работает» на атомарном уровне и не проявляется макроскопически, в отличие от аналогов, где в кристалле фактически выжигаются области, пусть и малого размера. Детектировать метку можно только по локальному росту флуоресценции при специальном лазерном возбуждении. Алмазы с метками отправлялись инкогнито на экспертизы в ведущие мировые геммологические центры – Геммологический Центр МГУ и Gemological Institute of America (GIA), и ни разу в них не смогли распознать даже сам факт наличия метки. Метка не портит камень, не снижает его стоимость, но абсолютно надежно идентифицирует его. Технология внедряется в АК «АЛРОСА», проходит стадия опытной эксплуатации.

Было также показано, что фемтосекундные лазерные технологии позволяют также управлять изменением окраски алмазов [3], графитизацией [4] и катастрофическим повреждением кристаллической решетки алмазов [5].

Исследование поддержано РФФ №21-79-30063.

Список литературы

1. <https://invest.alrosa.ru/>
2. youtu.be/X3Z_jcWowks
3. S. I. Kudryashov et al. Permanent optical bleaching in HPHT-diamond via aggregation of C-and NV-centers excited by visible-range femtosecond laser pulses //Carbon. – 2023. – Т. 201. – С. 399-407.
4. Д.А. Помазкин, П.А. Данилов, С.И. Кудряшов, В.П. Мартовицкий, И.Д. Матяев, Е.А. Васильев, КР-микроспектроскопия напряжений, возникающих при фемтосекундном лазерном микропробое алмаза //Оптика и спектроскопия. – 2024. – Т. 132. – С. 75-78.

5. S. I. Kudryashov et al. Two-hole “desorption” mechanism of interstitial-vacancy pair generation visualized by avalanche-like color-center yield in synthetic diamond under ultrashort-pulse laser exposure //Optical Materials. – 2024. – T. 151. – C. 115429.

ОПТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИЗУЧЕНИЯ СПИНОВОЙ ДИНАМИКИ В КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

Т. С. Шамирзаев

*Институт Физики Полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН,
630090, Российская Федерация, Новосибирск, пр. Лаврентьева, 13*

E-mail: sha_tim@mail.ru

Представлен обзор механизмов спиновой поляризации электронной подсистемы в немагнитных квантовых точках при оптическом возбуждении. Рассмотрено влияние слабого магнитного поля и Г-Х смешивания электронных состояний на оптическое выстраивание и оптическую ориентацию экситонов. Обсуждается эффект спиновой блокады квантовых точек и динамическая спиновая поляризация, обусловленная сверхтонким взаимодействием.

В отсутствие внешних воздействий спиновая подсистема немагнитных гетероструктур, находится в состоянии термодинамического равновесия, т.е. спиновая поляризация в отсутствует. Для изучения спиновой динамики спиновую подсистему необходимо вывести из состояния равновесия и это можно сделать либо традиционными методами - оптической ориентации или выстраивания [1] и тепловой спиновой поляризации в магнитном поле [2], либо недавно предложенном нами методом динамической поляризации спинов электронов через сверхтонкое взаимодействие в слабом магнитном поле при не резонансом, не поляризованном оптическом возбуждении, которое напрямую не поляризует ни ядра, ни электроны [3].

В докладе обсуждаются особенности спиновой динамики электронной подсистемы в эпитаксиальных немагнитных квантовых точках, формирующихся в соединениях III-V. В таких системах выделенное направление для квантования спина задается условиями роста КТ, а эффективность спиновой поляризации, определяется их энергетическим спектром. Особое внимание будет уделено обсуждению влияния на спиновую динамику: (1) анизотропного обменного взаимодействия электрона и дырки, величиной которого можно управлять посредством изменения Г-Х смешивания электронных состояний и (2) сверхтонкого взаимодействия спина электрона с флуктуациями ядерных спинов в квантовых точках.

Будет продемонстрирован эффект спиновой блокады, появляющийся в ансамбле непрямозонных квантовых точек в слабом продольном магнитном поле при квазирезонансном оптическом возбуждении, когда квантовые точки в ансамбле последовательно заполняются оптически неактивными спин-поляризованными экситонами и не могут поглощать циркулярно-поляризованные фотоны с образованием оптически активных экситонов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ проект № 22-12-00022.

Список литературы

1. Optical Orientation / ed. F. Meier, B.P. Zakharchenya. North Holland, Amsterdam: 1984.
2. Е.Л. Ивченко, Магнитная циркулярная поляризация фотолюминесценции экситонов // ФТТ т. 60, 1503-1514, 2018.
3. D. S. Smirnov, T. S. Shamirzaev, D. R. Yakovlev, et.al. Dynamic Polarization of Electron Spins Interacting with Nuclei in Semiconductor Nanostructures // Physical Review Letters vol.125, 156801, 2020.

ТЕРАГЕРЦОВАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ХУДОЖЕСТВЕННЫХ ПИГМЕНТОВ

О.А. Смолянская^{1*}, И.И. Андреев^{1,2}, А.А. Баранова³

¹Университет ИТМО

197101, Российская Федерация, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., д. 49

*E-mail: smolyanskaya@itmo.ru

²Государственный Русский музей,

191186, Российская Федерация, Санкт-Петербург, ул. Инженерная, д. 4

В данной работе вычислительные методы, в основе которых лежит теория функционала плотности, были использованы для рассмотрения и обоснования особенностей ТГц спектров поглощения кристаллического материала художественного пигмента. В ходе исследования апробирован метод моделирования спектров поглощения - статический метод на основе традиционного метода DFT, в котором метод DFT используется для расчета электронной структуры. Результаты расчетов спектров поглощения ТГц диапазона частот кристаллического пигмента кадмия желтого сравнивались с экспериментальными результатами для интерпретации особенностей реальных спектров поглощения и сопоставления их с особенностями структуры веществ и с процессами внутримолекулярного движения.

Возможность теоретического анализа динамики межатомных взаимодействий методом DFT является объектом интереса с точки зрения колебательной спектроскопии инфракрасного и терагерцового диапазонов. Возможность расчета нормальных колебательных мод дает возможность проводить теоретический анализ сложных структур и приводить в соответствие отдельным особенностям терагерцовых спектров определенные процессы, связанные с внутри- и межмолекулярными взаимодействиями в веществах. Область, в которой на данный момент проводятся совместные исследования с использованием DFT и терагерцовой спектроскопии, включает множество направлений - от изучения механизмов действия лекарственных препаратов в фармацевтике [1] до прогнозирования спектральных свойств новых материалов терагерцовой фотоники [2].

В настоящей работе оптимизация структур кубического и гексагонального художественного пигмента кадмия желтого проводилась при неизменных параметрах симметрии начальных приближений. В ходе вычислений оптимизированных по энергии структур кубической и гексагональной конфигураций кристалла CdS получены новые структуры, соответствующие исходным симметриям, но с другими относительно начального приближения координатами ядер кадмия и серы в решетке. Результаты расчета колебательного спектра статическим методом анализа в приближении гармонического потенциала представлены на рисунке 1. Обе структуры содержат достаточно большое количество колебательных мод в диапазоне 0.5 - 2.5 ТГц. Колебательные моды кубической решетки расположены плотнее в частотной области, чем колебательные моды гексагональной решетки.

Смоделированные кристаллические решетки имеют примерно одинаковые объемы элементарных ячеек и незначительно различающееся число ядер (суммарно 64 ядра кадмия и серы в ячейке кубической симметрии, 72 ядра - в ячейке гексагональной симметрии). При этом пространственное расположение ядер и, соответственно, пространственное распределение зарядов по ячейкам различны, что приводит к различию суммарных дипольных моментов обеих структур. В результате этого возникла сильная разница между интенсивностями колебательных мод кубического и гексагонального соединений CdS.

Из-за полученных малых (порядка 10^{-5} отн. ед.), по сравнению с интенсивностями колебаний кубической решетки (порядка 10^{-2} отн. ед.), интенсивностей решетки гексагональной, можно предположить, что структура реального пигмента желтого кадмия содержит достаточно большое количество соединений CdS кубической симметрии.

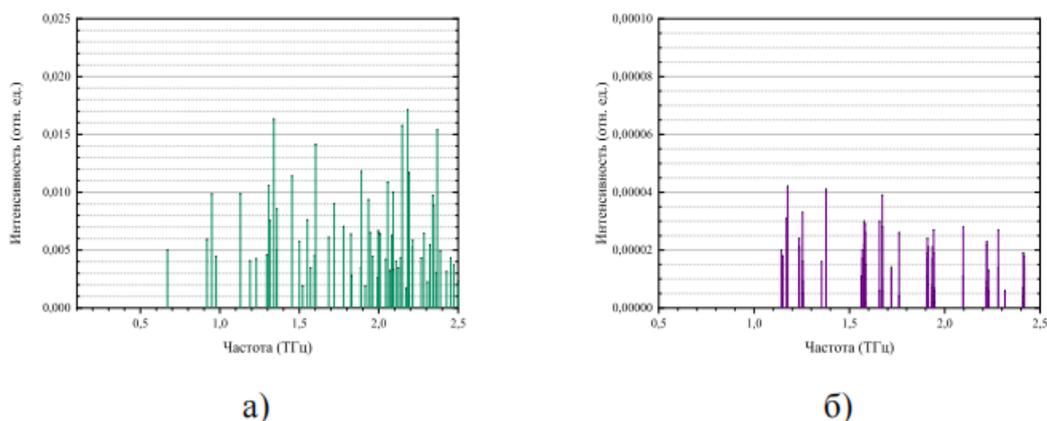


Рис. 1 – Колебательные спектры в диапазоне частот 0,1-2,5 ТГц кубической (а) и гексагональной (б) решеток кристалла кадмия желтого в приближении гармонического потенциала

Результаты ТГц эксперимента, проведенного на спектрометре TeraPulse-4000, - коэффициенты поглощения пигмента желтого кадмия в диапазоне от 0.1-2.5 ТГц, представлены на рисунке 2. Структура спектра кадмия желтого имеет выраженный линейчатый характер благодаря сильным ионным связям в периодической решетке кристалла. Наблюдается достаточно большое число спектральных линий. Рост коэффициента поглощения начинается на частоте 1.7 ТГц, на этой частоте значение коэффициента достигает приблизительно 75 см^{-1} . Следующая область в рассматриваемом диапазоне, где наблюдается рост коэффициента поглощения, начинается на частоте 2,2 ТГц - здесь присутствуют шесть мод высокой интенсивности. Максимальный коэффициент поглощения в диапазоне от 2,2 до 2,5 ТГц составляет около 80 см^{-1} .

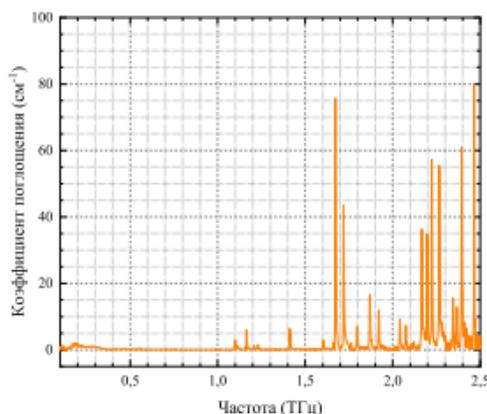


Рисунок 6 – Коэффициент поглощения в диапазоне частот 0.1-2.5 ТГц (а) пигмента желтого кадмия

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках Государственного задания (Паспорт № 2019-0903).

Список литературы

1. Siegel P. H. Terahertz technology in biology and medicine // IEEE transactions on microwave theory and techniques. — 2004. — Т. 52, № 10. — С. 2438–2447.
2. Solid-State Molecular Motions in Organic THz Generators / J. Kim [и др.] // Advanced Optical Materials. — 2021. — Т. 9, № 4. — С. 2001521.

ТЕРМИЧЕСКОЕ ОКИСЛЕНИЕ ПЛЁНОК ВАНАДИЯ И ГАЗОХРОМНЫЕ СВОЙСТВА V_xO_y

И. Н. Асхадуллин^{1*}, Е. М. Сгибнев¹, А. В. Шелаев¹, А. В. Барышев¹

¹ Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова
Россия, 127030, Москва, Сушевская ул., д.22
*E-mail: ildar1112f@yandex.ru

Представлены результаты термического окисления наноплёнок ванадия. Свойства изготовленных оксидных плёнок (V_xO_y) изучены с помощью оптической спектроскопии, спектроскопии комбинационного рассеяния, спектральной эллипсометрии и атомно-силовой микроскопии. Определены режимы окисления, приводящие к формированию фазы V_2O_5 . Исследованы воздействие водорода на оптические свойства V_xO_y и отклик чувствительного элемента V_xO_y/Pd .

Благодаря эффективности, возобновляемости и экологичности, водород может стать альтернативой ископаемому топливу. Однако, из-за высокой взрывоопасности и низкой температуры воспламенения, безопасное производство, хранение и транспортировка водорода требуют разработки эффективных методов детектирования. Крайне важной задачей является создание надежных и безопасных газовых датчиков для обнаружения водорода. Резистивные газовые датчики являются доступными по стоимости, простыми в проектировании и использовании. Однако для достижения необходимой на практике чувствительности требуются высокие рабочие температуры, что повышает риск взрыва при утечке водорода. Оптические датчики на основе газохромных материалов обладают не меньшей чувствительностью, они не требуют ни нагрева, ни электрических контактов в области детектирования, что существенно снижает вероятность случайного воспламенения водорода [1].

В работе исследованы термически окисленные плёнки ванадия для применения в качестве чувствительного элемента (ЧЭ) оптического водородного датчика. Термическое окисление плёнок металлического ванадия, полученных методом электронно-лучевого испарения, с толщиной 55 нм проводилось при различных температурах, в диапазоне от 400 до 550 °С, и временах от 10 до 120 минут. На основании анализа спектров комбинационного рассеяния, получена относительная зависимость содержания V_2O_5 от времени и температуры отжига. В результате окисления формируется развитая поверхность, что способствует увеличению эффективной площади взаимодействия ЧЭ с газом. На окисленные плёнки наносился палладий толщиной 1 нм, выступающий в роли катализатора реакции с водородом.

Образцы V_xO_y/Pd подвергались воздействию водорода в атмосфере азота. При этом наблюдались изменения в спектрах пропускания в видимом и ближнем ИК диапазонах, сопровождавшиеся формированием полосы поглощения с центром в окрестности 1100 нм. Воздействие водорода было необратимым – свойства образцов не менялись на воздухе. Обнаружено, что возврат окрашенной водородом плёнки к исходному состоянию возможен вследствие отжига на воздухе при температуре 200 °С в течение часа. Исследования с помощью спектральной эллипсометрии позволили определить дисперсионную зависимость комплексной диэлектрической проницаемости изготовленных плёнок V_xO_y и индуцированные водородом изменения в диапазоне 300–1700 нм.

Список литературы

1. Liu H. et al. Gasochromic Hydrogen Sensors: Fundamentals, Recent Advances, and Perspectives //Sensors & Materials. – 2023. – Т. 35.

ДВУМЕРНЫЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ МЕТАЛИНЗЫ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ПОРТАТИВНЫХ БИОСЕНСОРОВ ОДИНОЧНЫХ МОЛЕКУЛ

А. В. Барулин^{1,2*}, С.М. Новиков¹, А.И. Чернов^{1,3}

¹Центр фотоники и двумерных материалов, МФТИ, Физтех, Долгопрудный, Московская обл., 141701

²Department of Biophysics, Institute of Quantum Biophysics, Sungkyunkwan University, Suwon,
16419, Republic of Korea

³Российский квантовый центр, Территория Инновационного центра «Сколково», Большой бульвар,
30, стр. 1, Москва, 121205

*E-mail: alexbarulin73@gmail.com

Диэлектрические металинзы могут фокусировать свет с разрешением вплоть до дифракционного предела с высокой степенью контроля числовой апертуры, размера и хроматических аберраций. Ввиду микрометровой толщины, данная структура является компактным планарным аналогом объемных преломляющих оптических элементов. Металинзы находят свои применения в многофункциональных и компактных оптических устройствах для визуализации биологических объектов, однако детектирование флуоресценции одиночных молекул, являющееся ключевым элементом в молекулярной биологии и медицине и требует использования высококачественных и дорогостоящих оптических и оптоэлектронных компонентов с высокой эффективностью сбора и регистрации фотонов. Мы представляем металинзу, созданную из нанометровых прямоугольных колонн аморфного кремния, которая имеет высокую числовую апертуру и фокусирующую способность¹. Данная металинза способна детектировать одиночные флуоресцентные молекулы Alexa647 методом флуоресцентной корреляционной спектроскопии, а также способна определять размеры флуоресцентных наночастиц с нанометровой точностью. Представленное оптическое устройство многократно уменьшает размер преломляющего объектива и практически не теряет эффективности сбора фотонов при тех же значениях числовой апертуры. Предлагаемая нанопотонная платформа позволит создавать компактные и портативные флуоресцентные биосенсоры для средств медицины и диагностики на месте оказания медицинской помощи и средства для скрининга загрязнений окружающей среды.

Работа была выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-15-2024-622). Моделирования флуоресцентной корреляционной спектроскопии выполнены в рамках программы стратегического академического лидерства «Приоритет 2030».

Список литературы

1. Barulin, Aleksandr, et al. "Dual-wavelength metalens enables Epi-fluorescence detection from single molecules." *Nature Communications* 15.1 (2024): 26.

АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ РАЗУПОРЯДОЧЕННЫХ МАТЕРИАЛОВ С ПОМОЩЬЮ ЭЛЕКТРОННОГО РАМАНОВСКОГО РАССЕЙНИЯ СВЕТА

Э. И. Батталова^{1*}, С. С. Харинцев¹

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет
420008, Российская Федерация, Казань, ул. Кремлёвская, д. 18
*E-mail: EliBattalova@stud.kpfu.ru

Предложен новый метод анализа структуры твёрдых тел, основанный на электронном рамановском рассеянии света. Возможности данного метода экспериментально продемонстрированы на примере аморфно-кристаллических полупроводниковых плёнок с контролируемой шероховатостью поверхности. Для объяснения полученных результатов разработана физическая модель, в основе которой лежит усиленное взаимодействие электронов и локализованных фотонов.

Структурные неоднородности твёрдых тел способствуют увеличению эффективности взаимодействия света и вещества на наномасштабе. Под воздействием оптического излучения в разупорядоченных кристаллических структурах возникают локализованные фотоны, импульс которых определяется не длиной волны, а степенью локализации [1,2]. Импульс локализованного фотона может быть сопоставим с импульсом электрона, благодаря чему становятся эффективными процессы рассеяния локализованных фотонов на электронах [2]. Данное явление известно как электронное рамановское рассеяние света.

В настоящей работе представлены результаты исследований, направленных на разработку нового метода оптической спектроскопии, позволяющего производить структурный анализ разупорядоченных систем. Реализация данного метода возможна благодаря пространственному согласованию импульсов фотона и электрона. В работе показано, что электронное рамановское рассеяние проявляет себя в виде широкополосного сигнала в спектре комбинационного рассеяния света. В рамках проведённых исследований установлена корреляция между спектральным положением максимума широкополосного сигнала и размерами структурных неоднородностей материалов. Данная зависимость экспериментально подтверждена при исследовании плёнок аморфно-кристаллического кремния с различной степенью шероховатости поверхности.

Результаты данной работы открывают возможности для развития полностью оптических технологий химического и структурного анализа кристаллических и аморфных твёрдых тел, жидкостей, а также биологических материалов

Работа выполнена при поддержке программы стратегического академического лидерства Казанского федерального университета (ПРИОРИТЕТ-2030).

Список литературы

1. Principles of Nano-Optics / L. Novotny, B. Hecht. Cambridge University Press: New York, 539 p., 2006.
2. S.S. Kharintsev, E.I. Battalova, A.I. Noskov et al. Photon-Momentum-Enabled Electronic Raman Scattering in Silicon Glass // ACS Nano, vol. 18 (13), pp. 9557-9565, 2024.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОНЦЕНТРАЦИЙ ИССЛЕДУЕМОГО ГАЗА ПРИ ЛИДАРНОМ ЗОНДИРОВАНИИ АТМОСФЕРЫ

С. Л. Верхошенцева^{1*}, А. С. Ципотан¹, О. В. Непомнящий¹

¹Сибирский федеральный университет
660074, Российская Федерация, Красноярск, ул. Академика Киренского, д. 26б
*E-mail: SLeshchenko@sfu-kras.ru

В рамках представленной работы было доработано существующее лидарное уравнение лазерного зондирования атмосферы, за счет уточнения концентрации исследуемого газа. С его использованием проведено моделирование, которое показало возможность определения концентраций метана в различных условиях измерений.

Среди известных подходов к поиску месторождений природного газа наиболее эффективными следует считать экспресс методы обнаружения поверхностных утечек газа [1]. Среди них особое внимание уделяют автоматизированному аэрокосмическому измерению концентраций предельных углеводородов в атмосфере, а также экспресс диагностику для определения малых концентраций метана, этана, пропана, выполняемую в полевых условиях на приземном слое [1].

В основе принципа функционирования разрабатываемого программно-аппаратного комплекса, лежит метод, основанный на способности метана избирательно поглощать инфракрасное излучение, который относится к бездисперсионным методам инфракрасной спектроскопии.

Известно [2], что спектр поглощения метана имеет сложную структуру. Отметим длины волн 3.3912 и 3.3922 мкм, поглощение на которых для метана зависит от его концентрации, что позволяет использовать метод дифференциального лазерного зондирования [3].

В работах [4] используется лидарное уравнение (1). За счет поправочных коэффициентов оно позволяет наиболее точно рассчитать мощность рассеянного излучения пучка лазера:

$$P_{\lambda}(R) = P_0 \eta \left(\frac{c\tau}{2} \right) A(R) \frac{\beta_{\lambda}(R)}{R^2} \exp \left[-2 \int_0^R \alpha_{\lambda}(x) dx \right], \quad (1)$$

где λ – длина волны лазерного излучения; P_{λ} – мощность рассеянного излучения, полученная проходящего через атмосферу за время $t = 2R/c$; R – расстояние до рассеивающего объема; P_0 – мощность зондирующего излучения; η – эффективность приемника (калибровочная константа); c – скорость света; τ – длительность лазерного импульса; A – эффективная площадь приемника; β_{λ} – объемный коэффициент обратного рассеяния атмосферы; α_{λ} – объемный коэффициент ослабления (экстинкции) атмосферы.

Стоит заметить, что коэффициент α_{λ} требуется представлять в виде суммы членов, описывающих молекулярное (α_{λ}^{mol}) и аэрозольное (α_{λ}^{aer}) ослабление. В таком случае коэффициент молекулярного ослабления включает в себя поглощение определенного (исследуемого) газа. Коэффициент β_{λ} точно также является суммой членов, описывающих молекулярное (β_{λ}^{mol}) и аэрозольное (β_{λ}^{aer}) рассеяние. Коэффициенты аэрозольных рассеяния и ослабления можно определить либо теоретически, на основе теории аэрозольного рассеяния (теория Ми) [5], либо экспериментально (из лидарных сигналов), на основе алгоритмов решения лидарного уравнения, которые подробно рассмотрены в [6].

На основе произведенных расчетов было проведено моделирование. Поскольку коэффициенты поглощения метана зависят от концентраций на длинах волн 3.3912 и 3.3922 мкм, было смоделировано обнаружение локальных выбросов газа. В результате моделирования было выявлено, что возможно определение концентрации метана, по отличию его поглощения на разных длинах волн (рис.1).

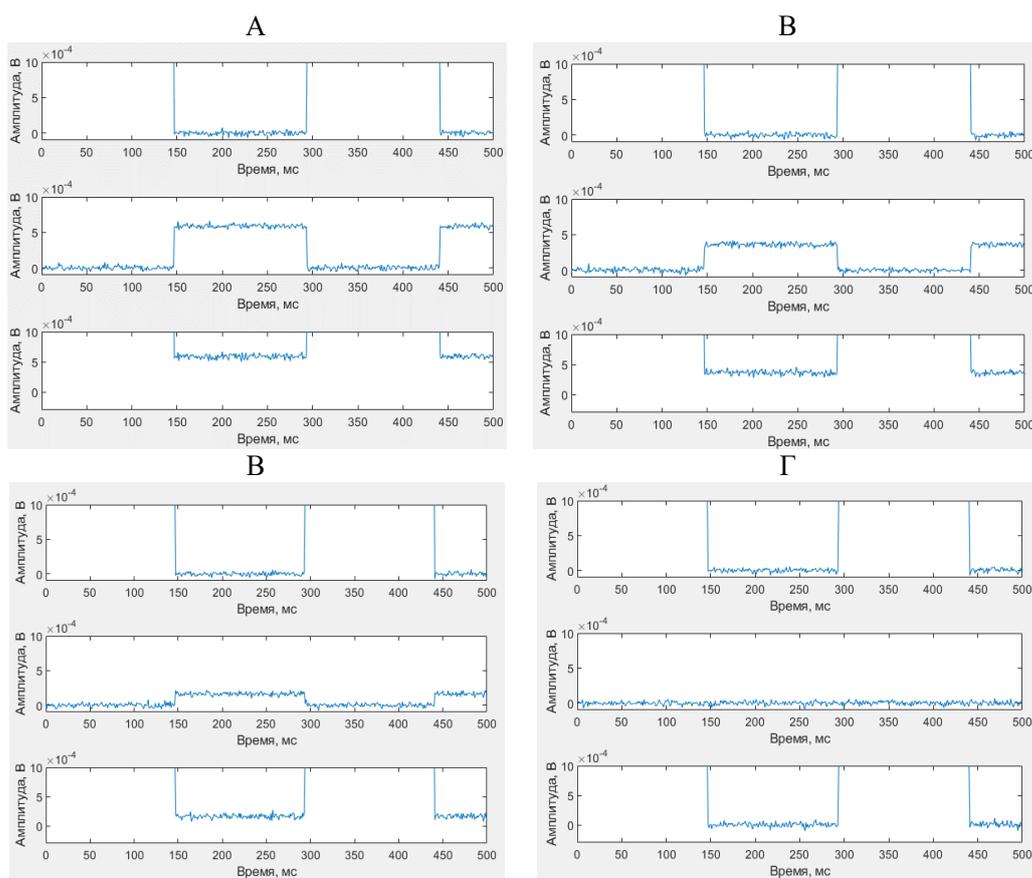


Рис. 1. Результаты моделирования на высоте 100 м (сверху-вниз: опорный сигнал, измеряющий сигнал, сумма сигналов) при разных концентрациях метана: А – 0.2 мбар, Б – 0.5 мбар, В - 1 мбар , Г – 2.5 мбар.

Исследование выполнено за счет средств РНФ (грант №23-27-10035), Красноярского краевого фонда науки.

Список литературы

1. А.И. Попов, А.В. Садчихин// Журн. прикл. спектроскопии. 1991. Т. 55. № 3. С. 426.
2. Y.Oki, N.Kawada, Y.Abe, M.Maeda - Nonlinear Raman spectroscopy without tunable laser for sensitive gas detection in the atmosphere.//Optics communication. 1999. No.16. P.57-62.
3. M.Kopica, J.W.Choi, Simple laser system for methane detection, Proc. SPIE 5234, Sensors, Systems, and Next-Generation Satellites VII, (2 February 2004). DOI: 10.1117/12.510470.
4. Скворцов Л.А. Лазерные методы дистанционного обнаружения химических соединений на поверхности тел / Москва: ТЕХНОСФЕРА, 2014. – 208 с. ISBN 978-5-94836-387-5.
5. Методы статического и динамического рассеяния света для исследования наночастиц и макромолекул в растворах. Учебно-методическое пособие / сост.: К. В. Бочаров, Н. И. Марукович, А. Ю. Куксин. – М.: МФТИ, 2016. – 40 с.
6. S.L.Verkhoshentseva, A.S.Tsipotan, O.V. Nepomnuashy, V.V. Slabko, Modeling of a Differential Laser Sensing System for Detecting Low Concentrations of Methane in the Surface Layer, J. Sib. Fed. Univ. Math. Phys., 2022, 15(4), 482–492. DOI: 10.17516/1997-1397-2022-15-4-482-492.

ОСОБЕННОСТИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ОПЫТНЫХ ОБРАЗЦОВ МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НАНОПОРИСТЫХ СИЛИКАТНЫХ МАТРИЦ

А. О. Исмагилов^{1,2*}, В. А. Пономарёва^{1,2}, С. А. Сизова^{1,2}, И. Ю. Щелканова², А. Н. Цыпкин^{1,2},
О. В. Андреева^{1,2}

¹Университет ИТМО

197101, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Кронверкский пр., д. 49, лит. А

*E-mail: ismagilov.azat@itmo.ru

²ООО «Оптические технологии контроля и диагностики»

197046, Российская Федерация, г. Санкт-Петербург, Петровская наб, д. 4 литера А, пом 21-н каб 16

В работе представлены результаты исследований процесса изготовления образцов нанопористых силикатных матриц. Результаты направлены на разработку технологического цикла получения изделий, востребованных на рынке, со стабильными и воспроизводимыми характеристиками.

Нанопористые силикатные матрицы (НПСМ) – это уникальные материалы с широким спектром применения в научных и технических разработках, что подтверждается многочисленными публикациями за последние десятилетия. Их преимущества включают высокую механическую и лучевую прочность, а также высокую абсорбционную способность и химическую стабильность. Эти материалы также отличаются высокой прозрачностью в широком спектре света, включая видимую и ближнюю инфракрасную области спектра [1-3].

Однако, несмотря на потенциал НПСМ, их производство в России ограничивается мелкими партиями лабораторных образцов [4,5]. Настоящее исследование направлено на анализ зависимости характеристик НПСМ от условий производства и разработку методов контроля параметров. Это представляет собой важный шаг к созданию современной технологической базы для производства оптических элементов нового поколения.

Исследование показывает, что качество оптико-механической обработки и геометрия расположения заготовок при химической обработке имеют существенное влияние на качество НПСМ. Также выявлено, что время обработки и концентрация химического реагента влияют на спектральное пропускание материалов в видимой области спектра. Использование методов измерения пористости и спектральных характеристик НПСМ обеспечивают экспресс контроль образцов. Показано, что соблюдение технологических рекомендаций позволяют получать образцы с разбросом показателей не более 2,5%, что важно для обеспечения надежности и повторяемости производства.

Исследование поддержано федеральным государственным бюджетным учреждением «Фонд содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере» Проект № 89650, заявка №С1-313366.

Список литературы

1. O.V. Andreeva, E.P. Bykov, A.O. Ismagilov et al. Nanoporous Silicate Matrices for Holography and Biomedicine // Opt. Spectrosc, vol. 129, pp. 431–439, 2021.
2. Z. Lijing, R.A. Zakoldaev, M.M. Sergeev, A.B Petrov et al. Optical Sensitivity of Waveguides Inscribed in Nanoporous Silicate Framework // Nanomaterials, vol. 11, p. 123, 2021.
3. E. A. Stepanidenko, P. D. Khavlyuk, I. A. Arefina et al. Strongly luminescent composites based on carbon dots embedded in a nanoporous silicate glass// Nanomaterials, vol. 10, No. 6, p. 1063, 2020.
4. A.O. Rybaltovsky, E.O. Epifanov, V.N. Sigaev et al. Femtosecond Laser Fabrication of Silver Microstructures in Nanoporous Glasses // Photonics, vol. 10, No. 9, p. 1055, 2023.
5. Mikhailov Y. V. et al. Laser Formation of Luminescent Tracks in the Bulk of Bismuth-Doped Nanoporous Glass //Glass and Ceramics, vol. 80, No. 5, pp. 223-226, 2023.

КР-СЕНСОР, ОСНОВАННЫЙ НА МНОГОМОДОВОМ ДИОДНОМ ЛАЗЕРЕ

М. А. Костенко*, Д. В. Петров, А. Р. Зарипов, С. Д. Коркишко, В. К. Волков

*Институт мониторинга климатических и экологических систем СО РАН
634055, Российская Федерация, Томск, Академический пр., д. 10/3
E-mail: matvey_mtv97@mail.ru

Исследована возможность применения недорогих многомодовых диодных лазеров в составе газовых сенсоров, основанных на спектроскопии комбинационного рассеяния (КР). Применение сравнительно простых оптических схем, которые обеспечивали внешнюю обратную связь, позволили уменьшить полуширину линии генерации с $\sim 1,6$ нм до 0,17 нм при сохранении 60% выходной мощности. Показаны результаты апробации разработанного сенсора на примере атмосферного воздуха.

В ИМКЭС СО РАН ведется разработка анализаторов, основанных на явлении комбинационного рассеяния (КР) света [1]. Данный метод обладает уникальной возможностью одновременного контроля концентраций всех молекулярных компонентов, уровень которых превышает порог чувствительности оборудования. Низкая интенсивность сигналов КР, обусловленная малыми сечениями рассеяния и относительно низкой плотностью молекул в газах является главным недостатком этого метода. В данной работе представлены новые технические решения для газоанализа основанного на спектроскопии КР. Концепция такого сенсора основана на использовании в качестве источника возбуждения многомодового диодного лазера синего диапазона длин волн. Учитывая, что полупроводниковые лазеры в сравнении с газовыми или твердотельными обладают большей спектральной шириной линии генерации, были исследованы два подхода для ее сужения за счет обеспечения внешней обратной связи. Первый из них был основан на использовании дифракционной решетки, второй на использовании интерферометра Фабри-Перо.

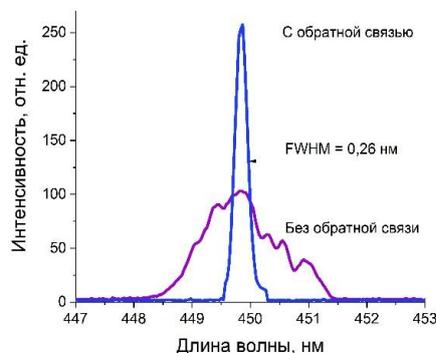


Рис. 1. Спектры излучения лазера с обеспечением внешней обратной связи и без нее.

В результате проведенных исследований было установлено, что разрешение регистрируемых спектров КР может достигать 8 см^{-1} . Апробация разработанного сенсора показала, что при времени анализа 2 с достигнутое отношение сигнал/шум позволяет детектировать любой тип молекул концентрация которых превышает 1 %.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект FWRG-2021-0006)

Список литературы

1. D.V. Petrov, I.I. Matrosov, A.S. Tanchev, M.A. Kostenko, A.R. Zaripov. Development of Raman Gas Analyzers at IMCES SB RAS // Atmos. Ocean. Opt., vol. 35, pp. 450–455, 2022.

МЕТОДИКА ОДНОКАНАЛЬНОГО ИЗМЕРЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТА ОТРАЖЕНИЯ В СКОЛЬЗЯЩЕМ ПАДЕНИИ В ЭУФ ОБЛАСТИ

П. С. Анциферов¹, В. М. Макарова^{1,2*}

¹Институт спектроскопии РАН

108840, Российская Федерация, Москва, Троицк, ул. Физическая, д. 5

²Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

101000, Российская Федерация, Москва, ул. Мясницкая, д. 20

*E-mail: vmmakarova@edu.hse.ru

Одним из основных методов получения информации об оптических константах в области экстремального ультрафиолета (ЭУФ) является измерение коэффициента отражения в скользящем падении. В докладе сообщается о статусе проекта рефлектометра скользящего падения в ЭУФ области, работа над которым ведётся в ИСАНе. Разработанная одноканальная схема измерения состоит из спектрографа скользящего падения, который позволяет регистрировать с помощью CCD матрицы нормально к лучу зрения спектры падающего и отражённого излучения одновременно. Предложена методика обработки экспериментальных спектров для определения коэффициента отражения. В докладе приводятся результаты измерений для тестовых образцов. Также обсуждается применение одноканальной схемы для разделения порядков дифракции в ЭУФ спектре.

Актуальность исследований в диапазоне экстремального ультрафиолета (ЭУФ), $\lambda \sim 10$ нм, связана с развитием нанолитографии [1]. В качестве одного из основных методов для определения оптических констант материалов, применяемых для создания оптических элементов в данном спектральном диапазоне, используется измерение коэффициента отражения в скользящем падении. Наиболее точные методы измерения коэффициента отражения основаны на использовании синхротронного источника ЭУФ излучения. Необходимость в экспресс-анализе образцов привела к развитию более простых и компактных рефлектометрических схем с применением лабораторных источников излучения. В ИСАНе был предложен одноканальный метод для проведения таких измерений [2, 3].

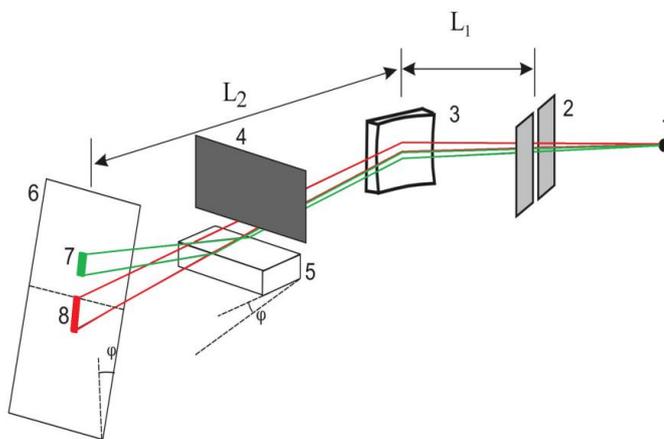


Рис. 1: Схема одноканальной методики измерения коэффициента отражения в скользящем падении. 1 — источник ЭУФ излучения, 2 — входная щель, 3 — сферическая дифракционная решётка, 4 — ножевая диафрагма, 5 — образец, 6 — плоскость регистрации, 7 — отражённая часть излучения, 8 — прошедшая часть излучения.

Спектрограф скользящего падения по схеме Quasi-Flat Field является основным элементом одноканальной схемы и позволяет регистрировать спектр излучения нормально к лучу зрения. Идея метода заключается в том, чтобы, при помещении исследуемого образца внутрь спектрографа, за одно измерение одновременно регистрировать сигнал спектра отражённого и прошедшего излучения (рис. 1). В качестве детектора используется CCD-матрица, источник излучения - быстрый капиллярный разряд.

Излучение содержит в себе лежащие в ЭУФ диапазоне спектральные линии многозарядных ионов. Спектральная зависимость коэффициента отражения определяется сравнением спектров отражённого и падающего излучения для отдельных спектральных линий.

В рамках проекта разработан алгоритм обработки экспериментальных спектрограмм, полученных в одноканальной схеме измерения. Для определения коэффициента отражения отдельной спектральной линии строится функция спектральной модуляции для спектров отражённого и прошедшего излучения. Алгоритм был применён для обработки данных эксперимента. Дисперсия измеренных значений коэффициента отражения позволяет говорить о возможности достижения точности порядка 1%.

В докладе приводятся результаты эксперимента по измерению коэффициента отражения от кремниевого образца с углом скольжения 5° в спектральном диапазоне 8-25 нм (рис. 2) и от рутениевого зеркала с углами скольжения 6° и 10° в спектральном диапазоне 15-40 нм. Обсуждаются источники систематических погрешностей, связанные с астигматизмом спектрометра и неоднородностью чувствительности детектора, и способы их учёта при обработке спектрограмм. Также демонстрируется возможность использования одноканального метода для разделения порядков дифракции в ЭУФ спектре.

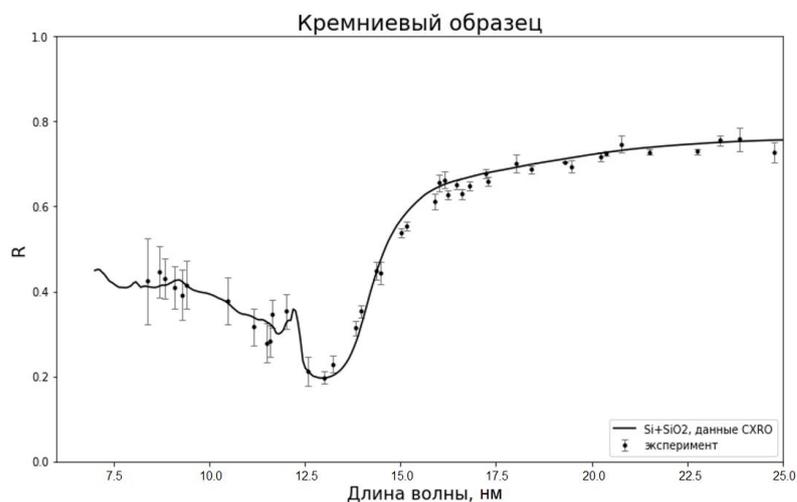


Рис. 2: Спектральная зависимость коэффициента отражения от кремния в диапазоне 8 - 25 нм. Точки - измеренные значения, кривая - данные базы CXRO [4].

Работа выполнена в рамках проекта Госзадания *FFUU-2022-0005*.

Список литературы

1. V. Y. Banine, K. N. Koshelev, G. H. P. M. Swinkels. Physical processes in EUV sources for microlithography // J. Phys. D: Appl. Phys., vol. 44 (25), p. 253001, 2011. DOI: 10.1088/0022-3727/44/25/253001
2. D. B. Abramenko, P. S. Antsiferov, L. A. Dorokhin, et al. Single-channel method for measuring the reflectance spectra of grazing incidence mirrors in the extreme ultraviolet range // Opt. Lett., vol. 44 (20), p. 4949, 2019. DOI: 10.1364/ol.44.004949
3. П. С. Анциферов, Л. А. Дорохин, В. М. Макарова. Методика определения коэффициента отражения в скользющем падении при использовании одноканальной схемы измерения // Оптика и спектроскопия, т. 131., № 8, с. 1074-1079, 2023. DOI: 10.61011/OS.2023.08.56298.4846-23
4. CXRO X-Ray Interactions With Matter [Электронный ресурс]. URL: https://henke.lbl.gov/optical_constants/ (дата обращения: 28.02.24)

ЛАЗЕРНАЯ ДИАГНОСТИКА РЕАКЦИОННОЙ СРЕДЫ И КОНТРОЛЬ РАЗМЕРОВ НАНОРЕАКТОРОВ В ПРОЦЕССЕ СИНТЕЗА НАНОЧАСТИЦ

И. В. Пластинин^{1,2*}, Т. А. Доленко¹

¹ Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына,
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

*E-mail: plastinin_ivan@mail.ru, <http://rswater.phys.msu.ru>

² Физический факультет, Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
119991, Российская Федерация, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

Проведено спектроскопическое исследование реакционной среды, состоящей из обратных мицелл АОТ в обратных микроэмульсиях, в которых в реальном времени происходит синтез наночастиц ZnS. С помощью спектроскопии УФ-поглощения и лазерной корреляционной спектроскопии проведена характеристика нанореакторов и синтезированных наночастиц. Обнаружена чувствительность характеристик спектров комбинационного рассеяния (КР) к изменению параметров реакционной среды.

На сегодняшний день потребности большинства нанотехнологических отраслей производства включают получение наночастиц (НЧ) с определенными физическими свойствами [1]. Так как на свойства наночастиц во многом влияют их размеры и форма, особое внимание уделяется разработке и развитию методов синтеза монодисперсных НЧ [2]. Например, сегодня возможность получать различные по величине наноразмерные полупроводниковые кристаллы ZnS чрезвычайно важна, так как эти НЧ имеют широкий спектр применений – в биосенсорах и электронике [3], для биовизуализации и в магнитной гипертермии [4], в других областях.

Одним из способов получения монодисперсных НЧ является синтез в ядрах обратных мицелл – нанореакторов (рис. 1) [5]. Создаются такие нанореакторы в обратных микроэмульсиях (типа «вода в масле»), где стабилизатором выступают амфифильные молекулы или ионы.

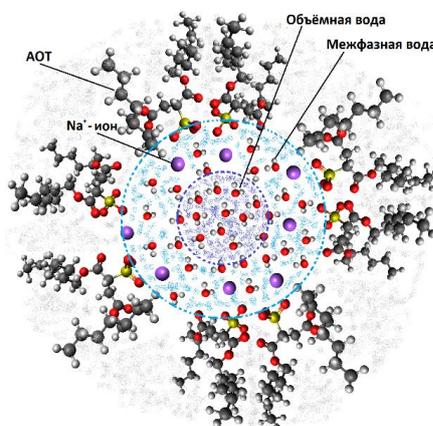


Рис. 1. Схематическое изображение нанореактора – сферической обратной мицеллы, состоящей из наноразмерного водного ядра, окруженного сферическим слоем мономеров АОТ.

Для повышения эффективности синтеза НЧ с конкретными физическими свойствами требуются дистанционные методы диагностики реакционной среды и синтезируемых наночастиц непосредственно в режиме реального времени. Лазерная спектроскопия КР является мощным методом для дистанционной, неразрушающей и экспрессной диагностики многокомпонентных сред [6] и уже применяется в нанотехнологиях для определения некоторых условий синтеза НЧ, например, температуры среды при синтезе НЧ в пламени [7]. К сожалению, столь мощный и информативный метод до сих пор не применяется для более детального анализа реакционной среды, причём, не толь-

ко в газовой среде, но и в растворах, а также для дистанционного контроля реакционной среды и синтезированных НЧ.

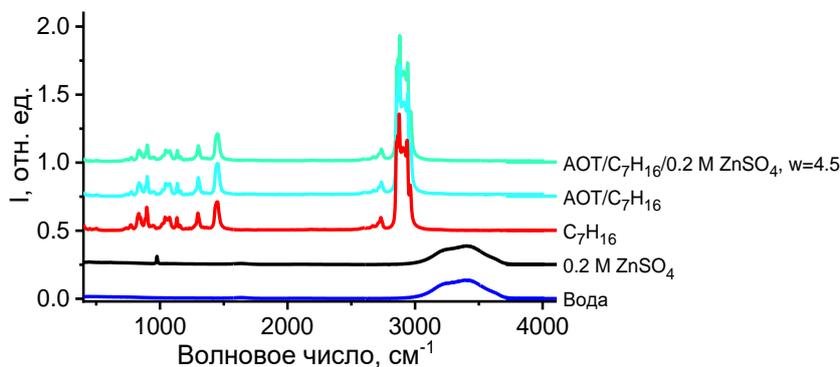


Рис. 2. Спектры КР воды, водных растворов и микроэмульсий.

В данной работе с помощью спектроскопии КР (рис. 2), динамического светорассеяния (ДСР) и спектроскопии поглощения в УФ-области проведено исследование процессов в мицеллярных нанореакторах. Для приготовления обратных микроэмульсий были использованы диоктилсульфосукцинат натрия (АОТ), гептан (C_7H_{16}), циклогексан (C_6H_{12}), и сверхчистая деионизованная вода. Прекурсорами наночастиц ZnS выступали сульфат цинка и сульфид натрия. В качестве стабилизатора был выбран АОТ, так как это ПАВ не требует дополнительных добавок (соПАВ) для получения стабильных микроэмульсий с большой долей дисперсной водной фазы. На основе проведённого спектроскопического анализа нанореакторов предложены методы определения концентрации прекурсоров в нанореакторах и размеров нанореакторов по спектральным характеристикам спектров КР реакционной среды. Оба метода обеспечат существенное повышение производительности синтеза наночастиц в различных нанотехнологиях, а также позволят достигать высокой монодисперсности синтезированных наноматериалов.

Список литературы

1. Xu J. et al. Applications and challenges of ultra-small particle size nanoparticles in tumor therapy // *J. Control. Release*. 2023. Vol. 353. P. 699–712.
2. Liu Z. et al. Microfluidic ultrasonic cavitation enables versatile and scalable synthesis of monodisperse nanoparticles for biomedical application // *Chem. Eng. Sci.* 2023. Vol. 280. P. 119052.
3. Yi T.-F. et al. ZnS nanoparticles as the electrode materials for high-performance supercapacitors // *Solid State Ionics*. 2019. Vol. 343. P. 115074.
4. Mondal D.K. et al. Improved self heating and optical properties of bifunctional Fe₃O₄/ZnS nanocomposites for magnetic hyperthermia application // *J. Magn. Magn. Mater.* 2021. Vol. 528. P. 167809.
5. Morán D. et al. Synthesis of controlled-size starch nanoparticles and superparamagnetic starch nanocomposites by microemulsion method // *Carbohydr. Polym.* 2023. Vol. 299. P. 120223.
6. Plastinin I. V., Burikov S.A., Dolenko T.A. Laser diagnostics of reverse microemulsions: Influence of the size and shape of reverse micelles on the Raman spectrum on the example of water/AOT/cyclohexane system // *J. Mol. Liq.* 2021. Vol. 325. P. 115153.
7. Dreier T., Schulz C. Laser-based diagnostics in the gas-phase synthesis of inorganic nanoparticles // *Powder Technol.* 2016. Vol. 287. P. 226–238.

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ РЧ СИГНАЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОНВЕРТОРА НА ОСНОВЕ ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКОГО МОДУЛЯТОРА ИНТЕНСИВНОСТИ

В.М. Владимиров¹, М.Ю. Реушев^{1,2}

¹Федеральный исследовательский центр СО РАН, 660036, г. Красноярск, Академгородок, 50.

²Сибирский федеральный университет, 660041, г. Красноярск, просп. Свободный, 79.

E-mail: reuqem@mail.ru

Исследовано влияние работы конвертора частоты радиочастотных сигналов на основе электрооптического модулятора интенсивности на спектр частот выходного сигнала в режиме down- конверсии. Показано, что модулятор не вносит существенных изменений в распределение спектральной плотности мощности выходного сигнала по сравнению с сигналом на входе модулятора.

В последние десятилетия технологии фотоники стали вытеснять традиционные области, занимаемые радио и технической электроникой, такие как, хранение и передача информации, освещение, обработка материалов [1].

В качестве основных элементов передающих систем в ВОЛС наиболее широкое распространение получили полупроводниковые лазеры (ППЛ), в которых модуляция излучения происходит за счет модуляции тока накачки лазера (прямая модуляция). Эффективное оптическое распределение сигнала от ППЛ, в системах транспортировки широкополосных многоканальных сигналов по ВОЛС требует низкой флуктуации фазы лазерного излучения и большой мощности лазерного излучения для передачи сигнала нескольким приемникам. Малые флуктуации фазы и большая мощность полупроводникового лазера при работе на высоких частотах модуляции излучения несовместимы друг с другом. В такой ситуации требуется применение внешних оптических модуляторов (ОМ). Среди ОМ, электрооптические модуляторы (ЭОМ) являются наиболее перспективными элементами для применения в системах связи. Тем не менее, вопросы, связанные со спектральным составом преобразуемых сигналов, по-прежнему являются актуальными [2].

С целью изучения влияния работы конвертора на основе ЭОМ в режиме down – конверсии на спектр СВЧ сигналов разностной частоты, были проведены экспериментальные исследования с использованием анализатора спектра АКС-1301 (Россия).

Исследовались зависимости вида $W_{out}(\omega_0, \omega_i, \omega_i - \omega_0) = f[W_{in}(\omega_0, \omega_i, U_{DC})]$, где W_{in} , W_{out} — мощности входного и выходного сигналов; ω_0, ω_i — частота опорного и преобразуемого СВЧ сигналов.

На рис.1, в виде скриншотов с экрана анализатора спектра приведен пример спектрального состава сигналов на выходе фотоэлектрического приемника после смесителя в режиме down – конверсии.

Для качественной оценки спектрального состава сигналов разностной частоты формируемых смесителем была разработана методика, основанная на сравнении спектрограмм, включающих сигнал центральной частоты и контур фазовых шумов в основании этого сигнала. Качественная оценка состояла в определении коэффициента F – фактора спектральной линии. Коэффициент F определялся из выражения:

$$F = \frac{2W_{max} \times RBW}{FNL \times (\Delta f_1 + \Delta f_2)}$$

где: $W_{max} \times RBW$ – геометрическая площадь равная произведению максимума мощности измеряемого сигнала центральной частоты на полосу разрешения анализатора спектра; $FNL \times (\Delta f_1 + \Delta f_2)/2$ – геометрическая площадь трапеции равная произведению величины FNL на полусумму Δf_1 и Δf_2 . Согласно этому выражению неравенство $F_m > F_n$ означало, что спектральный состав сигнала с центральной частотой ω_m отличается от сигнала с частотой ω_n меньшим уровнем мощности фазовых шумов на единицу

спектрального интервала вблизи центральной частоты, что означает лучшее качество сигнала ω_m по сравнению с сигналом ω_n .

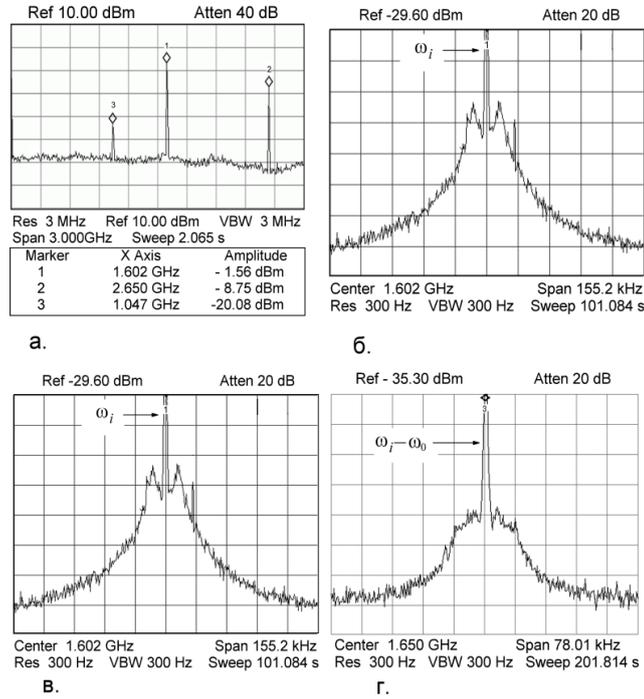


Рис.1. Спектральный состав сигналов на выходе ПРМ

а. – спектр сигналов на выходе ПРМ; б. – спектр сигнала опорной частоты $\omega_0 = 1,602$ ГГц; в. – спектр преобразуемого сигнала $\omega_i = 2,650$ ГГц; г. – спектр сигнала разностной частоты $\omega_i - \omega_0 = 1,048$ ГГц.

Проведенные экспериментальные исследования и последующий их анализ, позволили сделать следующие выводы:

1. Спектральный состав радиочастотных сигналов разностной частоты ($\omega_i - \omega_0$) на выходе смесителя на основе волоконного ЭОМ интенсивности определяется качественным составом сигналов преобразуемой частоты ω_i , включая интенсивность сигнала на центральной частоте и спектральную мощность фазового шума вблизи этой частоты.

2. Качественный спектральный состав сигнала опорной частоты ω_0 смесителя незначительно влияет на спектральный состав сигналов разностной частоты на выходе смесителя, что связано с особенностью работы ЭОМ интенсивности по типу волоконного интерферометра Маха Цендера при смешивании сигналов ω_0 и ω_i в нелинейной оптической среде модулятора.

Список литературы

1. Ковш И.Б. Производство продукции фотоники в России. Лазер-Информ, 2016, № 3–4. URL: <http://bibl.laser.nsc.ru/download/laser-inform/570all.pdf> (accessed 16.10.2016).

2. Белоусов А.А., Вольхин Ю.Н., Гамиловская А.В., Дубровская А.А. Тихонов Е.В. О применении методов и средств радиофотоники для обработки сигналов дециметрового, сантиметрового и миллиметрового диапазонов длин волн // Прикладная фотоника, №1, -Пермь, -2014.-С.65-86.

ИНТЕГРАЛЬНАЯ ФОТОНИКА, ИЗМЕРЕНИЕ И ПРОИЗВОДСТВО ФОТОННЫХ ИНТЕГРАЛЬНЫХ СХЕМ

Н. Д. Ростовцев

АО «ЛЛС»

199034, Российская федерация, Санкт-Петербург, ул. Биржевая линия, д. 16

E-mail:n.rostovtsev@lenlasers.ru

В данной работе представлены основные тенденции в оптике и фотоника, а в частности основные подходы и возможности по производству фотонных интегральных схем, оптические измерительные схемы актуальные для современных реалий. Рассмотрены различные мировые тенденции в разработке архитектуры фотонных интегральных схем. Продемонстрированы основные сферы применения электрооптических модуляторов, такие, как системы квантового распределения ключа, принцип когерентного сложения в лазерных системах, различные методы исследования характеристик оптических компонентов, применение в передовых бортовых системах. Это подчеркивает важность и актуальность данных устройств во множественных областях отечественных разработок и научных применениях. Приведены экспериментальные результаты измерений и сравнительный анализ модуляторов российского и зарубежного производства. Можно утверждать, что российские модуляторы несмотря на то, что находятся на начальных стадиях своего развития, практически не уступают мировым лидерам рынка.

ОСОБЕННОСТИ КОНСТРУКЦИИ И ЮСТИРОВКИ РЕГУЛИРУЕМОГО ОПТИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА

Д. А. Козодаев¹, А. О. Погоньшев¹, Н. С. Пщелко^{2*}, О. С. Пщелко², М. А. Трусов¹

¹ООО «АКТИВНАЯ ФОТОНИКА», 124460, Российская Федерация, г. Москва, Зеленоград, Панфиловский пр., д. 10, оф. 49

²Военная академия связи им. С.М. Буденного, 194064, Российская Федерация, Санкт-Петербург, Тихорецкий пр., д. 3

*E-mail: nikolsp@mail.ru

Рассмотрена относительно простая в практической реализации конструкция и особенности работы и юстировки оптического изолятора Фарадея с регулируемой индукцией магнитного поля. В конструкции дополнительно предусмотрена регулировка угла между оптическими осями поляризаторов. Указанное позволяет достичь высокой степени оптической изоляции (до 40 дБ для длин волн света 633 и 785 нм). Разработанный оптический изолятор не содержит труднодоступных радиально намагниченных магнитов. За счет комбинирования различных наборов магнитов при наличии возможности плавной регулировки, в одном и том же корпусе возможно изготовление изоляторов для различных длин волн. Использование оптического изолятора устраняет негативные эффекты оптической обратной связи.

В связи с развитием лазерных технологий в настоящее время создаются все более чувствительные оптические устройства, требующие тщательной юстировки и высокостабильной работы источника излучения. Это делает особенно актуальной необходимость в защите лазерных систем от влияния эффектов обратной связи [1-3]. Для решения данной задачи предложены так называемые оптические изоляторы различных конструкций [1,2]. По ряду соображений считается, что в настоящее время наиболее эффективными в рассматриваемом аспекте являются оптические изоляторы Фарадея [3]. Использование оптического изолятора существенно уменьшает шумы, повышает стабильность работы источника лазерного излучения в целом, а также устраняет другие вредные эффекты оптической обратной связи.

Оптические изоляторы Фарадея – достаточно дорогостоящие устройства, выпускаемые лишь небольшим количеством зарубежных фирм. Поэтому первой целью настоящей работы является самостоятельная разработка конструкции изолятора Фарадея, пригодная, с учетом различных технологических и финансовых ограничений, для отечественного производства. Второй целью работы является повышение степени оптической изоляции за счет разработки системы плавной регулировки изолятора путем подстройки необходимой индукции магнитного поля.

Разработанный в настоящей работе изолятор Фарадея (рис.1) содержит корпус 1, резьбу 2 для выходной регулировочной втулки 3, выходной регулировочный магнит 4. Выходная регулировочная втулка 3 предназначена для регулировки расстояния d между основным магнитом 5 и выходным регулировочным магнитом 4. Также конструкция содержит основной магнит 5, предназначенный для создания сильного магнитного поля, необходимого для поворота плоскости поляризации света, входной регулировочный магнит 6, входную регулировочную втулку 7, резьбу для выходной регулировочной втулки 8, входную крышку 9, оптическое окно 10 входной крышки, входной поляризатор 11, оптическое окно 12 во входном магните, ротатор 13, представляющий собой стержень из магниточувствительного тербий-галлиевого граната, оптическое окно 14 в выходном магните, выходной поляризатор – анализатор 15, резьбу 16 – для внутренней втулки 17, оптическое окно 18 выходной крышки, выходную крышку 19. Перечисленные элементы (за исключением магнитов) должны быть изготовлены из немагнитного материала, например, алюминия.

Разработанный изолятор Фарадея юстируется и работает следующим образом. При прохождении плоскополяризованного света вдоль оси $O-O_1$ с вертикальной поляризацией, полученного с помощью входного поляризатора 11, в прямом направлении (справа налево), магнитное поле поворачивает плоскость его поляризации на угол α , поэтому плоскость колебаний вектора \vec{E} уже не вертикальна на выходе. Индукция маг-

нитного поля в ротаторе 13 (стержне из магниточувствительного тербий-галлиевого граната) зависит от расстояния до входного регулировочного магнита 6 и выходного регулировочного магнита 4. Поэтому, вращая входную регулировочную втулку 7 и выходную регулировочную втулку 3, можно подобрать такое расстояние d , чтобы магнитное поле поворачивало плоскость поляризации оптического излучения точно на угол $\alpha=45^{\circ}$. При повороте на этот угол интенсивность выходящего света будет наибольшей, т.к. выходной поляризатор – анализатор 15 установлен под углом 45° за счет регулировки внутренней втулкой 17 по отношению к входному поляризатору 11. Таким образом, добиваясь наибольшей выходной интенсивности света, получаем необходимую величину магнитного поля. Перевернув изолятор на 180° (т.е. поменяв вход и выход местами, не изменяя положение лазера), можно убедиться, что свет насквозь не проходит, а при наличии его некоторой небольшой интенсивности можно ее уменьшить за счет тонкой юстировки расстояния d (втулкой 3) и необходимого угла (45°) между призмами (втулкой 17). Отсутствие обратного прохождения объясняется тем, что отраженный свет будет распространяться в обратном направлении, при этом направление поворота плоскости поляризации света в эффекте Фарадея не зависит от направления распространения света [4]. Поэтому вращатель Фарадея повернет плоскость поляризации дополнительно на 45° в ту же сторону, что и при прямом прохождении света. Таким образом, в первый поляризатор свет попадет поляризованным вдоль оси, повернутой на 90° , т.е. свет будет поляризован горизонтально. Поэтому, в соответствии с законом Малюса, он дальше распространяться не будет.

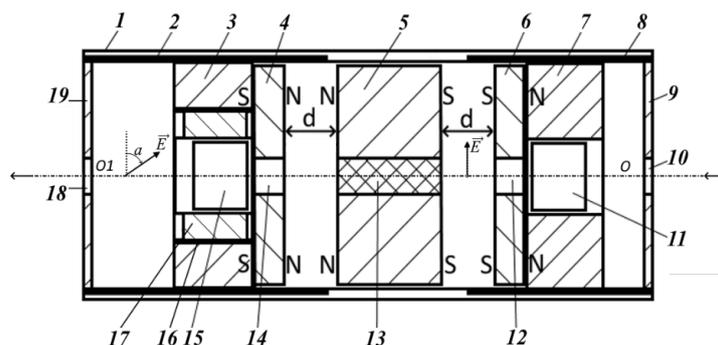


Рис. 1. Оптический изолятор Фарадея с регулируемой индукцией магнитного поля.

Измерения показали, что использование данной конструкции при тщательной юстировке позволяет добиться высокой степени оптической изоляции (до 40 дБ для длин волн света 633 и 785 нм). Следует также отметить, что конструкция относительно проста в изготовлении, не содержит труднодоступных радиально намагниченных магнитов. Немаловажно также и то, что комбинируя различные наборы магнитов, и имея возможность плавной регулировки, в одном и том же корпусе возможно изготовление изоляторов для различных длин волн оптического излучения.

Список литературы

1. Патент № 2646551 РФ. Изолятор Фарадея с переменным направлением поля магнитной системы / Е. А. Миронов, О. В. Палашов. — Оpubл. 05.03.2018.
2. Патент № 2559863 РФ. Изолятор Фарадея на постоянных магнитах для лазеров большой мощности / А. В. Войтович, Е. А. Миронов, О. В. Палашов. — Оpubл. 20.08.2015.
3. Юрчук, Ю. Оптические изоляторы / Ю. Юрчук // Фотоника. — 2016. — №5/59. — С. 34–41.
4. Ландсберг, Г. С. Оптика / Г. С. Ландсберг. — Учеб. пособие: Для вузов. — 6-е изд., стереот. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. — 848 с.

Научное издание

**Енисейская Фотоника – 2024.
Всероссийская научная конференция
с международным участием.
Тезисы докладов.**

Т. 2

Сдано в набор 25.08.24
Подписано в печать 04.09.2024
Формат 60×84/16. Гарнитура Таймс.
Объем 13,9 усл. печ. л.
Тираж 100 экз.
Издательство ИФ СО РАН

Отпечатано в типографии ИФ СО РАН
660036, г. Красноярск, Академгородок, 50, стр. 38