

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

ИЗВЕСТИЯ САРАТОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Новая серия

Серия: Физика

2025

Том 25

Выпуск 4



IZVESTIYA OF SARATOV UNIVERSITY
PHYSICS



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

ИЗВЕСТИЯ

САРАТОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Новая серия

Серия Физика, выпуск 4

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



Научный журнал
2025 Том 25

ISSN 1817-3020 (Print)

ISSN 2542-193X (Online)

Издаётся с 2005 года

СОДЕРЖАНИЕ

Научный отдел

Теоретическая и математическая физика

Кречет В. Г., Ошурко В. Б., Киссер А. Э. О свойствах стационарных конфигураций вращающейся самогравитирующей идеальной жидкости с вихревым гравитационным полем

396

Радиофизика, электроника, акустика

Губенко П. П., Короновский А. А., Москаленко О. И. Об особенностях применения метода вспомогательной системы при диагностике режима обобщенной хаотической синхронизации

408

Сердобинцев А. А., Кожевников И. О., Рябов Е. А., Гуслякова О. И., Приходженко Е. С. Разработка прототипа гибкой антенны с пассивирующим слоем для электроимпедансных сенсоров

414

Оптика и спектроскопия. Лазерная физика

Березин К. В., Степанович Е. Ю., Дворецкий К. Н., Антонова Е. М., Лихтер А. М., Янина И. Ю. Водородная связь в моногидратах триглицеридов насыщенных жирных кислот: молекулярная динамика и квантовомеханическое моделирование

425

Анфал Фадиль Ахмед Муламахавш, Симоненко Г. В. Конструкция модулятора терагерцового излучения на основе эффекта многоволновой интерференции в слоистой структуре, состоящей из большого числа жидкокристаллических п-ячеек

438

Биофизика и медицинская физика

Злочевский И. И., Завьялов Д. В. Сравнение крупнозернистой и полноатомной систем «мембрана-растворитель» как моделей мемконденсатора при воздействии переменного электрического поля

449

Сагайдачный А. А., Антонов А. В., Залетов И. С., Майсков Д. И., Фомин А. В., Потахин С. Н., Скрипаль Ан. В. Термовизуализация микрогемодинамики и интегрированное картирование активности потовых желез как метод диагностики автономной нейропатии

460

Боровкова Е. И., Васильева Д. В., Караваев А. С., Ишбулатов Ю. М., Пономаренко В. И., Безручко Б. П., Прохоров М. Д. Оценка времени стационарности сверхмедленных колебаний потенциалов головного мозга по сигналам электроэнцефалограмм

474

Нанотехнологии, наноматериалы и метаматериалы

Барков П. В., Слепченков М. М., Глухова О. Е. Сенсорные свойства тонких пленок перфорированного графена, функционализированного СООН-группами: DFTB-исследование

485

Элбакян Л. С., Запороцкова И. В. Исследование проводящих свойств композитных полимерных материалов на основе поливинилпирролидона, допированных одно- и двухслойными нанотрубками

495

Университетская летопись

Из истории физики

Чурочкина С. В., Чурочкин Д. В., Аникин В. М.

Академик Лев Петрович Питаевский: саратовские годы жизни, семейная аура

505

Приложения

Personalia

Памяти профессора Николая Ивановича Синицына (01.06.1937–02.11.2025)

519

Памяти профессора Рауфа Загидовича Бахтизина (20.01.1943–10.09.2025)

522

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

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

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

Журнал включен в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук (категория К1, специальности: 1.3.3, 1.3.4, 1.3.5, 1.3.6, 1.3.11, 1.3.19, 1.5.2, 2.2.2).

Журнал индексируется Scopus, RSCI, DOAJ

Подписной индекс издания 36015.

Подписку на печатные издания можно оформить в Интернет-каталоге ГК «Урал-Пресс» (ural-press.ru).

Журнал выходит 4 раза в год.

Цена свободная.

Электронная версия находится в открытом доступе (fizika.sgu.ru)

Директор издательства

Бучко Ирина Юрьевна

Редактор

Трубникова Татьяна Александровна,

Редактор-стилист

Агафонов Андрей Петрович

Верстка

Пермяков Алексей Сергеевич

Технический редактор

Каргин Игорь Анатольевич

Корректор

Агафонов Андрей Петрович

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

Адрес учредителя, издателя

и издательства (редакции):

410012, Саратов, ул. Астраханская, 83

Тел.: +7(845-2) 51-29-94, 51-45-49,

52-26-89

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

Подписано в печать 21.11.2025.

Подписано в свет 28.11.2025.

Выход в свет 28.11.2025.

Формат 60 × 84 1/8.

Усл. печ. л. 14.93 (16.0).

Тираж 100 экз. Заказ 112-Т.

Отпечатано в типографии

Саратовского университета.

Адрес типографии:

410012, Саратов, Б. Казачья, 112А

© Саратовский университет, 2025



ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

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

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

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

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

Текст статьи должен быть подписан всеми авторами.

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

Список литературы следует оформлять в соответствии с ГОСТ Р 7.0.5-2008 «Библиографическая ссылка». В списке литературы нумерация источников должна соответствовать очередности ссылок на них в тексте. Ссылки на неопубликованные работы не допускаются. В библиографическом списке должны быть указаны только процитированные в статье работы.

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

Плата за публикацию рукописей не взимается.

Более подробно с правилами для авторов и порядком рецензирования можно ознакомиться на сайте журнала: <http://fizika.sgu.ru>

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

Тел./факс: +7 (8452) 52-27-05

E-mail: fizik@sgu.ru

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

CONTENTS

Scientific Part

Theoretical and Mathematical Physics

- Krechet V. G., Oshurko V. B., Kisser A. E. On the properties of stationary configurations of a rotating self-gravitating ideal fluid with a vortex gravitational field 396

Radiophysics, Electronics, Acoustics

- Gubenko P. P., Koronovskii A. A., Moskalenko O. I. On peculiarities of application of the auxiliary system approach for the generalized chaotic synchronization regime detection 408
- Serdobintsev A. A., Kozhevnikov I. O., Ryabov E. A., Gusliakova O. I., Prikhozhenko E. S. Development of a prototype of flexible antennas with a passivation layer for electrical impedance sensors 414

Optics and Spectroscopy. Laser Physics

- Berezin K. V., Stepanovich E. Yu., Dvoretzky K. N., Antonova E. M., Likhter A. M., Yanina I. Yu. Hydrogen bonding in saturated acids triglyceride monohydrates: MD and DFT modeling 425
- Anfal Fadhil Ahmed Mulamahawsh, Simonenko G. V. Design of a terahertz radiation modulator based on the effect of multi-wave interference in a layered structure consisting of a large number of liquid crystal π -cells 438

Biophysics and Medical Physics

- Zlochevskiy I. I., Zav'yalov D. V. Comparison of coarse-grained and all-atom "membrane-solvent" systems as models of memcapacitors under alternating electric field 449
- Sagaidachnyi A. A., Antonov A. V., Zaletov I. S., Mayskov D. I., Fomin A. V., Potakhin S. N., Skripal An. V. Thermal imaging of microhemodynamics and integrated mapping of sweat gland activity as a method for diagnosing autonomic neuropathy 460
- Borovkova E. I., Vasilieva D. V., Karavaev A. S., Ishbulatov Yu. M., Ponomarenko V. I., Bezruchko B. P., Prokhorov M. D. Estimation of the stationarity time of infra-slow oscillations of brain potentials using electroencephalogram signals 474

Nanotechnologies, Nanomaterials and Metamaterials

- Barkov P. V., Slepchenkov M. M., Glukhova O. E. Sensor properties of thin films of perforated graphene functionalized with COOH groups: DFTB study 485
- Elbakyan L. S., Zaporotskova I. V. Investigation of the conductive properties of composite polymer materials based on polyvinylpyrrolidone doped with single and double-walled nanotubes 495

University Chronicle

From the History of Physics

- Churochkina S. V., Churochkin D. V., Anikin V. M. Academician Lev P. Pitaevskii: Saratov years of life, family aura 505

Appendices

Personalia

- In memory of Professor Nikolay Ivanovich Sinitsyn (June 1, 1937 – November 2, 2025) 519
- In memory of Professor Raouf Zagidovich Bakhtizin (January 20, 1943 – September 10, 2025) 522



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

Главный редактор

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

Заместители главного редактора

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

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

Ответственный секретарь

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

Члены редакционной коллегии:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Ларин Кирилл Владимирович, Ph.D., профессор Хьюстонского университета (Хьюстон, США)

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

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

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

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

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

Сухоруков Глеб Борисович, Ph.D., профессор Университета Королевы Марии (Лондон, Великобритания)

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

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

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

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

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

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

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

Sergey A. Nikitov (Moscow, Russia)

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

Members of the Editorial Board:

Valery M. Anikin (Saratov, Russia)

Lev M. Babkov (Saratov, Russia)

Roberto Cerbino (Milan, Italy)

Vladimir G. Chigrinov (Hong Kong, China)

Michael V. Davidovich (Saratov, Russia)

Vladimir L. Derbov (Saratov, Russia)

Arnaud Dubois (Saint-Aubin, France)

Yuri A. Filimonov (Saratov, Russia)

Alexander V. Gorokhov (Samara, Russia)

Nikolai G. Khlebtsov (Saratov, Russia)

Kirill V. Larin (Houston, USA)

Leonid A. Melnikov (Saratov, Russia)

Joseph Modelski (Warsaw, Poland)

Yuri A. Pirogov (Moscow, Russia)

Yuri P. Sharaevsky (Saratov, Russia)

Alexander V. Skripal (Saratov, Russia)

Gleb B. Sukhorukov (London, UK)

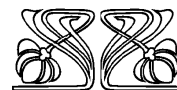
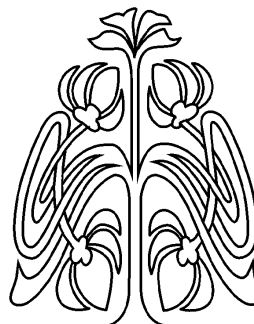
Tatyana E. Vadivasova (Saratov, Russia)

Sergey I. Vinitzky (Dubna, Russia)

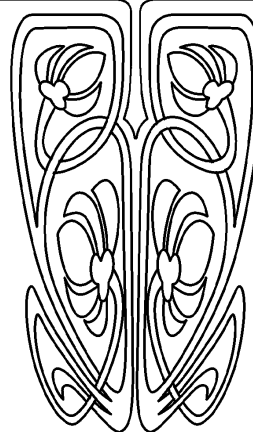
Sergey B. Venig (Saratov, Russia)

Anna S. Zakharova (Berlin, Germany)

Dan Zhu (Wuhan, China)



**РЕДАКЦИОННАЯ
КОЛЛЕГИЯ**

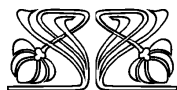
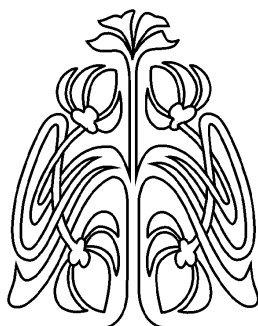




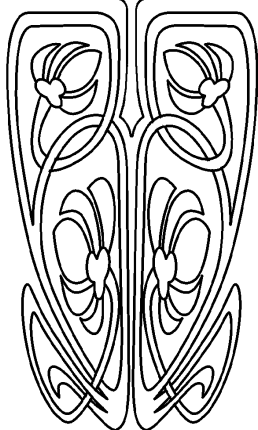
ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 396–407
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 396–407
<https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-396-407>, EDN: FIWRDU

Обзорная статья
УДК 530.12:531.51



НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ



О свойствах стационарных конфигураций вращающейся самогравитирующей идеальной жидкости с вихревым гравитационным полем

В. Г. Кречет¹, В. Б. Ошурко^{1,2}, А. Э. Киссер¹✉

¹Московский государственный технологический университет «СТАНКИН», Россия, 127055, г. Москва, пер. Вадковский, д. 1

²Институт общей физики имени А. М. Прохорова РАН, Россия, 119991, г. Москва, ул. Вавилова, д. 38

Кречет Владимир Георгиевич, доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики, VGKrech@rambler.ru, <https://orcid.org/0009-0006-3608-5116>, AuthorID: 28017

Ошурко Вадим Борисович, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физики, vbo08@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8566-6407>, AuthorID: 53808

Киссер Алексей Эдуардович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики, al.baidin@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0009-1489-976X>, AuthorID: 523371

Аннотация. В рамках общерелятивистской теории гравитации Эйнштейна, т. е. общей теории относительности (ОТО), рассматриваются свойства стационарных распределений самогравитирующей вращающейся сплошной среды в виде идеальной жидкости с баротропным уравнением состояния $p = w\varepsilon$, $w = \text{const}$, где p – давление, а ε – плотность энергии идеальной жидкости. Стационарное пространство-время, совместимое с наличием самогравитирующей вращающейся сплошной среды, описывается стационарной цилиндрически-симметричной метрикой, соответствующей пространству-времени с вращением, в котором наличествует вихревое гравитационное поле. Для исследования свойств рассматриваемых вращающихся конфигураций самогравитирующей идеальной жидкости и вихревого гравитационного поля решаются соответствующие гравитационные уравнения Эйнштейна. Некоторые из полученных решений описывают геометрию пространства-времени «кротовых нор» – своеобразных тоннелей в пространстве-времени, соединяющих отдаленные области Вселенной или же параллельные Вселенные. Кроме того, показана возможность существования вакуумных «кротовых нор», образованных одним лишь вихревым гравитационным полем.

Ключевые слова: вихревое гравитационное поле, идеальная жидкость, вращение, «кротовые норы»

Для цитирования: Кречет В. Г., Ошурко В. Б., Киссер А. Э. О свойствах стационарных конфигураций вращающейся самогравитирующей идеальной жидкости с вихревым гравитационным полем // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 396–407. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-396-407>, EDN: FIWRDU

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



Review

On the properties of stationary configurations of a rotating self-gravitating ideal fluid with a vortex gravitational field

V. G. Krechet¹, V. B. Oshurko^{1,2}, A. E. Kisser¹✉¹Moscow State University of Technology «STANKIN», 1 Vadkovsky Lane, Moscow 127055, Russia²Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences, 38 Vavilova St., Moscow 119991, RussiaVladimir G. Krechet, VGKrech@rambler.ru, <https://orcid.org/0009-0006-3608-5116>, AuthorID: 28017Vadim B. Oshurko, vbo08@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8566-6407>, AuthorID: 53808Alexey E. Kisser, al.baidin@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0009-1489-976X>, AuthorID: 523371

Abstract. Background and Objectives: Within the framework of Einstein's general-relativistic theory of gravity, that is, the general theory of relativity (GR), the properties of stationary distributions of a self-gravitating rotating continuous medium in the form of an ideal liquid with a barotropic equation of state $p = w\varepsilon$ are considered. Here, $w = \text{const}$, p is the pressure, and ε is the energy density of an ideal liquid. **Materials and Methods:** A stationary space-time compatible with a self-gravitating rotating continuous medium is described by a stationary cylindrical metric $ds^2 = A(x)dx^2 + B(x)d\varphi^2 + C(x)dz^2 + 2E(x)dtd\varphi - D(x)dt^2$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, where the metric coefficients A, B, C, D, E are functions of the radial coordinate x . This metric corresponds to a rotating space-time in which there is a vortex gravitational field. The latter is determined by means of the angular velocity ω of the field of tetrads $e_{(a)}^i(x^k)$, which are tangent to the considered Riemannian space. Here, the indices i, k are the world indices corresponding to the coordinates of the Riemannian space (base), and the index (a) is a local Lorentz index. For a vortex gravitational field, in contrast to a total gravitational field, it is possible to determine an energy-momentum tensor $T_k^i(\omega)$ satisfying the local conservation law $\nabla_i T_k^i(\omega) = 0$ relative to the metric of the corresponding static space in which $\omega = 0$ (in the case under consideration, at a coefficient of $E = 0$). The tensor $T_k^i(\omega)$ has very exotic properties. For example, a weak energy condition is violated in it, since $p(\omega) + \varepsilon(\omega) < 0$. For ordinary matter $p + \varepsilon > 0$. This property $T_k^i(\omega)$ contributes to the formation of wormholes in space-time. To study the properties of the considered configuration of a self-gravitating rotating ideal fluid and a vortex gravitational field, the corresponding Einstein gravitational equations are solved. **Results:** Solutions of Einstein's gravitational equations in stationary space-time have been obtained with the metric presented above, that is, with a vortex gravitational field and with wormholes in the presence of a self-gravitating rotating ideal fluid with a limiting equation of state $p = \varepsilon$. At the same time, the obtained solutions describe the geometry of space-time of the so-called traversable wormholes, inside which gravitational forces $\vec{F}_g$ have a finite magnitude. A solution with a passable wormhole, in which $\vec{F}_g = 0$, that is, without gravitational force, has also been obtained. In addition, solutions of Einstein's vacuum equations $R_{ik} = 0$ in space-time with the metric presented above have been obtained, that is, in the absence of a rotating continuous medium in the presence of only vortex gravitational field. The resulting solution describes the geometry of the wormhole space-time. **Conclusion:** Since the above-mentioned solution of gravitational equations with a wormhole is a solution to vacuum equations, that is, for empty space without matter, it is possible to suggest the presence of wormholes in outer space that exist *a priori* and also exist near the Earth.

Keywords: vortex gravitational field, ideal fluid, rotation, wormholes

For citation: Krechet V. G., Oshurko V. B., Kisser A. E. On the properties of stationary configurations of a rotating self-gravitating ideal fluid with a vortex gravitational field. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 396–407 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-396-407>, EDN: FIWRDU

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

Введение

В данной работе рассматриваются и исследуются различные свойства стационарных распределений самогравитирующей вращающейся сплошной среды в виде идеальной баротропной жидкости при наличии вихревого гравитационного поля, включая и очень интересный случай вакуумного объекта из одного вихревого гравитационного поля, описываемого вакуумными гравитационными уравнениями Эйнштейна $R_{ik} = 0$.

Стационарное пространство-время, совместимое с наличием самогравитирующей вращающейся сплошной среды, описывается стационарной цилиндрически-симметричной метрикой, соответствующей пространству-времени с вращением, в котором наличествует вихревое гравитационное поле.

Цилиндрически-симметричные пространства являются вторыми (после сферически-симметричных) простейшими типами пространства-времени, на базе которых можно получить точные аналитические решения в общей теории относительности для самогравитирующих материальных конфигураций. Другой важной мотивацией для изучения цилиндрически-симметричных конфигураций является возможное существование таких линейно-протяженных структур как космические струны [1–3], а также наличие данных, полученных при наблюдении космических джетов [4–6].

Весомые аргументы в пользу важности изучения цилиндрически-симметричных и вращающихся конфигураций дают космологические наблюдения, на основе которых можно сделать вывод о существовании медленного вращения наблюдаемой Вселенной [7]. Эти наблюдения дали стимул для



построения цилиндрически-симметричных вращающихся космологических моделей [8–11]. Вопрос о величине и способах измерения угловой скорости вращения Вселенной остается открытым [12–14], с учетом имеющихся данных можно ожидать, что угловая скорость меньше 10^{-9} рад/год.

В настоящее время очень актуальными являются исследования в области физики «кратовых нор» [15–25]. «Кратовые норы» – теоретически предсказываемые в рамках ОТО объекты, представляют собой своеобразные тоннели в пространстве-времени, соединяющие между собой отдаленные области нашей Вселенной. «Кратовые норы» также используются при построении гипотетических моделей различных устройств, например «машин времени» [15]. Имеются и многие другие интересные эффекты, связанные с метриками «кратовых нор» [19]¹.

Большой проблемой в физике «кратовых нор» является нахождение способов их образования, хотя бы пока теоретически. До сих пор для этого предлагалось использовать материю с отрицательной массой или сплошную среду с нарушенным слабым энергетическим условием: $p + \varepsilon > 0$, где p – давление, ε – плотность энергии (при его нарушении $p + \varepsilon \leq 0$). Материи с такими экзотическими свойствами пока не обнаружено.

Однако нашими исследованиями показано, что подобными свойствами обладает вихревое гравитационное поле, являющееся вихревой составляющей полного гравитационного поля [17, 20]. Вихревое гравитационное поле в принципе образовать несложно, его источником может быть, например, поток материи с поляризованным спином [18]. Вихревое гравитационное поле создается также при интенсивном вращении сплошной среды, например жидкости, и при этом могут образовываться «кратовые норы» [17, 20]. Поэтому «кратовыми норами» могут быть некоторые очень быстро вращающиеся массивные астрофизические объекты: массивные звезды, пульсары, магнетары, ядра галактик, имеющие консистенцию жидкости, а также вращающиеся линейно-протяженные космические струны. При этом, если учесть, что «кратовые норы» могут имитировать «черные дыры» [21], то возможно, что некоторые из них являются «кратовыми норами».

Учитывая все вышесказанное, исследование свойств цилиндрически-симметричных вращающихся конфигураций самогравитирующей идеаль-

ной жидкости является весьма актуальным, чему и посвящена данная работа.

К теме, касающейся изучения свойств стационарных конфигураций вращающейся сплошной среды, обращались ранее многие авторы, в том числе и мы (см. например [26–34]). В некоторых работах по указанной теме рассматривались другие виды материи – неидеальная жидкость [31], а также идеальная жидкость, но с дополнительными ограничениями на характер вращения [26–28, 30], но ни в одной из них не получены решения гравитационных уравнений Эйнштейна с геометрией «кратовых нор».

В наших более ранних работах [17, 18, 33, 34] и в соавторстве с Бронниковым [20, 21] была доказана возможность образования «кратовых нор» в конфигурациях вращающейся самогравитирующей идеальной жидкости в результате воздействия индуцированного вихревого гравитационного поля и получены частные решения соответствующих гравитационных уравнений Эйнштейна для некоторых видов уравнения состояния $p = p(\varepsilon)$.

В настоящей работе получены общие решения, кроме частных, гравитационных уравнений Эйнштейна для конфигураций самогравитирующей вращающейся идеальной жидкости при различных уравнениях состояния. Кроме того, получены решения вакуумных уравнений Эйнштейна $R_{ik} = 0$ для свободного вихревого гравитационного поля в стационарном цилиндрически-симметричном пространстве с вращением с геометрией «кратовых нор». Тем самым была доказана возможность существования свободного вихревого гравитационного поля в пустом пространстве без источников в виде какой-нибудь материи, поляризованной по ее моменту импульса (спина), и доказана возможность существования «кратовых нор» в пустом пространстве, т. е. вакуумных «кратовых нор», представляющих собой топологические дефекты в пустом пространстве.

Вращающаяся идеальная жидкость и вихревое гравитационное поле

Используемая в данной работе идеальная жидкость имеет баротропное уравнение состояния $p = p(\varepsilon)$ вида $p = w\varepsilon$, $w = \text{const}$, где p – давление, а ε – плотность энергии. Вихревое гравитационное поле, также рассматриваемое в работе, является вихревой составляющей полного

¹«Кратовые норы» (wormholes) – это в первую очередь математическое решение уравнений общей теории относительности, а не подтвержденный физический объект. На сегодняшний день экспериментальных доказательств существования кратовых нор нет (Примечание редколлегии).



гравитационного поля. Вихревое гравитационное поле определяется как 4-мерный ротор поля тетрадь $e^i_{(a)}(x^k)$, касательных к данному псевдориманову пространству-времени (базе) [17]:

$$\omega^i = \frac{1}{2} \varepsilon^{iklm} e_{k(a)} e_{l;m}^{(a)}. \quad (1)$$

Здесь ω^i – угловая скорость вращения касательного тетрадного репера, является кинематической характеристикой вихревого гравитационного поля. Этот аксиальный вектор определяет вектор плотности собственного углового момента гравитационного поля $S^i(\omega)$

$$S^i(\omega) = \frac{\omega^i}{\sqrt{\alpha}}; \quad \alpha = \frac{8\pi G}{c^4}. \quad (2)$$

Тетрадные коэффициенты $e^k_{(a)}$ удовлетворяют условиям ортонормированности и связи с метрикой пространства-времени

$$e^k_{(a)} e_{k(b)} = \eta_{ab}; \quad e^i_{(a)} e_{(a)k} = g_{ik}; \quad e^a_k e^k_{(b)} = \delta^a_b. \quad (3)$$

Здесь и везде индексы $i, k, l, m, \dots$ – мировые индексы, соответствующие координатам пространства-времени, а индексы $(a), (b)$ – лоренцевы индексы, g_{ik} – метрические коэффициенты псевдориманова пространства (базы), а η_{ab} – метрические коэффициенты касательного пространства Минковского.

Для вихревого гравитационного поля, в отличие от полного гравитационного поля, можно определить тензор энергии-импульса $T^i_k(\omega)$, удовлетворяющий локальному закону сохранения $T^i_{k;i}(\omega) = 0$, относительно соответствующей метрики статического пространства, получаемого из рассматриваемого стационарного пространства, если в нем ω приравнять нулю ($\omega = 0$) [17, 20].

Сам тензор $T^i_k(\omega)$ определяется следующим образом [17, 20]

$$T^i_k(\omega) = -G^i_k(\omega)/\alpha, \quad (4)$$

где $G^i_k(\omega)$ – часть полного тензора Эйнштейна $G^i_k = R^i_k - \frac{1}{2} R \delta^i_k$, зависящая от ω . При этом предпочтительно использовать эти тензоры в смешанных компонентах, так как в таких компонентах более явно выделяется вихревая часть [20].

Простейший тип с наличием вихревого гравитационного поля стационарного пространства-времени, совместимого с самогравитирующей вращающейся идеальной жидкостью, описывается стационарной цилиндрически-симметричной метрикой:

$$ds^2 = Adx^2 + Bdz^2 + Cdz^2 + 2Edtd\varphi - Ddt^2. \quad (5)$$

Здесь метрические коэффициенты A, B, C, D, E – есть функции радиальной координаты x .

Далее, определяя по формулам (3) через метрические коэффициенты метрики (5) компоненты тетрадного репера $e^i_{(a)}$, у которого времениподобный вектор $e^i_{(4)}$ устанавливаем в виде $e^i_{(4)} = (0, 0, 0, 1/\sqrt{D})$, вычисляем по формуле (1) угловую скорость ω^i вращения тетрадного поля:

$$\omega^i = \delta^i_3 \frac{E'D - D'E}{2D\sqrt{(BD + E^2)AC}}, \quad (6)$$

где штрих обозначает дифференцирование по радиальной координате x . Отсюда находим величину угловой скорости $\omega = \sqrt{\omega^k \omega_k}$:

$$\omega = \frac{E'D - D'E}{2D\sqrt{A(BD + E^2)}}. \quad (7)$$

Здесь ω имеет размерность 1/см (в системе единиц СГСМ), поскольку формулы для нее (6) и (7) получены путем дифференцирования безразмерных метрических коэффициентов по пространственной радиальной координате x ; сама ω связана с кинематической угловой скоростью $\overset{0}{\omega}$ (1/с) через скорость света c : $\overset{0}{\omega} = \omega c$.

Метрика пространственноподобной поверхности, ортогональной времениподобному вектору $e^i_{(4)}$, т. е. реального трехмерного пространства, в рассматриваемом случае имеет вид

$$dl^2 = \gamma_{\alpha\beta} dx^\alpha dx^\beta, \quad (8)$$

где $\alpha, \beta = 1, 2, 3$ – номера пространственных координат, $\gamma_{\alpha\beta}$ – компоненты метрического тензора реального пространства, определяемого формулой

$$\gamma_{\alpha\beta} = g_{\alpha\beta} - \frac{g_{4\alpha} g_{4\beta}}{g_{44}}. \quad (9)$$

С учетом (8), (9) получаем

$$dl^2 = Adx^2 + R^2 d\varphi^2 + Cdz^2; \quad R^2 = \frac{BD + E^2}{D}. \quad (10)$$

Далее для удобства переходим к экспоненциальному представлению метрических коэффициентов

$$A = e^\alpha; \quad B = e^\beta; \quad C = e^\lambda; \quad D = e^\nu; \quad E = e^\gamma; \quad R^2 = e^\mu, \quad (11)$$

а из локального закона сохранения тензора энергии-импульса вихревого гравитационного поля



$T_{k;i}^i(\omega) = 0$ для угловой скорости ω в новом представлении метрических коэффициентов (11) получаем формулу

$$\omega = \omega_0 e^{-(v+\mu/2)}; \quad \omega_0 = \text{const}, \quad (12)$$

где ω_0 есть некоторое граничное значение угловой скорости ω . При этом учитывалось, что локальный закон сохранения выполняется в пространстве с соответствующей статической метрикой без вращения, где $\omega = 0$ (в данном случае, когда $E = 0$).

Для дальнейшего исследования при составлении гравитационных уравнений Эйнштейна для физической системы вращающейся идеальной жидкости необходимо использовать ее тензор энергии-импульса (ТЭИ), равный:

$$T_{ik} = (p + \varepsilon)u_i u_k + p g_{ik}. \quad (13)$$

Здесь u_i , u_k – компоненты нормированной четырехмерной скорости жидкости ($u^i u_i = -1$), при использовании сопутствующей системы отсчета они определяются формулами:

$$\begin{aligned} u^i &= (0, 0, 0, 1/\sqrt{D}); \\ u_i &= (0, E/\sqrt{D}, 0, -\sqrt{D}). \end{aligned} \quad (14)$$

Мы используем гравитационные уравнения Эйнштейна в смешанных компонентах в форме:

$$R_k^i = \varepsilon \left(T_k^i - \frac{1}{2} T \delta_k^i \right). \quad (15)$$

При этом в рассматриваемом случае единственной ненулевой недиагональной компонентой тензора R_k^i является компонента R_2^4 , а она выражается через диагональные компоненты этого тензора

$$R_2^4 = \frac{E}{D} (R_2^2 - R_4^4). \quad (16)$$

Поэтому здесь нам достаточно решать уравнения Эйнштейна (15) только для диагональных компонент, в которые компонента $E = e^\gamma$ явно не входит, а входят в качестве неизвестных метрические коэффициенты метрики (10) реального пространства $A = e^\alpha$, $C = e^\lambda$, $R^2 = e^\mu$, а также $g_{tt} = e^v$.

Далее мы можем выписать гравитационные уравнения Эйнштейна для физической системы вращающейся идеальной жидкости с вихревым гравитационным полем. При этом мы используем так называемое изотермическое координатное условие $e^\alpha = e^\lambda$, так как по нашему мнению в этих координатах яснее виден физический смысл получаемых результатов, ибо в соответствующем

плоском пространстве Минковского с метрикой: $ds^2 = dr^2 + r^2 d\varphi^2 + dz^2 - dt^2$, где $e^\lambda = e^\alpha = 1$, такое координатное условие автоматически выполняется. Здесь мы уравнения Эйнштейна выписываем в форме $R_k^i = \varepsilon (T_k^i - \frac{1}{2} T \delta_k^i)$ и они будут иметь вид:

$$\begin{aligned} 1) \lambda' \mu' + \lambda' v' + \mu' v' &= -4\omega_0^2 e^{-2v} + 4\varepsilon p e^\lambda; \\ 2) \mu'' + \mu'^2/2 + \mu' v'/2 &= 4\omega_0^2 e^{-2v} + \varepsilon (p - \varepsilon) e^\lambda; \\ 3) v'' + v'^2/2 + \mu' v'/2 &= -4\omega_0^2 e^{-2v} + \varepsilon (3p + \varepsilon) e^\lambda; \\ 4) \lambda'' + \lambda' v'/2 + \lambda' \mu'/2 &= e^\lambda \varepsilon (p - \varepsilon). \end{aligned} \quad (17)$$

Следствием этих уравнений является локальный закон сохранения энергии

$$p' + \frac{v'}{2} p + \varepsilon = 0. \quad (18)$$

(как и везде, штрих обозначает производную по x).

Решения вакуумных уравнений Эйнштейна с вихревым гравитационным полем

Будем сначала решать эту систему уравнений в отсутствии материи в виде идеальной жидкости, когда $p = \varepsilon = 0$, т. е. для случая вакуума, но в той же метрике (5), т. е. в стационарном пространстве-времени при наличии одного лишь вихревого гравитационного поля, существующего *a priori*, таким образом, будем решать вакуумные уравнения Эйнштейна $R_{ik} = 0$ в стационарном пространстве с метрикой (5).

Тогда соответствующая система гравитационных уравнений Эйнштейна, следующая из системы уравнений (17), (18) примет вид:

$$\begin{aligned} 1) \lambda' \mu' + \lambda' v' + \mu' v' &= -4\omega_0^2 e^{-2v}; \\ 2) \mu'' + \mu'^2/2 + \mu' v'/2 &= 4\omega_0^2 e^{-2v}; \\ 3) v'' + v'^2/2 + \mu' v'/2 &= -4\omega_0^2 e^{-2v}; \\ 4) \lambda'' + \lambda' v'/2 + \lambda' \mu'/2 &= 0. \end{aligned} \quad (19)$$

При этом в уравнении (18) производная v' не определена, а четвертое уравнение системы (19) имеет первый интеграл

$$\lambda' e^{\frac{v+\lambda}{2}} = C_1; C_1 = \text{const}. \quad (20)$$

Здесь удобнее и рациональнее положить константу C_1 , равной нулю ($C_1 = 0$), так как тогда и $\lambda' = 0$, а e^λ будет постоянной величиной, и путем подстройки масштабов длин вдоль осей OZ и OX , можно сделать, чтобы $e^\lambda = 1$ и $e^\alpha = 1$, как в плоском пространстве.



Далее, складывая первое и третье уравнения системы (19), получим легко интегрируемое уравнение

$$\mu'' + \nu'' + \frac{1}{2}(\mu' + \nu')^2 = 0. \quad (21)$$

Первый интеграл этого уравнения:

$$(\mu' + \nu')e^{\frac{\mu+\nu}{2}} = C_2. \quad (22)$$

Интегрируя полученное уравнение (22), получим второй интеграл уравнения (21):

$$e^{\frac{\mu+\nu}{2}} = \frac{C_2}{2}x + C_3. \quad (23)$$

Здесь константу C_3 без ограничения общности можно считать равной единице ($C_3 = 1$). При этом, забегая вперед, константу интегрирования C_2 целесообразней пока положить равной нулю, так как при этом получаемое далее решение будет более удобным и прозрачным для физического осмысления. При $C_2 = 0$ получается, что $e^\nu = e^{-\mu}$, $\nu' = -\mu'$, система уравнений (19) редуцируется до двух уравнений:

$$\begin{cases} \mu'^2 = 4\omega_0^2 e^{2\mu} \\ \mu'' = 4\omega_0^2 e^{2\mu} \end{cases}. \quad (24)$$

Легко показать, что первое уравнение этой системы является первым интегралом второго уравнения, поэтому будем далее решать первое уравнение, следствием которого является уравнение следующего вида:

$$e^{-\mu}\mu' = \pm 2\omega_0. \quad (25)$$

Здесь при сделанном выше выборе констант интегрирования существенно учитывать оба знака в окончательном решении системы уравнений (19), которое следующее

$$e^\alpha = e^\lambda = 1; e^\nu = e^{-\mu}; e^\nu = k^2 - \text{sign} x \cdot 2\omega_0 x; \\ e^\mu = \frac{1}{k^2 - \text{sign} x \cdot 2\omega_0 x}; -\frac{k^2}{2\omega_0} < x < \frac{k^2}{2\omega_0}. \quad (26)$$

Здесь k^2 – безразмерная положительно определенная константа интегрирования, а $\text{sign} x$ – знаковая функция ($\text{sign} x = 1$ при $x > 0$ и $\text{sign} x = -1$ при $x < 0$). Эту функцию можно представить как $\text{sign} x = x/|x|$.

Здесь напомним, что метрический коэффициент e^μ есть угловой коэффициент $g_{\phi\phi}$ при $d\phi^2$, и он возрастает с увеличением радиальной координаты от минимального значения $g_{\phi\phi}$: при

наличии центральной оси $e^\mu = 0$ для точек центральной оси и $e^\mu \rightarrow \infty$ на пространственной бесконечности.

Из полученного решения (26) для e^μ следует, что $e^\mu \rightarrow \infty$ при $x \rightarrow \frac{k^2}{2\omega_0}$ и при $x \rightarrow -\frac{k^2}{2\omega_0}$, т. е. имеются две пространственных бесконечности на обоих концах интервала существования решения для полученной геометрии пространства-времени, и e^μ не обращается в ноль нигде внутри этого интервала ($-\frac{k^2}{2\omega_0} < x < \frac{k^2}{2\omega_0}$), т. е. получилась геометрия пространства «кротовой норы». Самое узкое место «кротовой норы» – горловина – находится в данном случае в точке $x = 0$. Радиус этой горловины $a = l/k$, где l – масштабный множитель размерности длины. Поскольку k – произвольная константа, то и радиус горловины может быть любой величины. Но поскольку метрические коэффициенты e^λ и e^α в метрике при dx^2 и dz^2 равны единице, то масштабы длины внутри получившейся «кротовой норы» совпадают с масштабами длины во внешнем плоском пространстве. Поэтому размер данной «кротовой норы» будет равен длине интервала $-\frac{k^2}{2\omega_0} < x < \frac{k^2}{2\omega_0}$, т. е. равен $\frac{k^2}{\omega_0}$.

Кроме того, поскольку метрический коэффициент при dt^2 , $g_{tt} = e^\nu$, определяемый посредством (26), на концах интервала $-\frac{k^2}{2\omega_0} < x < \frac{k^2}{2\omega_0}$ обращается в нуль, то оба устья получившейся «кротовой норы» закрыты горизонтом событий как черные дыры. Это значит, что для удаленного наблюдателя каждое из устьев получившейся «кротовой норы» видится как черная дыра.

Рассмотренная выше задача с решением вакуумных гравитационных уравнений Эйнштейна ($R_{ik} = 0$) при наличии стационарного вихревого гравитационного поля *a priori* показывает, что возможно и в пустом пространстве существование «кротовых нор», в частном случае при наличии *a priori* вихревого гравитационного поля.

Конфигурации с вращающейся самогравитирующей идеальной жидкостью и вихревым гравитационным полем

Перейдем теперь к другому случаю, когда уже в стационарном пространстве с вихревым гравитационным полем наличествует еще и гравитирующая материя, сначала в виде пылевидной материи, в которой давление $p = 0$, а плотность энергии $\epsilon \neq 0$. Подобная задача рассматривалась, например, также в работах [27, 30, 31] с определенными ограничениями



и дополнительными условиями, а задачи при других уравнениях состояния $p(\epsilon)$ решались в [26, 28, 29, 35].

Теперь, продолжая рассматривать сформулированную выше задачу, получаем формулу для локального закона сохранения энергии в данном случае:

$$v'(p + \epsilon) = 0. \quad (27)$$

Отсюда следует, что $v' = 0$, и надлежащим выбором масштаба времени можно сделать, чтобы $e^v = 1$:

$$v' = 0; e^v = 1. \quad (28)$$

В итоге с учетом (28) совместная система уравнений Эйнштейна (17) для вращающейся идеальной жидкости при $p = 0$ и гравитационного поля запишется в виде:

$$\begin{aligned} 1) \lambda' \mu' &= -4\omega_0^2; \\ 2) \mu'' + \mu'^2/2 &= 4\omega_0^2 - \epsilon \epsilon e^\lambda; \\ 3) 4\omega_0^2 &= \epsilon \epsilon e^\lambda; \\ 4) \lambda'' + \lambda' \mu'/2 &= -\epsilon \epsilon e^\lambda. \end{aligned} \quad (29)$$

Складывая второе и третье уравнения системы (29), получаем уравнение для определения функции e^μ :

$$\mu'' + \mu'^2/2 = 0, \quad (30)$$

имеющее решение:

$$\mu' = 2/x; \quad e^\mu = C_1^2 x^2; C_1 = \text{const}. \quad (31)$$

С использованием решения (31) находим далее функцию e^λ и получаем окончательный вид метрики пространства-времени для рассматриваемой физической системы пылевидной материи и гравитационного поля при наличии его вихревой составляющей

$$\begin{aligned} ds^2 &= e^{-\omega_0^2 x^2} dx^2 + C_1^2 x^2 d\varphi^2 + e^{-\omega_0^2 x^2} dz^2 - dt^2; \\ 0 &\leq x < \infty. \end{aligned} \quad (32)$$

Полученную метрику можно расписать в развернутом виде в форме (5). Используя формулы (7), (10)–(12), определяем с помощью найденных значений для метрических коэффициентов ($e^v = 1$, $e^\mu = C_1^2 x^2$) остальные метрические коэффициенты ($E = e^t$, $B = e^p$):

$$E = 2\omega_0 x; \quad B = (C_1^2 - 4\omega_0^2)x^2. \quad (33)$$

Удобнее положить константу $C_1 = 2\omega_0 k$, $k > 0$, тогда коэффициент B запишется в виде:

$$B = 4\omega_0^2(k^2 - 1)x^2.$$

В результате метрика пространства-времени, формируемого вращающейся пылевидной материей и вихревым гравитационным полем, принимает вид:

$$\begin{aligned} ds^2 &= e^{-\omega_0^2 x^2} dx^2 + 4\omega_0^2(k^2 - 1)x^2 d\varphi^2 + \\ &+ e^{-\omega_0^2 x^2} dz^2 + 4\omega_0 x dt d\varphi - dt^2. \end{aligned} \quad (34)$$

Здесь постоянный множитель $4\omega_0^2(k^2 - 1)$ при метрическом коэффициенте $g_{\varphi\varphi}$ в зависимости от значения константы k в принципе может быть любого знака. Когда $k < 1$, этот множитель меньше нуля, и через каждую точку пространства-времени проходит замкнутая времениподобная кривая, а когда $k > 1$, множитель больше нуля, таких кривых нет, и причинность восстанавливается. Поэтому коэффициент k можно назвать параметром причинности. Подобную величину ранее мы уже вводили при рассмотрении метрик типа Геделя [11]. Решения уравнений Эйнштейна с замкнутыми времениподобными геодезическими в последнее время активно обсуждаются многими исследователями [32, 36–38].

Здесь интересно рассмотреть и другие геометрические свойства получившегося пространства-времени, в частности рассмотреть пространственную асимптотику, т. е. вычислить расстояние l удаленных точек при $x \rightarrow \infty$ от центра, где $x = 0$:

$$l = \int_0^\infty e^{\lambda/2} dx = \int_0^\infty e^{-\omega_0^2 x^2/2} dx. \quad (35)$$

Вычисляя этот определенный интеграл, используя формулу $\int_0^\infty e^{-x^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$, получаем:

$$l = \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{\omega_0}, \quad (36)$$

то есть точки, находящиеся на координатной бесконечности ($x \rightarrow \infty$), реально находятся на конечном расстоянии от центра. Это значит, что получившееся пространство-время замкнуто по цилиндрической радиальной координате x , т. е. по радиальному направлению от центральной оси.

Из третьего уравнения системы (29) находим плотность энергии ϵ вращающейся пылевидной материи:

$$\epsilon = \frac{4\omega_0^2}{\epsilon} e^{-\lambda} = \frac{4\omega_0^2}{\epsilon} e^{\omega_0^2 x^2}; \quad 0 \leq x < \infty, \quad (37)$$



которая экспоненциально возрастает с увеличением радиальной координаты x , т. е. от центра к границе, и $\varepsilon \rightarrow \infty$ при $x \rightarrow \infty$. В то же время в центре конфигурации при $x = 0$ плотность энергии конечна $\varepsilon(0) = 4\omega_0^2/\varepsilon$.

Важным свойством рассматриваемой физической системы является отсутствие в ней гравитационных сил, которые могут воздействовать на материальные частицы, рассматриваемые как пробные частицы, поскольку метрический коэффициент $g_{tt} = e^\nu$ при dt^2 в данном случае равен единице (см. формулу (28)), а через этот коэффициент и определяется гравитационная сила [39]:

$$\vec{F}_g = \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} (-\text{grad} \ln \sqrt{g_{tt}} + \sqrt{g_{tt}} (\vec{v} \times \vec{\omega})). \quad (38)$$

Здесь $\vec{v}$ – скорость пробной частицы, а $\vec{\omega}$ – угловая скорость системы отсчета. Для покоящейся пробной частицы, у которой скорость $\vec{v} = 0$, получаем:

$$\vec{F}_g = mc^2 (-\text{grad} \ln \sqrt{g_{tt}}). \quad (39)$$

Откуда следует, что $\vec{F}_g = 0$ при $g_{tt} = \text{const}$, как в рассмотренном выше случае, где $g_{tt} = e^\nu = 1$, т. е. для пробной частицы в пространстве рассмотренной конфигурации вращающейся пылевидной материи ситуация вполне аналогична, как и для такой же материальной частицы, находящейся в межгалактическом пространстве наблюдаемой Вселенной, где также $F_g = 0$.

Теперь перейдем к рассмотрению свойств аналогичной конфигурации самогравитирующей вращающейся идеальной жидкости, но с ненулевым давлением ($p \neq 0$), причем с предельным уравнением состояния $p = \varepsilon$, т. е. $p = \rho c^2$, где ρ – плотность массы. Материя с таким уравнением состояния или близким к нему могла образоваться на самых ранних временах от Начала, возможно, в виде кварк-глюонной плазмы [40]. Как показали результаты экспериментов в ЦЕРН на Большом адронном коллайдере (LHC) и в Брукхейвенской национальной лаборатории на Релятивистском коллайдере тяжелых ионов (RHIC), кварк-глюонная плазма имеет свойства идеальной жидкости [41, 42].

Гравитационные уравнения Эйнштейна (17) в рассматриваемом сейчас случае для состояния идеальной жидкости $p = \varepsilon$ будут следующие:

$$\begin{aligned} \lambda' \mu' + \lambda' \nu' + \mu' \nu' &= -4\omega_0^2 e^{-2\nu} + 4\varepsilon \varepsilon e^\lambda; \\ \mu'' + \mu'^2/2 + \mu' \nu'/2 &= 4\omega_0^2 e^{-2\nu}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \nu'' + \nu'^2/2 + \mu' \nu'/2 &= -4\omega_0^2 e^{-2\nu} + 4\varepsilon \varepsilon e^\lambda; \\ \lambda'' + \lambda' \nu'/2 + \lambda' \mu'/2 &= 0, \end{aligned} \quad (40)$$

а локальный закон сохранения энергии (18) примет вид:

$$\varepsilon' + u' \varepsilon = 0, \quad \varepsilon = \varepsilon_0 e^{-u}, \quad \varepsilon_0 = \text{const}. \quad (41)$$

Из последнего, четвертого, уравнения системы (40) получаем его первый интеграл

$$\lambda' = C_1 e^{-\frac{\mu+\nu}{2}}. \quad (42)$$

Для простоты положим $C_1 = 0$, откуда будем иметь $\lambda' = 0$, $e^\lambda = \text{const}$, а соответствующим выбором масштаба радиальной координаты x , можно сделать эту константу равной единице

$$e^\lambda = 1. \quad (43)$$

С учетом полученных формул (41) и (43) система уравнений (40) редуцируется к виду:

$$\begin{aligned} \mu' \nu' &= -4\omega_0^2 e^{-2\nu} + 4\varepsilon \varepsilon_0 e^{-\nu}; \\ \mu'' + \mu'^2/2 + \mu' \nu'/2 &= 4\omega_0^2 e^{-2\nu}; \\ \nu'' + \nu'^2/2 + \mu' \nu'/2 &= -4\omega_0^2 e^{-2\nu} + 4\varepsilon \varepsilon_0 e^{-\nu}. \end{aligned} \quad (44)$$

Вычитая из третьего уравнения системы (44) первое уравнение, получим еще уравнение

$$\nu'' + \nu'^2/2 - \mu' \nu'/2 = 0. \quad (45)$$

Первый интеграл этого уравнения имеет вид

$$e^{\mu/2} = C_2 \nu' e^{\nu/2}; C_2 = \text{const}. \quad (46)$$

Складывая далее третье уравнение системы (44) с полученным уравнением (45), получим в результате дифференциальное уравнение для определения функции $\nu(x)$:

$$2\nu'' + \nu'^2 = -4\omega_0^2 e^{-2\nu} + 4\varepsilon \varepsilon_0 e^{-\nu}. \quad (47)$$

Уравнение (47) также имеет первый интеграл, который удобно представить в форме:

$$\nu' = 2\omega_0 \sqrt{\frac{\varepsilon \varepsilon_0}{\omega_0^2} \nu e^{-\nu} + e^{-2\nu}}; \quad -\infty < \nu < +\infty. \quad (48)$$

Теперь, используя формулы (46) и (48), находим метрический коэффициент $g_{\phi\phi} = e^\mu$, выраженный через функцию $\nu(x)$:

$$e^\mu = C_2^2 4\omega_0^2 \left(\frac{\varepsilon \varepsilon_0}{\omega_0^2} \nu + e^{-\nu} \right); \quad -\infty < \nu < +\infty. \quad (49)$$

Здесь константа интегрирования C_2 играет роль размерного масштабного коэффициента (размерность $[C_2] = \text{см}$), чтобы метрический коэффициент e^μ был безразмерным.



Из формулы (48) можно найти определяемую квадратурой координату x как функцию от v :

$$x(v) = \frac{1}{2\omega_0} \int \frac{dv}{\sqrt{\frac{\alpha\epsilon_0}{\omega_0^2} v e^{-v} + e^{-2v}}}. \quad (50)$$

Используя полученные выше формулы (43), (49) и координатное условие $e^\lambda = e^\alpha$, мы можем выразить все величины, необходимые для описания характеристик гравитирующей материи (идеальной жидкости) и геометрии пространства-времени (как и радиальную координату x в (50)), через параметр v :

$$e^\lambda = e^\alpha = 1; \quad e^\mu = C_2^2 4\omega_0^2 \left(\frac{\alpha\epsilon_0}{\omega_0^2} v + e^{-v} \right); \quad (51)$$

$$p = \varepsilon = \varepsilon_0 e^{-\mu}.$$

Полученные формулы (51) ясно показывают, что более удобно использовать параметр v в качестве новой радиальной координаты, а формулу (50) рассматривать как преобразование от прежней радиальной координаты x к новой радиальной координате v , т. е. проведена v -параметризация задачи.

Далее из формулы (48) мы можем получить соотношение

$$dx^2 = \frac{dv^2}{4\omega_0^2 \left(\frac{\alpha\epsilon_0}{\omega_0^2} v e^{-v} + e^{-2v} \right)}. \quad (52)$$

В итоге метрика эффективной пространственноподобной поверхности (10), т. е. реального пространства, примет вид

$$dl^2 = \frac{dv^2}{4\omega_0^2 \left(\frac{\alpha\epsilon_0}{\omega_0^2} v e^{-v} + e^{-2v} \right)} +$$

$$+ 4C_2^2 \omega_0^2 \left(\frac{\alpha\epsilon_0}{\omega_0^2} v + e^{-v} \right) d\varphi^2 + dz^2;$$

$$-\infty < v < +\infty. \quad (53)$$

Из формул (51), (53) для полученного решения видно, что метрический коэффициент $g_{\varphi\varphi} = e^\mu$ во всем интервале изменения радиальной координаты v не обращается в нуль, имеет регулярный минимум в точке $v = v_0 = \ln \frac{\omega_0^2}{\alpha\epsilon_0}$, равный $4C_2^2 \alpha\epsilon_0 \left(\ln \frac{\omega_0^2}{\alpha\epsilon_0} + 1 \right) > 0$; по обеим сторонам от этого минимума он возрастает до много больших значений этого минимума, и все метрические коэффициенты являются гладкими и конечными функциями во всем интервале. Указанные свойства полученной метрики соответствуют по определению [20] тому, что это метрика описывает геометрию «кротовой норы».

Самое узкое место получившейся «кротовой норы», ее горловина, находится в точке, где коэффициент $g_{\varphi\varphi} = e^\mu$ минимален. В данном случае координата этой точки $v = \ln \frac{\omega_0^2}{\alpha\epsilon_0}$. Соответственно радиус горловины будет равен

$$a = 2C_2 \sqrt{\alpha\epsilon_0} \sqrt{\ln \frac{\omega_0^2}{\alpha\epsilon_0} + 1}.$$

В частном случае, когда $\omega_0^2 = \alpha\epsilon_0$, горловина находится в точке $v = 0$, а радиус горловины $a = 2C_2 \omega_0$. Здесь и выше масштабная константа C_2 имеет размерность квадрата длины (см²).

Интересным свойством получившейся «кротовой норы» является конечная величина гравитационной силы $\vec{F}_g$, действующей внутри нее на пробную частицу на всем протяжении этой «кротовой норы». В данном случае метрический коэффициент $g_{\mu\mu}$, через который вычисляется $\vec{F}_g$, равен e^ν , так что, используя формулу (39), для $\vec{F}_g$ получим:

$$\vec{F}_g = -\frac{mc^2}{2l} \vec{e}_v, \quad (54)$$

где $l = 1$ см (см – размерность длины в системе СГСМ).

Видно, что $\vec{F}_g$ имеет конечную величину по всей длине данной «кротовой норы», таким образом, получившаяся «кротовая нора» является проходимой.

Кроме того, эта гравитационная сила направлена на правое устье «кротовой норы», на входе, внутрь, т. е. $\vec{F}_g$ – гравитационная сила притяжения, поэтому со стороны внешнего наблюдателя данная «кротовая нора» будет выглядеть как обычный массивный астрофизический объект. При этом ускорение свободного падения g будет иметь величину $4.5 \cdot 10^{16}$ м/с².

У системы уравнений (40), (41), описывающей свойства стационарной конфигурации самогравитирующей идеальной жидкости с уравнением состояния $p = \varepsilon$ и при наличии вихревого гравитационного поля (как в рассмотренной выше задаче), есть еще интересное частное решение, когда $v = 0$. В этом варианте мы получаем соотношения:

$$e^\lambda = 1; \quad p = \varepsilon = \varepsilon_0 = \text{const}; \quad (55)$$

$$\alpha\epsilon_0 = \omega_0^2; \quad \mu'' + \mu'^2/2 = 4\omega_0^2.$$

Решение последнего уравнения:

$$e^\mu = a^2 \cosh^2(\sqrt{2}\omega_0 x); \quad -\infty < x < +\infty; \quad (56)$$

$$a = \text{const}.$$



В итоге метрика эффективной пространственно-подобной поверхности, т. е. реального пространства, будет иметь вид:

$$dl^2 = dx^2 + a^2 \cosh^2(\sqrt{2}\omega_0 x) d\varphi^2 + dz^2; \quad (57)$$

$$-\infty < x < +\infty.$$

Здесь, как и в общем решении (53), метрический коэффициент $g_{\varphi\varphi}(x) = e^{\mu}$ во всем интервале $(-\infty < x < +\infty)$ больше нуля и возрастает с увеличением радиальной координаты от минимального значения $g_{\varphi\varphi}$, при наличии центральной оси $e^{\mu} = 0$ для точек на этой оси и $e^{\mu} \rightarrow \infty$ на пространственной бесконечности, иначе говоря, как и в предыдущем общем решении, получилась «кротовая нора». Важной особенностью получившейся «кротовой норы» является отсутствие в ней гравитационной силы, поскольку метрический коэффициент $g_{tt} = 1$ при dt^2 (постоянный), и градиент от него равен нулю, так что в соответствии с формулой (39) гравитационная сила $\vec{F}_g = 0$, т. е. в данном случае получившаяся «кротовая нора» также является проходимой.

Заключение

Мы рассмотрели в рамках эйнштейновской теории гравитации (ОТО) свойства стационарных вращающихся конфигураций идеальной самогравитирующей сплошной среды в виде баротропной идеальной жидкости при наличии вихревого гравитационного поля, включая и очень интересный случай вакуумного объекта из одного вихревого гравитационного поля, который описывается вакуумными уравнениями Эйнштейна $R_{ik} = 0$ и представляет собой «кротовую нору».

Все рассмотренные объекты обладают особенно интересными свойствами, так как многие из них представляются в виде «кротовых нор». Образование «кротовых нор» в рассмотренных здесь случаях обусловлено свойствами вихревого гравитационного поля, поскольку у тензора энергии-импульса этого поля нарушается слабое энергетическое условие ($\rho + \varepsilon > 0$), у вихревого гравитационного поля $\rho + \varepsilon < 0$.

Показанная в данной работе возможность существования «кротовых нор», образованных одним лишь вихревым гравитационным полем, существующим *a priori*, и описываемых решениями вакуумных уравнений Эйнштейна $R_{ik} = 0$, дает основание предположить (speculation), что в нашей Вселенной уже существуют *a priori* такие «кротовые норы», т. е. порталы – своеобразные тоннели в пространстве, соединяющие

нас с далекими областями Вселенной или же с параллельными Вселенными. Остается проблема их найти.

Список литературы / References

1. Blanco-Pillado J. J., Cui Y., Kuroyanagi S., Lewicki M., Nardini G., Pieroni M., Rybak I., Lara Sousa L., Wachter J. M. Gravitational waves from cosmic strings in LISA: Reconstruction pipeline and physics interpretation. *J. Cosmol. Astropart. Phys.*, 2025, vol. 2025, iss. 05, art. 006. <https://doi.org/10.1088/1475-7516/2025/05/006>
2. Blasi S., Calibbi L., Mariotti A., Turbang K. Gravitational waves from cosmic strings in Froggatt-Nielsen flavour models. *J. High Energy Phys.*, 2025, vol. 2025, iss. 5, art. 19. [https://doi.org/10.1007/JHEP05\(2025\)019](https://doi.org/10.1007/JHEP05(2025)019)
3. Öner B. B., Yeciltae Ö. Quantum particle creation by cosmic strings in de Sitter spacetime. *Class. Quant. Grav.*, 2025, vol. 42, iss. 9, art. 095001. <https://doi.org/10.1088/1361-6382/adcb12>
4. Algaba J. C., Balokoviж M., Chandra S., Cheong W.-Y., Cui Y.-Z., D'Ammando F., Falcone A. D., Ford N. M., Giroletti M., Goddi C., Gurwell M. A., Hada K., Haggard D., Jorstad S., Kaur A., Kawashima T., Kerby S., Kim J.-Y., Kino M., Kravchenko E. V. [et al.]. Broadband multi-wavelength properties of M87 during the 2018 EHT campaign including a very high energy flaring episode. *Astron. Astrophys.*, 2024, vol. 692, art. A140. <https://doi.org/10.1051/0004-6361/202450497>
5. Kiehlmann S., de la Parra P. V., Sullivan A. G., Synani A., Lioudakis I., Readhead A. C. S., Graham M. J., Begelman M. C., Blandford R. D., Chatzioannou K., Ding Y., Harrison F., Homan D. C., Hovatta T., Kulkarni S. R., Lister M. L., Maiolino R., Max-Moerbeck W., Molina B., Mróz P. [et al.]. PKS 2131–021 – Discovery of strong coherent sinusoidal variations from radio to optical frequencies: Compelling evidence for a blazar supermassive black hole binary. *Astrophys. J.*, 2025, vol. 985, iss. 1, art. 59. <https://doi.org/10.3847/1538-4357/adc567>
6. Seo J., Ryu D., Kang H. Energy Spectrum and Mass Composition of Ultra-high-energy Cosmic Rays Originating from Relativistic Jets of Nearby Radio Galaxies. *Astrophys. J.*, 2025, vol. 988, iss. 2, art. 194. <https://doi.org/10.3847/1538-4357/ade678>
7. Birch P. Is the Universe rotating? *Nature*, 1982, vol. 298, iss. 5873, pp. 451–454. <https://doi.org/10.1038/298451a0>
8. Monteiro S. W. Jr., Tomimura N. A. Existence and causality of cylindrically symmetric cosmological models with rotating spin fluids. *Class. Quant. Grav.*, 1991, vol. 8, iss. 5, pp. 977–984. <https://doi.org/10.1088/0264-9381/8/5/021>
9. Mishra B., Vadrevu S. Cylindrically symmetric cosmological model of the universe in modified gravity. *Astrophys. Sp. Sci.*, 2017, vol. 362, iss. 2, art. 26. <https://doi.org/10.1007/s10509-017-3006-2>
10. Panov V. F., Pavelkin V. N., Kuvshinova E. V., Sandakova O. V. Kosmologiya s vrashcheniem [Cosmology with rotation]. Perm, Perm State University Publ., 2016. 224 p. (in Russian).



11. Krechet V. G., Oshurko V. B., Kisser A. E. Stationary Rotating Cosmological Model Without Violation of the Causal Structure. *Russ. Phys. J.*, 2022, vol. 65, iss. 6, pp. 937–943. <https://doi.org/10.1007/s11182-022-02716-z>
12. Su S.-C., Chu M.-C. Is the Universe Rotating? *Astrophys. J.*, 2009, vol. 703, iss. 1, pp. 354–361. <https://doi.org/10.1088/0004-637X/703/1/354>
13. Godiowski W. Global and Local Effects of Rotation: Observational Aspects. *Int. J. Mod. Phys. D*, 2011, vol. 20, iss. 09, pp. 1643–1673. <https://doi.org/10.1142/S0218271811019475>
14. Korotky V. A., Masár E., Obukhov Y. N. In the quest for cosmic rotation. *Universe*, 2020, vol. 6, iss. 1, art. 14. <https://doi.org/10.3390/universe6010014>
15. Morris M. S., Thorne K. S., Yurtsever U. Wormholes, time machines and the weak energy condition. *Phys. Rev. Lett.*, 1988, vol. 61, iss. 13, pp. 1446–1449. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.1446>
16. Morris M. S., Thorne K. S. Wormholes in spacetime and their use for interstellar travel: A tool for teaching general relativity. *Amer. J. Phys.*, 1988, vol. 56, iss. 5, pp. 395–412. <https://doi.org/10.1119/1.15620>
17. Krechet V. G. Topological and physical effects of rotation and spin in the general relativistic theory of gravitation. *Russ. Phys. J.*, 2007, vol. 50, iss. 10, pp. 1021–1025. <https://doi.org/10.1007/s11182-007-0147-8>
18. Krechet V. G., Sadovnikov D. V. Spin-spin interaction in general relativity and induced geometries with nontrivial topology. *Grav. Cosmol.*, 2009, vol. 15, iss. 4, pp. 337–340. <https://doi.org/10.1134/S0202289309040082>
19. Novikov I. D., Shatskiy A. A. Stability analysis of a Morris-Thorne-Bronnikov-Ellis wormhole with pressure. *J. Exp. Theor. Phys.*, 2012, vol. 114, iss. 5, pp. 801–804. <https://doi.org/10.1134/S1063776112040127>
20. Bronnikov K. A., Krechet V. G., Lemos J. P. S. Rotating cylindrical wormholes. *Phys. Rev. D*, 2013, vol. 87, iss. 8, art. 084060. <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.87.084060>
21. Bronnikov K. A., Krechet V. G. Potentially observable cylindrical wormholes without exotic matter in general relativity. *Phys. Rev. D*, 2019, vol. 99, iss. 8, art. 084051. <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.99.084051>
22. Bronnikov K. A., Sushkov S. V. Current Problems and Recent Advances in Wormhole Physics. *Universe*, 2023, vol. 9, iss. 2, art. 81. <https://doi.org/10.3390/universe9020081>
23. Bronnikov K. A., Kashargin P. E., Sushkov S. V. Possible Wormholes in a Friedmann Universe. *Universe*, 2023, vol. 9, iss. 11, art. 465. <https://doi.org/10.3390/universe9110465>
24. Bolokhov S. V., Skvortsova M. Correspondence between quasinormal modes and grey-body factors of spherically symmetric traversable wormholes. *J. Cosmol. Astropart. Phys.*, 2025, vol. 2025, iss. 04, art. 025. <https://doi.org/10.1088/1475-7516/2025/04/025>
25. Bolokhov S. V., Konoplya R. A. Circumventing quantum gravity: Black holes evaporating into macroscopic wormholes. *Phys. Rev. D*, 2025, vol. 111, iss. 6, art. 064007. <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.111.064007>
26. Hoenselaers C., Vishveshwara C. V. A relativistically rotating fluid cylinder. *Gen. Rel. Grav.*, 1979, vol. 10, iss. 1, pp. 43–51. <https://doi.org/10.1007/BF00757022>
27. Santos N. O., Mondaini R. P. Rigidly rotating relativistic generalized dust cylinder. *Il Nuovo Cimento B*, 1982, vol. 72, iss. 1, pp. 13–20. <https://doi.org/10.1007/BF02894930>
28. Davidson W. Barotropic perfect fluid in steady cylindrically symmetric rotation. *Class. Quant. Grav.*, 1997, vol. 14, iss. 1, pp. 119–127. <https://doi.org/10.1088/0264-9381/14/1/013>
29. Ivanov B. V. On rigidly rotating perfect fluid cylinders. *Class. Quant. Grav.*, 2002, vol. 19, iss. 14, pp. 3851–861. <https://doi.org/10.1088/0264-9381/19/14/323>
30. Ivanov B. V. Rigidly rotating cylinders of charged dust. *Class. Quant. Grav.*, 2002, vol. 19, iss. 20, pp. 5131–5139. <https://doi.org/10.1088/0264-9381/19/20/307>
31. Bonnor W. B., Steadman B. R. A vacuum exterior to Maitra's cylindrical dust solution. *Gen. Rel. Grav.*, 2009, vol. 41, iss. 6, pp. 1381–1387. <https://doi.org/10.1007/s10714-008-0725-2>
32. Bolokhov S. V., Bronnikov K. A., Skvortsova M. V. Rotating Cylinders with Anisotropic Fluids in General Relativity. *Grav. Cosmol.*, 2019, vol. 25, iss. 2, pp. 122–130. <https://doi.org/10.1134/S020228931902004X>
33. Krechet V. G., Oshurko V. B., Baidin A. E. On the Properties of Stationary Distributions of Gravitational Vortex Fields and Continuous Media. *Russ. Phys. J.*, 2020, vol. 63, iss. 6, pp. 1045–1054. <https://doi.org/10.1007/s11182-020-02135-y>
34. Krechet V. G., Oshurko V. B., Baidin A. E. Gravitational and Electromagnetic Effects in the Configuration of a Rotating Electrically Charged Ideal Liquid. *Russ. Phys. J.*, 2022, vol. 65, iss. 3, pp. 410–422. <https://doi.org/10.1007/s11182-022-02649-7>
35. Krechet V. G., Oshurko V. B., Sinil'shchikova I. V. On the possible existence of wormholes without gravitational forces. *Russ. Phys. J.*, 2016, vol. 59, iss. 1, pp. 32–40. <https://doi.org/10.1007/s11182-016-0735-6>
36. Luminet J.-P. Closed Timelike Curves, Singularities and Causality: A Survey from Gödel to chronological protection. *Universe*, 2021, vol. 7, iss. 1, art. 12. <https://doi.org/10.3390/universe7010012>
37. Nguyen H. K., Lobo F. S. N. Closed Timelike Curves Induced by a Buchdahl-Inspired Vacuum Spacetime in R2 Gravity. *Universe*, 2023, vol. 9, iss. 11, art. 467. <https://doi.org/10.3390/universe9110467>
38. Ahmed F., de Souza J. C. R., Santos A. F. Vacuum spacetime with closed time-like curves in the context of Ricci-inverse gravity. *Mod. Phys. Lett. A*, 2025, vol. 40, iss. 4, art. 2450221. <https://doi.org/10.1142/S0217732324502213>
39. Landau L. D., Lifshitz E. M. Course of Theoretical Physics: in 10 vols. Vol. 2. The Classical Theory of Fields: 4th edition. Amsterdam, Boston, Heidelberg, London, New York, Oxford, Paris, San Diego, San Francisco, Singapore, Sydney, Tokyo, Butterworth-Heinemann, 1980. 444 p.



40. CERN Press Release: *New State of Matter created at CERN*, Feb. 10, 2000. Available at: <https://home.cern/news/press-release/cern/new-state-matter-created-cern> (accessed September 21, 2025)
41. Tannenbaum M. J. Recent results in relativistic heavy ion collisions: From a new state of matter to the perfect fluid. *Rep. Prog. Phys.*, 2006, vol. 69, iss. 7, pp. 2005–2059. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/69/7/R01>
42. Heinz U. Quark-gluon soup – The perfectly liquid phase of QCD. *Int. J. Mod. Phys. A*, 2015, vol. 30, iss. 2, art. 1530011. <https://doi.org/10.1142/S0217751X15300112>

Поступила в редакцию 27.06.2025; одобрена после рецензирования 06.08.2025;
принята к публикации 10.09.2025; опубликована 28.11.2025

The article was submitted 27.06.2025; approved after reviewing 06.08.2025;
accepted for publication 10.09.2025; published 28.11.2025



РАДИОФИЗИКА, ЭЛЕКТРОНИКА, АКУСТИКА

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 408–413
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 408–413
<https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-408-413>, EDN: GQHDT E

Научная статья
УДК 517.9

Об особенностях применения метода вспомогательной системы при диагностике режима обобщенной хаотической синхронизации

П. П. Губенко, А. А. Короновский, О. И. Москаленко✉

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

Губенко Павел Петрович, студент 1-го курса магистратуры Института физики, pasha.220902@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0003-4012-1878>

Короновский Алексей Александрович, доктор физико-математических наук, проректор по научной работе и цифровому развитию, заведующий кафедрой физики открытых систем, alexey.koronovskii@sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3585-317X>, AuthorID: 73470

Москаленко Ольга Игоревна, доктор физико-математических наук, начальник управления научной деятельности, профессор кафедры физики открытых систем, o.i.moskalenko@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-5727-5169>, AuthorID: 150252

Аннотация. Рассматриваются особенности применения метода вспомогательной системы, проявляющиеся при диагностике режима обобщенной хаотической синхронизации в системах со сложной топологией аттрактора, обладающих внутренней симметрией. Учитывая, что симметрия динамики автономной ведомой системы при наличии воздействия со стороны ведущего осциллятора может приводить к появлению мультистабильности, корректное определение обобщенной синхронизации с помощью метода вспомогательной системы может быть затруднено. Предлагается модификация критерия обобщенной синхронизации, которая позволяет повысить надежность метода в подобных случаях.

Ключевые слова: обобщенная синхронизация, метод вспомогательной системы, симметричная топология аттрактора, отображение, мультистабильность

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Регионального научно-образовательного математического центра «Математика технологий будущего» (соглашение 075-02-2025-1635 от 27 февраля 2025 г.).

Для цитирования: Губенко П. П., Короновский А. А., Москаленко О. И. Об особенностях применения метода вспомогательной системы при диагностике режима обобщенной хаотической синхронизации // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 408–413. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-408-413>, EDN: GQHDT E

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

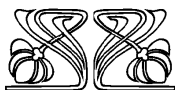
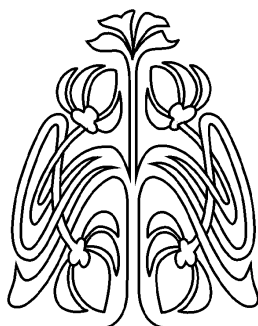
Article

On peculiarities of application of the auxiliary system approach for the generalized chaotic synchronization regime detection

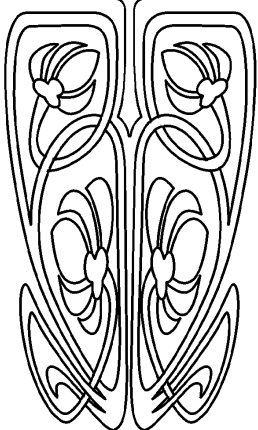
P. P. Gubenko, A. A. Koronovskii, O. I. Moskalenko✉

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

© Губенко П. П., Короновский А. А., Москаленко О. И., 2025



НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ





Pavel P. Gubenko, pasha.220902@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0003-4012-1878>
Aleksei A. Koronovskii, alexey.koronovskii@sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3585-317X>, AuthorID: 73470
Ol'ga I. Moskalenko, o.i.moskalenko@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-5727-5169>, AuthorID: 150252

Abstract. Background and Objectives: In this paper we consider the peculiarity that arises during the generalized chaotic synchronization regime detection in systems with a complex attractor topology having internal symmetry. **Materials and Methods:** As the system under study we consider two modified Guckenheimer – Holmes discrete maps coupled unidirectionally. To detect the presence of generalized synchronization we calculate the spectrum of Lyapunov exponents and propose the modification of auxiliary system approach. **Results:** Considering that the symmetry in the dynamics of the autonomous response system can lead to multistability due to the drive system signal, the correct detection of generalized synchronization with the help of the auxiliary system approach may be complicated. Modification of the generalized synchronization criterion, which allows increasing the reliability of the method in such cases, has been proposed. **Conclusion:** The results obtained with the help of modified auxiliary system approach are in a good agreement with the calculation of Lyapunov exponents.

Keywords: generalized synchronization, auxiliary system approach, symmetric attractor topology, discrete map, multistability

Acknowledgements: This work was supported by the Regional Scientific and Educational Mathematical Center “Mathematics of Future Technologies” (Agreement no. 075-02-2025-1635, February 27, 2025).

For citation: Gubenko P. P., Koronovskii A. A., Moskalenko O. I. On peculiarities of application of the auxiliary system approach for the generalized chaotic synchronization regime detection. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 408–413 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-408-413>, EDN: GQHDTE

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

Известно, что взаимодействующие хаотические системы демонстрируют явление хаотической синхронизации, которая может быть различных типов [1, 2]. Значительный интерес вызывает обобщенная хаотическая синхронизация [3], когда между состояниями взаимодействующих систем устанавливается функциональная зависимость (но при этом сами состояния систем оказываются различными), а также перемежающееся поведение, наблюдающееся вблизи границы установления этого синхронного режима [4].

В последнее время обобщенная хаотическая синхронизация привлекает внимание не только с фундаментальной точки зрения, но и благодаря своим прикладным перспективам: от безопасной передачи информации в телекоммуникациях [5] до моделирования и изучения динамики отдельных нейронов и нейронных сетей и машинного обучения [6, 7].

Для детектирования и анализа явления обобщенной хаотической синхронизации апробированы и хорошо себя зарекомендовали такие методы, как метод вспомогательной системы [8], расчёт показателей Ляпунова [9, 10], метод ближайших соседей [3, 11] и др. Среди названных методов метод вспомогательной системы заслуживает особого внимания благодаря своей простоте, наглядности и универсальности. Он легко реализуем, применим для анализа синхронизма в любой момент времени, и, следовательно, в отличие от других методов его можно с успехом использовать для выделения синхронных и асинхронных фаз в режиме перемежающегося обобщенной хаотической синхронизации. Фактически метод вспомогательной системы является универсальным общепризнан-

ным стандартом при изучении обобщенной хаотической синхронизации и связанных с ней эффектов. Выявленным на сегодняшний день ограничением для использования метода является его неприменимость в системах с взаимной связью [12], в том числе, когда эта связь между отдельными колебательными системами реализуется опосредованно, например, в сетях со сложной топологией связей.

Ниже будет показано, что использование метода вспомогательной системы может приводить к особенностям поведения ведомых многомерных динамических систем, обладающих в автономном режиме внутренней симметрией хаотического аттрактора. Это связано с тем, что подобная симметрия при наличии внешнего воздействия со стороны ведущего осциллятора может приводить к появлению мультистабильности в совместной динамике рассматриваемых систем, и при условии, что такие мультистабильные состояния оказываются устойчивыми с точки зрения критерия обобщенной синхронизации, в системе может возникнуть режим мультистабильной обобщенной хаотической синхронизации. Похожая ситуация была впервые описана в работе [13] и, чуть позже, в [14], при исследовании синхронизации идентичных хаотических осцилляторов с непрерывным временем, обладающих внутренней симметрией и связанных по классической схеме [15], предложенной Л. М. Пекорой и Т. Л. Кэрролом. В рассматриваемых случаях при одних и тех же значениях управляющих параметров наряду с режимом идентичной (полной) синхронизации наблюдались один или несколько других синхронных режимов, диагностированных как режимы обобщенной синхронизации. В литературе было также описано возникновение режима биста-



бильной обобщенной хаотической синхронизации при воздействии осциллятора Ресслера на систему Лоренца [16]. Наличие же мультистабильности, как известно из [8], может приводить к некорректной интерпретации результатов, полученных с помощью метода вспомогательной системы, если ведомая и вспомогательная системы стартуют из начальных условий, принадлежащих бассейнам притяжения разных аттракторов. При этом границы бассейнов притяжения в фазовом пространстве могут быть устроены весьма сложно и иметь фрактальную границу [13, 17].

В работе рассматривается, к каким нежелательным последствиям может приводить внутренняя симметрия ведомой системы при использовании метода вспомогательной системы, а также предлагается способ модификации метода детектирования обобщенной синхронизации для таких случаев. Выявленные особенности метода вспомогательной системы иллюстрируются на модельном примере систем с дискретным временем – двух связанных однонаправленной связью модифицированных отображений Гукенхаймера – Холмса [18] с различными значениями параметров, описываемых системой уравнений:

$$\begin{aligned}x_{n+1} &= f(b, x_n, y_n) = by'_n - x_n, \\y_{n+1} &= g(a, x_n, y_n) = ay_n(1 - x_n), \\x'_{n+1} &= f(b', x'_n, y'_n) + \varepsilon(f(b, x_n, y_n) - f(b', x'_n, y'_n)), \\y'_{n+1} &= g(a', x'_n, y'_n).\end{aligned}\quad (1)$$

Здесь x, y – координаты динамической системы, a, b – управляющие параметры, ε – параметр связи. Величины без штрихов относятся к ведущей системе, штрихованные величины характеризуют

ведомую систему. Значения управляющих параметров были выбраны такими, что и ведущая, и ведомая системы характеризуются двулистной структурой хаотического аттрактора (рис. 1), симметричной относительно оси координат x или x' соответственно.

Как известно, суть метода вспомогательной системы [8] заключается в одновременном рассмотрении, наряду с динамикой ведущей и ведомой систем, поведения вспомогательной системы, которая идентична ведомой, но стартует с других начальных условий (принадлежащих тому же бассейну притяжения). Можно использовать и набор таких систем [19]. В случае, когда в исследуемой системе наблюдается режим обобщенной хаотической синхронизации, после завершения переходного процесса состояния ведомой (x'_n, y'_n) и вспомогательной (x''_n, y''_n) систем становятся идентичными, и, соответственно, величина, трактуемая как расстояние между ними (мера), оказывается равной нулю во все моменты времени наблюдения.

При значениях параметра связи ε меньше критического ε_c , соответствующего порогу установления синхронного режима, (в том числе и в случае режима перемежающейся обобщенной хаотической синхронизации [20]) существуют моменты времени, в которые состояния ведомой и вспомогательной систем не совпадают, а средняя мера отличия этих состояний, определяемая на конечной временной реализации длины N как

$$D(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N |x'_i(\varepsilon) - x''_i(\varepsilon)| + |y'_i - y''_i|, \quad (2)$$

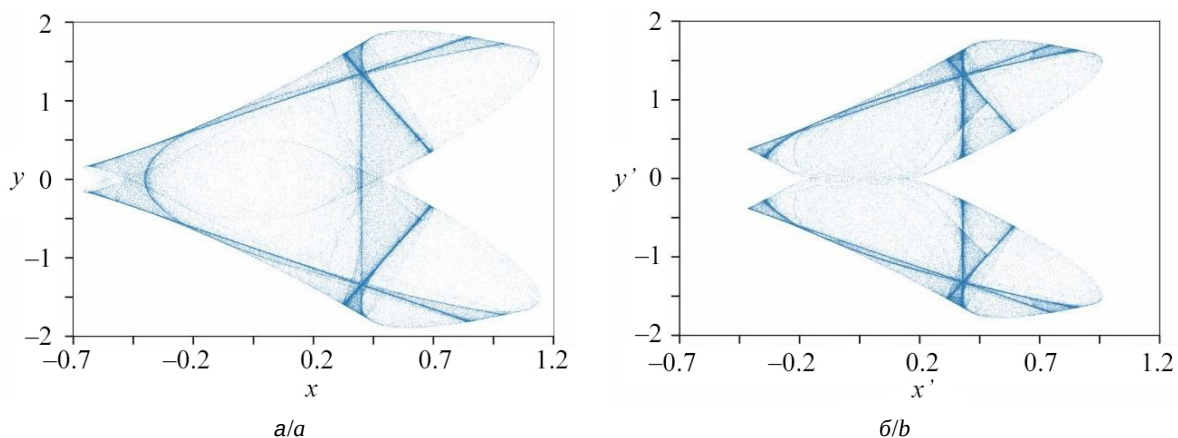


Рис. 1. Фазовые портреты для автономных ведущей (а) и вспомогательной (б) систем ($a = 1.815$, $a' = 1.775$, $b = b' = 0.5$, $\varepsilon = 0$)

Fig. 1. Phase portraits for autonomous drive (a) and auxiliary (b) systems ($a = 1.815$, $a' = 1.775$, $b = b' = 0.5$, $\varepsilon = 0$)



принимает положительное значение. Значение параметра связи ϵ , при котором величина $D(\epsilon)$ оказывается равной нулю, и является критическим значением ϵ для параметра связи ϵ .

Как правило, критическое значение параметра связи ϵ , понимаемое в указанном смысле, оказывается близким к значению, при котором старший положительный показатель Ляпунова управляемой (ведомой) системы становится отрицательным [8, 10]. (Соответственно, переход старшего условного показателя Ляпунова от положительных значений к отрицательным часто используется в качестве критерия установления режима обобщенной хаотической синхронизации).

Однако для исследуемой системы (1) величина $D(\epsilon)$ может значительно отличаться от нуля даже для значений параметра связи $\epsilon > \epsilon_{GS} = 0.645$, при которых старший показатель Ляпунова ведомой системы (показатель Λ_2 на рис. 2, б) оказывается существенно отрицательным при выбранных значениях управляющих параметров. Это означа-

ет, что в анализируемой системе (1) для значений параметра связи, при которых с помощью метода расчета спектра показателей Ляпунова однозначно диагностируется наличие режима обобщенной хаотической синхронизации, метод вспомогательной системы дает существенно противоречивые результаты (рис. 2, а), зависящие от начальных условий ведомой и вспомогательной систем.

Как следует из результатов проведенных исследований, подобная особенность метода вспомогательной системы обусловлена возникающей бистабильностью, связанной с внутренней симметрией ведомой системы, в силу которой поведение рассматриваемых связанных осцилляторов оказывается идентичным с точностью до замены переменной y' на $(-y')$, и, соответственно, такая замена не влияет на оператор эволюции ведомой системы. Именно бистабильность, возникающая при наличии воздействия со стороны ведущей системы, в силу внутренней симметрии ведомой системы приводит к противоречивым результатам диагностирования режима обобщенной

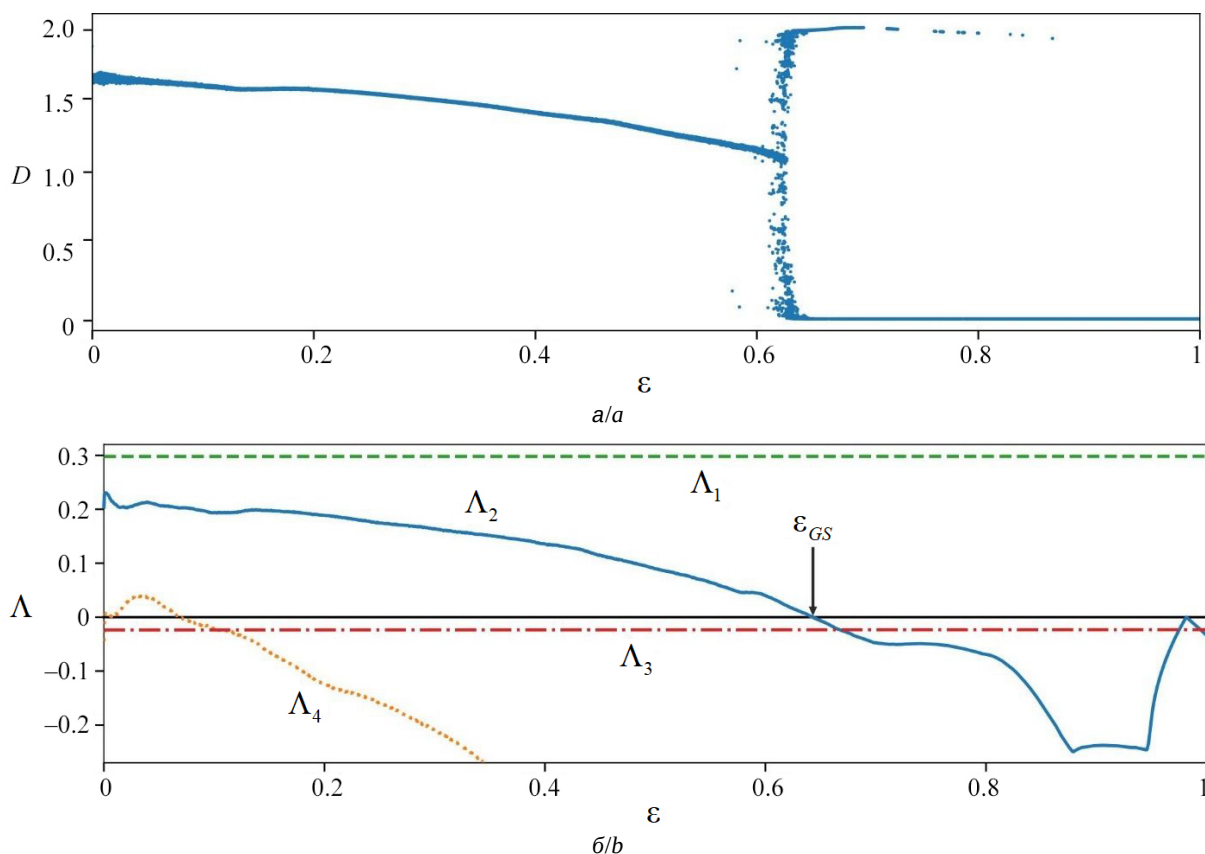


Рис. 2. Зависимости: средней меры между состояниями ведомой и вспомогательной систем $D(\epsilon)$ (а) и четырех показателей Ляпунова для исследуемой системы (1) от величины параметра связи ϵ (б)

Fig. 2. Dependencies of the average measure between states of the response and auxiliary systems $D(\epsilon)$ (a) and four Lyapunov exponents of the system under study (1) on the coupling parameter ϵ (b)



хаотической синхронизации с помощью метода вспомогательной системы.

Как следствие бистабильности, в режиме обобщенной хаотической синхронизации, когда собственная динамика ведомой системы оказывается подавленной за счет воздействия со стороны ведущей системы [21], у ведомой системы при одних и тех же значениях управляющих параметров и одном и том же состоянии ведущей системы существуют два симметричных состояния (отличающихся только знаком переменной y'), в которых она может находиться. Иными словами, для поведения ведомой системы (а, соответственно, и вспомогательной) в этом случае оказывается характерна бистабильность. Соответственно, если ведомая и вспомогательная системы находятся в одинаковых состояниях ($y'y'' > 0$), то величина $D(\epsilon)$ равна нулю и метод вспомогательной системы диагностирует синхронный режим. Наоборот, $D(\epsilon)$ сильно отличается от нуля, когда ведомая и вспомогательная системы находятся в разных состояниях ($y'y'' < 0$) и в этом случае, несмотря на наличие обобщенной синхронизации, метод вспомогательной системы будет показывать отсутствие синхронизма.

Метод вспомогательной системы за долгие годы применения из-за его уже называвшихся достоинств стал весьма популярным при изучении обобщенной хаотической синхронизации. Часто исследователи ограничиваются только им, не применяя другие, более сложные в реализации методы. Можно отметить, что подобный подход в подавляющем большинстве случаев оказывается полностью оправданным, но, как видно из вышеприведенных данных, в случаях, когда ведомая система обладает внутренней симметрией (как рассматривалось вы-

ше) мультистабильность, обусловленная этой симметрией, может сыграть с исследователями злую шутку – метод вспомогательной системы будет детектировать асинхронную динамику, несмотря на установление режима обобщенной хаотической синхронизации. Следует отметить, что ситуация будет осложнена также ещё и тем, что возникающая из-за внутренней системы мультистабильность (бистабильность в рассмотренном случае) оказывается выражена не очень явно – аттрактор ведомой системы при этом не претерпевает каких-либо ярко выраженных качественных изменений, которые могли бы навести на мысль о том, что в системе имеет место мультистабильность.

Очевидно, что такую особенность метода вспомогательной системы следует учитывать при изучении режима обобщенной хаотической синхронизации и перемежающейся обобщенной хаотической синхронизации. В подобных случаях, когда ведомая система характеризуется такой внутренней симметрией, следует скорректировать вид характеристики (2) с использованием абсолютных величин переменных, что позволяет учесть вышеописанную особенность поведения изучаемых систем:

$$D'(\epsilon) = \sum_{i=0}^N |x'_i(\epsilon) - x''_i(\epsilon)| + ||y'_i| - |y''_i||. \quad (3)$$

Такой подход позволяет однозначно диагностировать режим обобщенной хаотической синхронизации в подобных системах в полном соответствии с поведением спектра показателей Ляпунова (рис. 3).

Подведем итоги. В настоящей работе описана особенность, ограничивающая применимость метода вспомогательной системы, которая может возникнуть при диагностике обобщенной хаотической

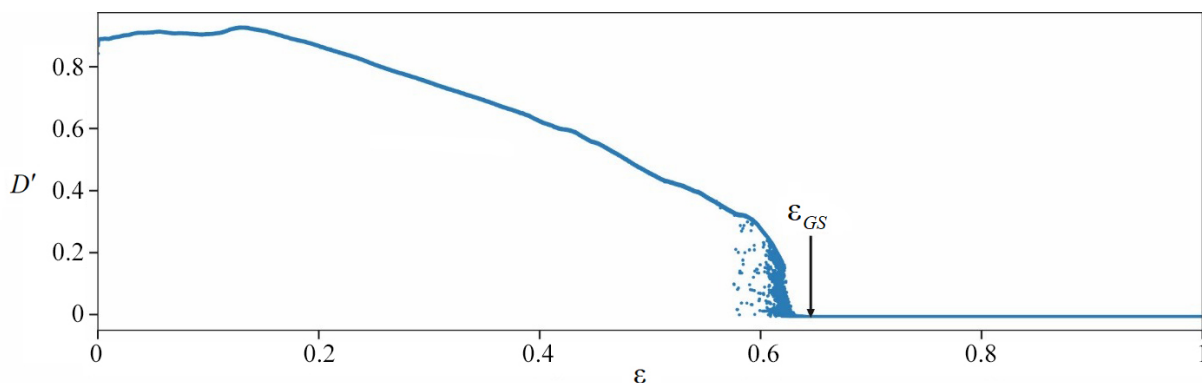


Рис. 3. Зависимость модифицированной средней меры между состояниями ведомой и вспомогательной систем $D'(\epsilon)$ от величины параметра связи ϵ

Fig. 3. Dependencies of the modified average measure between states of the response and auxiliary systems $D'(\epsilon)$ on the coupling parameter ϵ



синхронизации в системах со сложной топологией аттрактора, обладающих внутренней симметрией. Предложенная адаптация метода вспомогательной системы позволяет повысить его надежность в подобных случаях, что расширяет область его применимости для анализа сложных многомерных систем. В то же самое время следует иметь в виду, что предложенный в работе способ модификации метода детектирования обобщенной синхронизации имеет ограниченную область применения – его можно использовать только для систем, обладающим вполне определенным видом симметрии. Для иных систем с мультистабильностью и иных видов симметрии он является неприменимым.

Список литературы / References

1. Balanov A. G., Janson N. B., Postnov D. E., Sosnovtseva O. V. *Synchronization: From Simple to Complex*. Berlin, Springer, 2009. XIV, 426 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-540-72128-4>
2. Pikovsky A., Rosenblum M., Kurths J. *Synchronization: A Universal Concept in Nonlinear Sciences*. Cambridge, Cambridge University Press, 2001. XIX, 411 p. <https://doi.org/10.1119/1/1475332>
3. Rulkov N. F., Sushchik M. M., Tsimring L. S., Abarbanel H. D. I. Generalized synchronization of chaos in directionally coupled chaotic systems. *Phys. Rev. E*, 1995, vol. 51, pp. 980–994. <https://www.doi.org/10.1103/PhysRevE.51.980>
4. Koronovskii A. A., Moskalenko O. I., Selskii A. O. Intermittent generalized synchronization and modified system approach: Discrete maps. *Phys. Rev. E*, 2024, vol. 109, art. 064217. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.109.064217>
5. Koronovskii A. A., Moskalenko O. I., Hramov A. E. On the use of chaotic synchronization for secure communication. *Phys. Usp.*, 2009, vol. 52, no. 12, pp. 1213–1238. <https://www.doi.org/10.3367/UFNe.0179.200912c.1281>
6. Kulagin N. D., Andreev A. V., Koronovskii A. A., Moskalenko O. I., Sergeev A. P., Badarin A. A., Hramov A. E. Intermittency in predicting the behavior of stochastic systems using reservoir computing. *Phys. Rev. E*, 2025, vol. 111, art. 024209. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.111.024209>
7. Hramov A. E., Kulagin N. D., Pisarchik A. N., Andreev A. V. Strong and weak prediction of stochastic dynamics using reservoir computing. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 2025, vol. 35, art. 033140. <https://doi.org/10.1063/5.0252908>
8. Abarbanel H. D. I., Rulkov N. F., Sushchik M. M. Generalized synchronization of chaos: The auxiliary system approach. *Phys. Rev. E*, 1996, vol. 53, pp. 4528–4535. <https://www.doi.org/10.1103/PhysRevE.53.4528>
9. Kocarev L., Parlitz U. Generalized synchronization, predictability, and equivalence of unidirectionally coupled dynamical systems. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, vol. 76, pp. 1816–1819. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.76.1816>
10. Pyragas K. Properties of generalized synchronization of chaos. *Nonlinear Analysis: Modelling and Control (Vilnius, IMI)*, 1998, no. 3, pp. 101–129. <https://doi.org/10.15388/NA.1998.3.0.15261>
11. Zheng Z., Hu G. Generalized synchronization versus phase synchronization. *Phys. Rev. E*, 2000, vol. 62, pp. 7882–7885. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.62.7882>
12. Moskalenko O. I., Koronovskii A. A., Hramov A. E. Inapplicability of an auxiliary-system approach to chaotic oscillators with mutual-type coupling and complex networks. *Phys. Rev. E*, 2013, vol. 87, art. 064901. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.87.064901>
13. González-Miranda J. M. Synchronization of symmetric chaotic systems. *Phys. Rev. E*, 1996, vol. 53, pp. 5656–5669. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.53.5656>
14. González-Miranda J. M. Bistable generalized synchronization of chaotic systems. *Computer Physics Communications*, 1999, vol. 121–122, pp. 429–431.
15. Pecora L. M., Carroll T. L. Synchronization in chaotic systems. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, vol. 64, pp. 821–824. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.64.821>
16. Guan S., Lai C.-H., Wei G. W. Bistable chaos without symmetry in generalized synchronization. *Phys. Rev. E*, 2005, vol. 71, art. 036209. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.71.036209>
17. Grebogi C., Ott E., Yorke J. A. Fractal basin boundaries, long-lived chaotic transients, and unstable-unstable pair bifurcation. *Phys. Rev. Lett.*, 1983, vol. 50, pp. 935–938. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.50.935>
18. Proshin Yu. N., Shakirov M. A. *Modelirovanie i vizualizatsiya neline'nykh dinamicheskikh sistem. Chast' 1. Tochechnye otobrazheniya* [Modeling and Visualization of Nonlinear Dynamic Systems. Part 1. Point Mappings]. Kazan, Kazan State University Publ., 2017. 36 p. Available at: https://kpfu.ru/portal/docs/F1367493855/Tochechnye_otobrazheniya.pdf (accessed September 20, 2025) (in Russian).
19. Moskalenko O. I., Koronovskii A. A., Selskii A. O., Evstifeev E. V. A Method to detect the characteristics of intermittent generalized synchronization based on calculation of probability of the synchronous regime observation. *Tech. Phys. Lett.*, 2024, vol. 50, pp. 209–212. <https://doi.org/10.1134/S1063785023180116>
20. Hramov A. E., Koronovskii A. A. Intermittent generalized synchronization in unidirectionally coupled chaotic oscillators. *Europhys. Lett.*, 2005, vol. 70, pp. 169–175. <https://doi.org/10.1209/epl/i2004-10488-6>
21. Hramov A. E., Koronovskii A. A. Generalized synchronization: A modified system approach. *Phys. Rev. E*, 2005, vol. 71, art. 067201. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.71.067201>

Поступила в редакцию 23.06.2025; одобрена после рецензирования 18.08.2025; принята к публикации 10.09.2025; опубликована 28.11.2025

The article was submitted 23.06.2025; approved after reviewing 18.08.2025; accepted for publication 10.09.2025; published 28.11.2025



Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 414–424

Izvestiya of Saratov University. Physics, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 414–424

<https://fizika.sgu.ru>

<https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-414-424>, EDN: IKBCSO

Научная статья

УДК 537.311.6:621.793

Разработка прототипа гибкой антенны с пассивирующим слоем для электроимпедансных сенсоров



А. А. Сердобинцев[✉], И. О. Кожевников, Е. А. Рябов, О. И. Гуслякова, Е. С. Прихожденко

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

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

Илья Олегович Кожевников, заведующий лабораторией полупроводниковой электроники кафедры твердого тела, kozhevnikov_io@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8911-3084>, AuthorID: 683534

Евгений Александрович Рябов, инженер учебной лаборатории полупроводниковой электроники кафедры физики твердого тела, ryabovaea@sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4777-7346>, AuthorID: 1045631

Ольга Игоревна Гуслякова, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории «Биомедицинская фотоакустика», olga.gusliakova17@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-8387-0711>, AuthorID: 1051902

Прихожденко Екатерина Сергеевна, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры инноватики, prikhozhenko@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-2700-168X>, AuthorID: 850345

Аннотация. Потребность в гибкой электронике для нужд мониторинга параметров жизнедеятельности человека с помощью носимых устройств дала толчок развитию гибких антенн. Материалы, используемые для создания антенн разнообразны, однако остается потребность в определении оптимальной конструкции, обеспечивающей как долговечность, так и высокую эффективность. В настоящей работе приведены результаты исследований по обоснованию конструкции и технологии изготовления прототипов гибких петлевых рамочных антенн на полиимидной подложке с помощью магнетронного напыления и лазерной абляции. Установлено, что абляция медного слоя затруднена, что приводит к неполной деметаллизации полиимидной подложки и короткому замыканию формируемых антенн. Кроме того, медь подвержена окислению, что приводит к ухудшению параметров гибких антенн со временем. Это послужило причиной добавления дополнительного пассивирующего металлического слоя из никеля или титана поверх слоя меди. Влияние пассивирующего слоя на качество лазерной деметаллизации (абляции) медного тонкопленочного покрытия гибких подложек из полиимида было оценено экспериментально. Пассивирующий слой никеля значительно улучшил качество деметаллизации, в то время как при использовании титана для пассивации наблюдается большое количество остаточного металла в виде застывших микрокапель в деметаллизированных областях. На основе металлизированного полиимида с никелевым пассивирующим слоем изготовлены прототипы петлевых рамочных антенн с частотой резонанса 3.75 ГГц. Результаты экспериментов с готовыми антеннами продемонстрировали значительную чувствительность частоты резонанса к изгибу в диапазоне углов от -60° до $+60^\circ$, что открывает возможности для использования таких антенн в качестве датчиков микроперемещений. При этом разработанные и реализованные прототипы антенн имеют коэффициент отражения не выше -17 дБ в диапазоне углов изгиба от -100° до $+100^\circ$, что позволяет использовать их в качестве основы электроимпедансных сенсоров.

Ключевые слова: гибкие антенны, лазерная абляция, электроимпедансные сенсоры, пассивация меди

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-79-10270, <https://rscf.ru/project/22-79-10270/>)

Для цитирования: Сердобинцев А. А., Кожевников И. О., Рябов Е. А., Гуслякова О. И., Прихожденко Е. С. Разработка прототипа гибкой антенны с пассивирующим слоем для электроимпедансных сенсоров // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 414–424. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-414-424>, EDN: IKBCSO

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

Article

Development of a prototype of flexible antennas with a passivation layer for electrical impedance sensors

A. A. Serdobintsev[✉], I. O. Kozhevnikov, E. A. Ryabov, O. I. Gusliakova, E. S. Prikhozhenko

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

© Сердобинцев А. А., Кожевников И. О., Рябов Е. А., Гуслякова О. И., Прихожденко Е. С., 2025



Alexey A. Serdobintsev, serdobintsevaa@sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3281-8352>, AuthorID: 238828

Ilya O. Kozhevnikov, kozhevnikov_io@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0001-8911-3084>, AuthorID: 683534

Evgenii A. Ryabov, ryabovaea@sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4777-7346>, AuthorID: 1045631

Olga I. Gusliakova, olga.gusliakova17@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0001-8387-0711>, AuthorID: 1051902

Ekaterina S. Prikhozhenko, prikhozhenko@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-2700-168X>, AuthorID: 850345

Abstract. Background and Objectives: The need for flexible electronics for biomedical and communications applications has completely transformed the field of antenna design and has given rise to the development of flexible antennas. The materials used to create antennas are diverse, but there remains a need to define a design that provides both durability and high performance. **Materials and Methods:** The test samples were flexible polyimide substrates 500 μm thick, on which layers of Cu and Ti or Ni were formed by vacuum magnetron sputtering. A Robvac VSM300 vacuum setup equipped with three magnetron sources with 50 mm diameter disk targets was used for this purpose. The Cu layer thickness on all samples was 1 μm . The thickness of the Ti and Ni layers was 100 nm. Demetallization was performed using a pulsed laser of a Minimarker 2 setup. The main characteristics of the laser: the wavelength of laser radiation is 1064 μm , the maximum laser pulse energy is 1 mJ, the software and hardware resolutions are 2.5 μm , the scanning device is a 2-axis galvanoscanner. The parameters of the laser demetallization mode were as follows: power 2.6 W, beam speed 1000 mm/s, pulse frequency 99 kHz, pulse duration 8 ns. The demetallization template, which is a flexible loop antenna with the geometry optimized for resonance in the 3.75 GHz range. Two versions of the antenna were manufactured with the conductor line width d equal to 1 mm and 3 mm. **Results:** It has been found that an additional layer of metal on the surface of the Cu thin-film coating of flexible polyimide substrates improves the quality of demetallization. Without it, areas with defects in the form of an unremoved Cu film short-circuiting individual antenna elements are observed. On samples with an additional passivation metal layer, demetallization occurs exactly according to the template without defects. It has also been found that significantly fewer drops of molten metal remain on samples with a passivation Ni layer. The results of experiments with ready-made antennas have demonstrated a significant sensitivity of the resonance frequency to bending in the range of angles from -60 to $+60^\circ$, which opens up the possibility of using such antennas as micro-displacement sensors. At the same time, the developed antenna prototypes have a reflection coefficient less than -17 dB in the bending angle range from -100 to $+100^\circ$. **Conclusion:** The work has assessed the influence of an additional layer of passivating metal on the quality of laser demetallization (ablation) of a Cu thin-film coating of flexible polyimide substrates. The experimental results obtained allow us to count on the applicability of the developed antennas as micro-displacement sensors. At the same time, the low reflection coefficient of flexible antennas in a wide range of bending angles allows them to be used as the basis of electroimpedance sensors.

Keywords: flexible antennas, laser ablation, electroimpedance sensors, copper passivation

Acknowledgments: This study was supported by the Russian Science Foundation (project No. 22-79-10270, <https://rscf.ru/project/22-79-10270/>).

For citation: Serdobintsev A. A., Kozhevnikov I. O., Ryabov E. A., Gusliakova O. I., Prikhozhenko E. S. Development of a prototype of flexible antennas with a passivation layer for electrical impedance sensors. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 414–424 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-414-424>, EDN: IKBCSO

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

Введение

Последние десятилетия развития электронной техники были посвящены значительному снижению размеров устройств. Но в настоящее время появилась новая тенденция к обеспечению еще и гибкости как отдельных элементов, так и устройств в целом. Гибкие электронные устройства зачастую отличаются малым весом и формой, портативностью, меньшей стоимостью и экологичностью [1]. Гибкие электронные системы требуют интеграции гибких антенн, работающих в определенных частотных диапазонах и способных обеспечивать работу носимых устройств, инфраструктуры интернета вещей, устройств для оказания помощи на месте, платформ персонализированной медицины, технологии 5G, беспроводных сенсорных сетей и устройств связи [2].

Рынки гибких беспроводных устройств быстро растут отчасти из-за спроса на носимые и имплантируемые устройства для систем мониторинга здоровья и повседневных беспроводных устройств (сотовых телефонов, ноутбуков и др.). Потреб-

ность в гибких антеннах возросла в последние годы, особенно для применения в области биомедицины [3, 4]. В частности, гибкие антенны являются основным компонентом при реализации *in vivo* мониторинга жизненно важных показателей работы органов, нейронных интерфейсов, непрерывного анализа походки, внутричерепных датчиков, систем доставки лекарств и множества других функций [5]. Для интеграции устройств в человеческое тело, характеризующееся наличием изгибов и активной подвижностью отдельных частей, устройство должно быть конформным, т. е. физически гибким или даже растягиваемым.

Гибкие антенны изготавливаются с использованием различных проводящих материалов и диэлектрических подложек. Подложка выбирается на основе ее диэлектрических свойств, устойчивости к механическим деформациям (изгиб, скручивание), возможности миниатюризации, стойкости к условиям внешней среды и долговечности. Материал подложки, используемый в миниатюрной гибкой антенне, должен обладать минимальными



диэлектрическими потерями, высокой диэлектрической проницаемостью, низким коэффициентом теплового расширения и высокой теплопроводностью [6]. При изготовлении гибких антенн часто используются три типа подложек: тонкое стекло, металлическая фольга и полимерные материалы [2]. Хотя тонкое стекло гнется, присущая ему хрупкость ограничивает его полезность. Металлическая фольга может выдерживать высокие температуры и обеспечивать осаждение на ней неорганических материалов, но шероховатость поверхности и высокая стоимость материалов ограничивают ее применение [7]. Лучшими кандидатами для гибких антенн являются полимерные материалы, к которым относятся: (i) термопластичные полукристаллические полимеры (полиэтилентерефталат и полиэтиленнафталат); (ii) термопластичные некристаллические полимеры (поликарбонат и полиэфирсульфон); (iii) материалы с высокой температурой стеклования (полиимид) [8].

Выбор проводящего материала (на основе электропроводности) определяет эффективность излучения. Реализация проводящих схем с хорошей электропроводностью в беспроводных устройствах имеет важное значение для обеспечения высокого усиления, эффективности и пропускной способности. Кроме того, устойчивость к деградации из-за механической деформации является еще одной желаемой характеристикой для проводящего материала. Проводящий рисунок наиболее часто выполняется из серебра или меди, в том числе и из чернил на основе наночастиц данных металлов [9] из-за их высокой электропроводности [10]. Помимо наночастиц, в гибких антеннах обычно используются электротекстильные материалы с различными покрытиями, такими как Ni/Ag-покрытия, медное покрытие нейлоновой ткани и нетканые проводящие материалы. Также активно используются проводящие полимеры, такие как полианилин [11], полипиррол [12] и поли(3,4-этилендиокситиофен) полистиролсульфонат [13]. Низкая проводимость проводящих полимеров может быть улучшена путем добавления углеродных наноматериалов – нанотрубок [14] или графена [15, 16].

Эффективность гибких антенн в значительной степени зависит от качества изготовления проводящих дорожек, их устойчивости к деформации при сохранении электропроводности. Большое значение придается диапазонам, поддерживаемым конструкцией антенны. Основными требованиями к антенне для любого применения и диапазона частот являются коэффициент отражения

($S_{11} \leq -10$ дБ), пиковое усиление (> 3 дБ), хорошие излучательные характеристики, заданная полоса рабочих частот, эффективность и поляризация (линейная для большинства применений и круговая для спутниковых применений) [17].

Эффективность гибкой антенны определяется методом изготовления, который отличается для разных подложек. Распространенными методами изготовления гибких антенн являются мокрое травление [18], струйная печать [19, 20], трафаретная печать [21] и другие специальные методы [22–24].

Ранее авторами был разработан и представлен в ряде работ уникальный метод получения проводящих дорожек на гибких подложках методом магнетронного напыления и лазерной абляции [25, 26]. Метод магнетронного напыления используется для нанесения тонкого слоя металла (меди) на гибкую (полиимидную) подложку. Затем лазерная абляция используется для формирования антенной структуры из медного слоя. Данная технология имеет значительные преимущества по стоимости, скорости и гибкости по сравнению с процессами литографии.

В настоящей работе представляются усовершенствованные технология и конструкция гибкой антенны на полиимидной подложке, предотвращающие окисление медной основы проводящей дорожки с целью увеличения длительности эксплуатации и стабильности работы. Часто гибкие антенны, как отмечалось выше, используются для биомедицинских целей и имеют непосредственный контакт с биологическими жидкостями, что приводит к быстрому окислению медных элементов сенсоров и потери их функциональности. Нами было рассмотрено влияние пассивирующего слоя из Ni или Ti на качество деметаллизации полиимидной подложки, определены зависимости изменения резонансной частоты и коэффициента отражения от углов изгиба готовой гибкой антенны.

Материалы и методы

Металлические покрытия формировались на гибкой полиимидной пленке толщиной 500 мкм методом магнетронного напыления на постоянном токе. Напыление осуществлялось в установке VSM 300 (Robvac, Россия) с полностью безмасляной откачкой. В вакуумной камере установки смонтировано три магнетронных источника, что позволяет формировать трехслойные металлические покрытия без развакуумирования камеры. Такой подход обеспечивает хорошую адгезию



покрытый к гибкой полимерной подложке и исключает формирование окисных пленок на границах между металлическими слоями.

Вакуумная камера откачивалась до давления не выше $5 \cdot 10^{-5}$ Торр. Затем производился напуск аргона чистотой 99.993% до давления $3 \cdot 10^{-3}$ Торр, при котором осуществлялось напыление. В качестве источника напыляемого материала использовались дисковые мишени диаметром 50 мм (Гирмет, Россия). Адгезионный подслои формировался распылением хрома (толщина мишени 6 мм, чистота 99.95% – здесь и далее по массе), толщина подслоя составляла 100 нм. Затем для всех образцов напылялся основной токопроводящий слой меди толщиной 1 мкм (толщина мишени 6 мм, чистота 99.995%). Финальный пассивирующий слой из титана (толщина мишени 6 мм, чистота 99.7%) или никеля (толщина мишени 3 мм, чистота 99.5%) имел толщину 100 нм и наносился лишь на часть образцов. Образцов каждого типа было изготовлено не менее трех штук. Таким образом, было создано три типа образцов: без пассивирующего слоя, с пассивирующим слоем титана и с пассивирующим слоем никеля.

Из подготовленного файла векторного рисунка с помощью лазерной установки МиниМаркер 2 (Лазерный центр, Россия) на базе волоконного лазера производилась деметаллизация топологии поверхности образцов по заданным параметрам. Основные характеристики лазерной установки: длина волны лазерного излучения 1064 мкм; максимальная энергия лазера в импульсе 1 мДж; программно-аппаратное разрешение 2.5 мкм; сканирующее устройство – двухосевой сканатор (Cambridge Technology, Великобритания). Параметры режима лазерной деметаллизации были подобраны ранее [27]: мощность 2.6 Вт, скорость движения луча 1000 мм/с, частота импульсов 99 кГц, длительность

импульса 8 нс. Мощность лазерного импульса была скорректирована в связи с меньшей толщиной покрытия.

В процессе лазерной обработки возможна деформация полиимидных пленок с напыленными металлическими слоями, что приводит к выходу поверхности образца из фокуса лазера. Для предотвращения этого явления металлизированные пленки наклеивались на предметные стекла. После деметаллизации образцы отделялись пинцетом от клейкой основы силиконовой ленты путем прогрева до $\sim 200^\circ$ паяльным феном. После формирования топологии антенны к ее выводам припаивался стандартный SMA-разъем. Так как температура стеклования полиимида составляет порядка 360° [28], обе упомянутые операции не приводили к какому-либо изменению свойств полимерной подложки.

Определение зависимости электрического сопротивления от ширины металлических полосок проводилась с помощью цифрового мультиметра Fluke 27 II (США).

Оценка влияния пассивирующих слоев металла на качество лазерной обработки производилась на автоэмиссионном сканирующем электронном микроскопе (СЭМ) MIRA 2 LMU (Tescan, Чехия) с системой энерго-дисперсионного микроанализа (ЭДС) AztecLive Advanced Ultim Max 40 (Oxford Instruments, Великобритания).

Для изучения влияния механических деформаций на параметры антенны была разработана экспериментальная методика. Измерения проводились с использованием векторного анализатора цепей LiteVNA64 (Zeenko Tech, Китай), настроенного на измерение спектров коэффициента отражения. Антенна фиксировалась в специализированной оснастке [29], позволяющей задавать угол изгиба от 0° (плоское состояние) до 100° с ша-

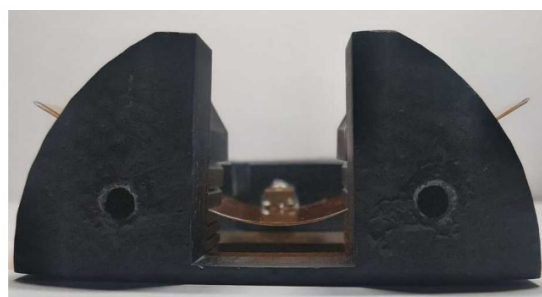
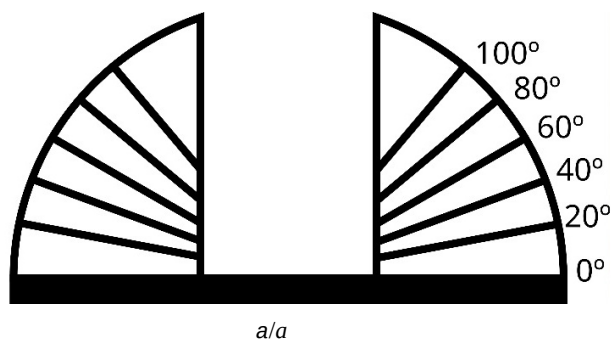


Рис. 1. Измерительная оснастка: схематическое изображение (а); вид, демонстрирующий изгиб антенны на угол 60° (б) (цвет онлайн)

Fig. 1. Measuring equipment: schematic image (a); view showing the bending of the antenna at an angle of 60 degrees (b) (color online)



гом 20° (рис. 1, а). Для измерения от 0° (плоское состояние) до -100° с шагом 20° антенна поворачивалась на 180° . Ось изгиба проходила через ось SMA разъема. Диапазоны углов изгиба были определены таким образом, что при положительных значениях углов антенна испытывала сжатие, а при отрицательных – растяжение. На рис. 1, б демонстрируется изгибание антенны на 60° .

Результаты и их обсуждение

На первом этапе шаблоном для деметаллизации выступало инвертированное изображение полосок длиной 18 мм и шириной 0.1–0.5 мм с шагом 0.1 мм. С помощью этих полосок оценивалось влияние пассивирующего слоя на электрическую проводимость многослойного покрытия на постоянном токе (рис. 2).

объяснить пассивацией слоя Cu, предотвращающей окисление меди. Слой Ni в процессе лазерной обработки, по-видимому, образует сплав с Cu, так как система Cu–Ni характеризуется непрерывным рядом твердых растворов [30]. Можно предположить, что формирование сплава приводит к росту электрического сопротивления.

Для выявления влияния пассивирующего слоя на долговременную стабильность характеристик напыленных слоев электрическое сопротивление полосок было повторно измерено спустя 5 месяцев хранения образцов в атмосферных условиях. Результаты измерений показали, что за это время сопротивление полосок без пассивирующего слоя увеличилось в среднем на 15%, что говорит об окислении незащищенной меди. Сопротивление полосок с пассивирующим слоем титана увеличилось в среднем на 12%, из чего можно сделать

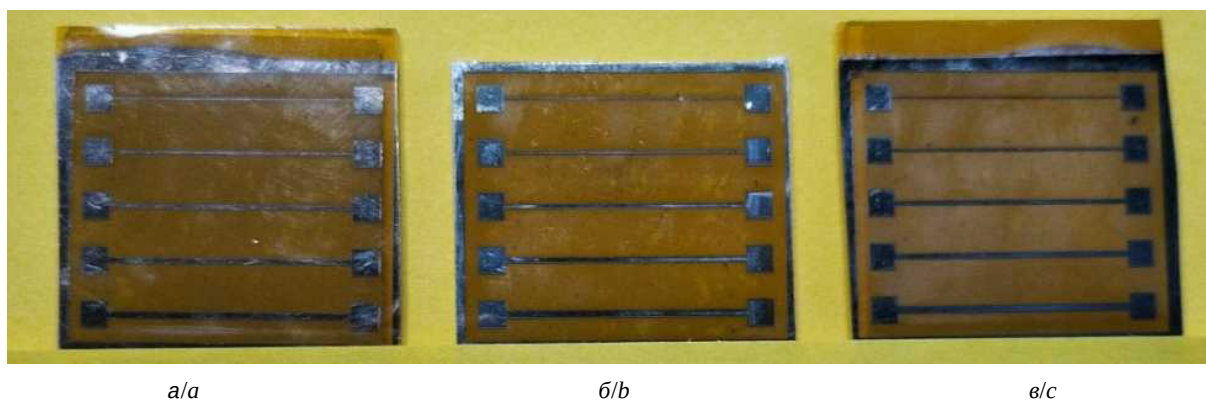


Рис. 2. Изготовленные полоски металла: без пассивирующего слоя (а); со слоем Ni (б); со слоем Ti (в) (цвет онлайн)

Fig. 2. Measuring equipment: without passivating layer (a); with the Ni layer (b); with the Ti layer (c) (color online)

Электрическое сопротивление полосок с покрытием Ti – наименьшее (рис. 3), что можно

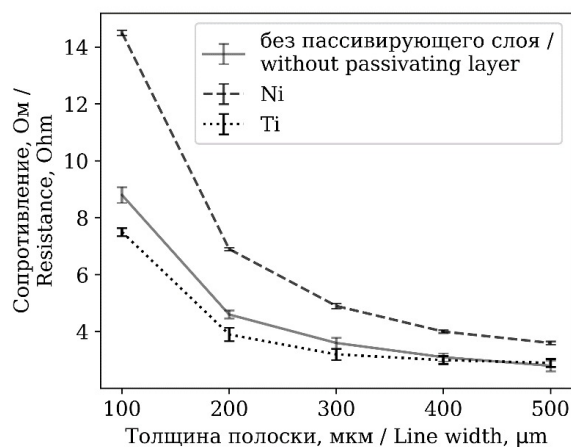


Рис. 3. Зависимость электрического сопротивления от толщины полосок металла

Fig. 3. Dependence of the electrical resistance on the thickness of metal strips

вывод о незначительном положительном влиянии слоя титана на стабильность проводимости наносимых покрытий. Однако сопротивление полосок с пассивирующим слоем никеля изменилось всего на 0.4%. Следовательно, никелевый слой обеспечивает наилучшую стабильность проводимости металлических слоев на гибкой подложке в течение длительного времени.

Шаблон для деметаллизации, представляющий собой гибкую петлевою рамочную антенну, представлен на рис. 4, а. Геометрия антенны оптимизирована для резонанса в диапазоне 3.75 ГГц, при этом длина стороны квадрата a составляет 20 мм, что соответствует четверти длины волны на рабочей частоте. Было изготовлено два варианта антенны с шириной линии проводника d , равной 1 и 3 мм. На рис. 4, б представлена готовая гибкая антенна с шириной линии 3 мм.

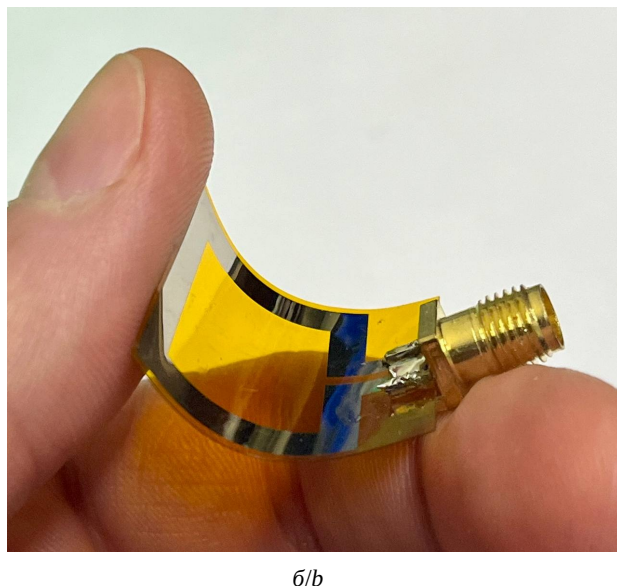
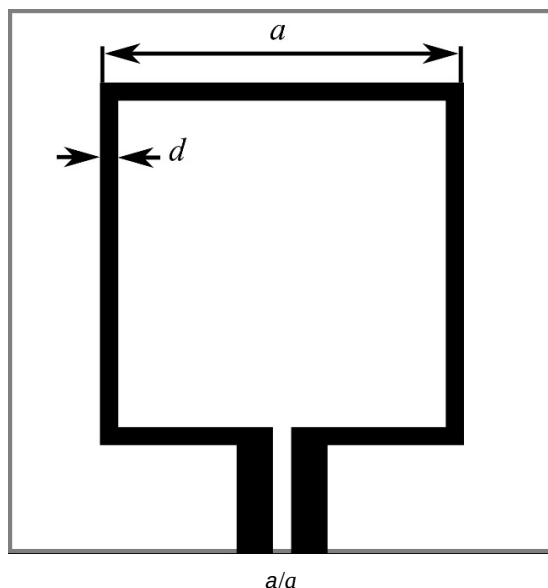


Рис. 4. Шаблон для деметаллизации (изображение гибкой петлевой рамочной антенны) (а). Готовая гибкая антенна с припаянным SMA разъемом (б) (цвет онлайн)

Fig. 4. A template for demetallization (image of a flexible loop antenna) (a). A flexible antenna with a soldered SMA connector (b) (color online)

На рис. 5 представлены изображения угла деметаллизированной полосы для различных образцов.

На образце без пассивирующего слоя (рис. 5, а), и в особенности на образце со слоем титана (рис. 5, в) видны яркие частицы, которые, по-видимому, являются осевшими каплями расплавленного металла. На образце без пассивирующего слоя их количество умеренно, они имеют размер 5–10 мкм. Для образца со слоем титана характерно наличие большего количества мелких частиц, имеющих размеры порядка 1–5 мкм. На образце со слоем никеля частиц зна-

чительно меньше, причем сами частицы мельче, чем на образце со слоем титана.

Существенным недостатком образца без пассивирующего слоя является наличие не полностью деметаллизированных областей (рис. 6). Подобных участков на образцах с пассивирующим слоем не обнаружено. Такой результат можно объяснить высоким коэффициентом отражения меди (99%) на длине волны 1064 нм [31]. При этом коэффициенты отражения для использованных металлов для пассивирующего слоя (никеля и титана) на этой длине волны заметно ниже: для никеля – 86% [32], для титана –

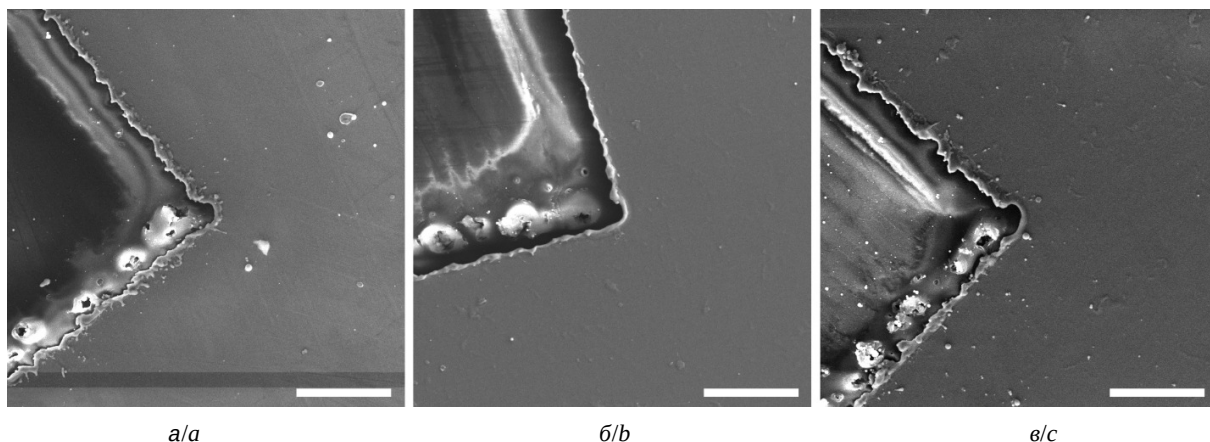


Рис. 5. СЭМ-изображения: без пассивирующего слоя (а); со слоем Ni (б); со слоем Ti(в). Масштабный отрезок – 50 мкм

Fig. 5. SEM images: without passivating layer (a); with the Ni layer (b); with the Ti layer (c). Scalebar is 50 μm



49% [33]. В результате в слое пассивирующего металла поглощается больше энергии лазерного излучения, чем в слое чистой меди, что приводит к более качественной деметаллизации.

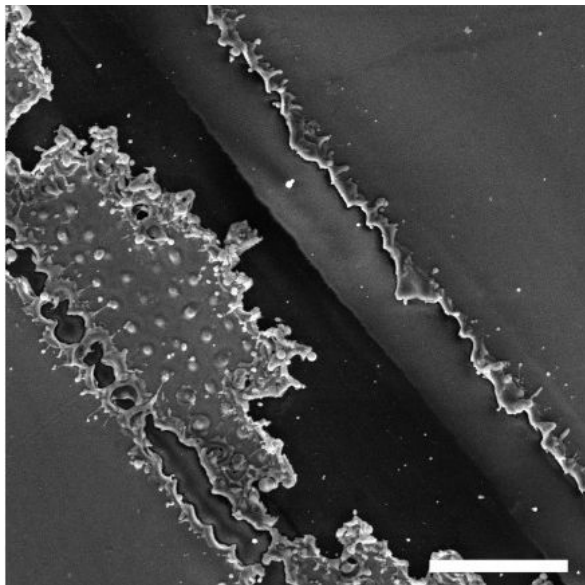


Рис. 6. СЭМ-изображение участка образца без пассивирующего слоя с неполной деметаллизацией. Масштабный отрезок – 50 мкм

Fig. 6. SEM image of a sample section without passivating layer with incomplete demetallization. Scalebar is 50 μ m

Качество деметаллизации количественно оценивалось с помощью ЭДС анализа. Для этого определялся состав деметаллизированных участков. Для каждого образца определялось остаточное содержание меди на деметаллизированном участке. Результаты представлены в таблице.

**Остаточное содержание атомов меди
после деметаллизации, %**

Residual copper atoms content after demetallization, %

Без пассивирующего слоя / Without passivating layer	Слой Ni / Ni layer	Слой Ti / Ti layer
1.14	0.08	1.31

Повышенное содержание меди для образца без пассивирующего слоя и со слоем титана можно объяснить наличием в деметаллизированной области конденсированных частиц аблированного металлического покрытия, которые были визуальны обнаружены на СЭМ изображениях. Таким образом, пассивирующий слой никеля способствует наиболее полному удалению меди из деметаллизированных областей. Основываясь на этом результате, а также на результатах экспериментов по определению долговременной стабильности проводимости металлических покрытий, формирование гибких антенн и их измерения в СВЧ диапазоне осуществлялись только на образцах с никелевым пассивирующим слоем.

На рис. 7, 8 представлены спектры коэффициента отражения антенн с $d = 1$ мм и $d = 3$ мм, соответственно, при различных углах изгиба. Экспериментальные данные демонстрируют выраженную зависимость резонансных характеристик антенны от механического изгиба.

На рис. 9 представлены графики резонансной частоты и коэффициента отражения в зависимости от угла изгиба для обеих антенн.

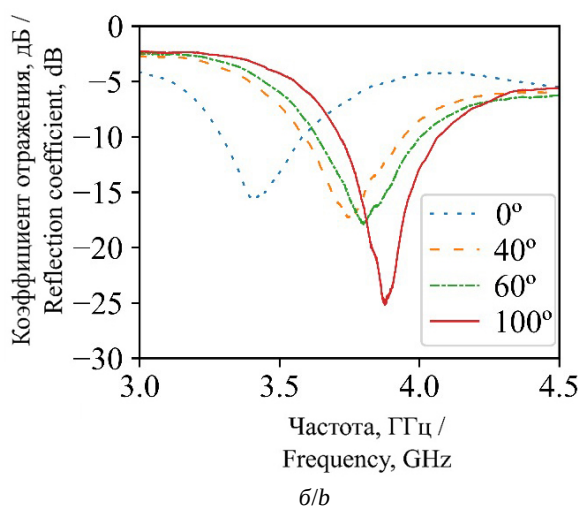
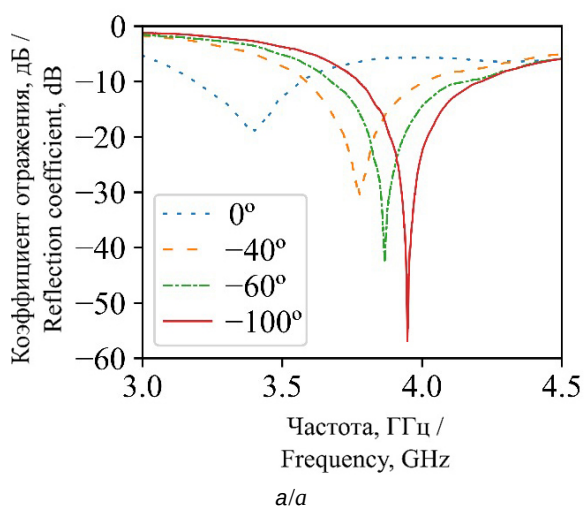


Рис. 7. Спектр коэффициента отражения антенны при $d = 1$ мм при углах изгиба: от 0° до -100° (а); от 0° до 100° (б) (цвет онлайн)

Fig. 7. Antenna reflection coefficient spectrum at $d = 1$ mm at bending angles: from 0° to -100° (a); from 0° to 100° (color online)

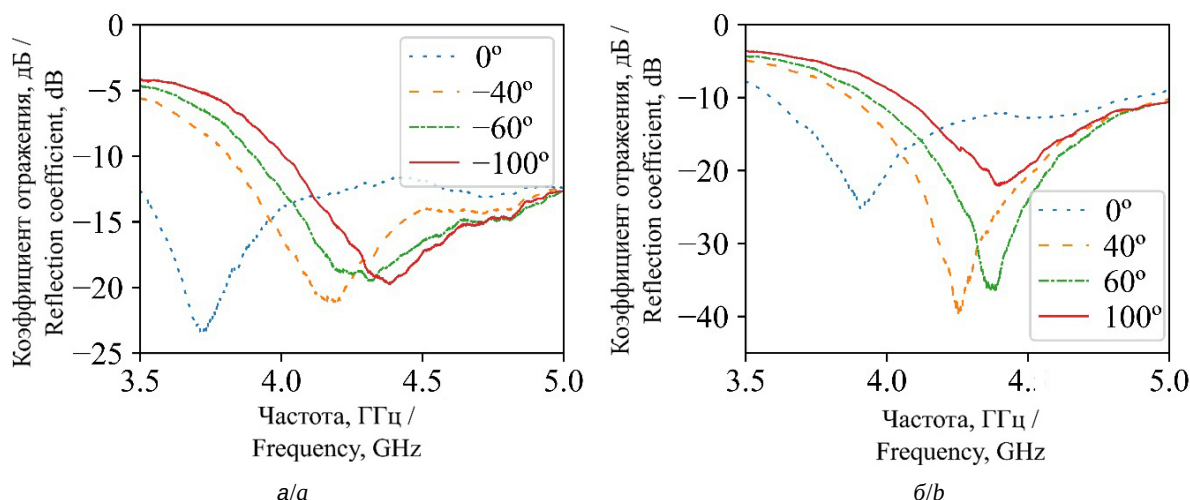


Рис. 8. Спектр коэффициента отражения антенны при $d = 3$ мм при углах изгиба: от 0° до -100° (а); от 0° до 100° (б) (цвет онлайн)

Fig. 8. Antenna reflection coefficient spectrum at $d = 3$ mm at bending angles: from 0° to -100° (a); from 0° to 100° (b) (color online)

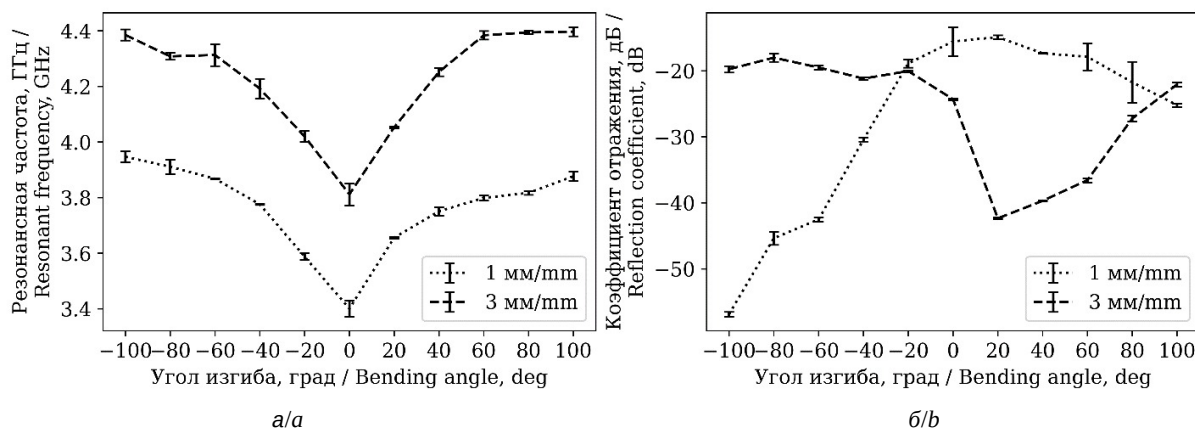


Рис. 9. Зависимости резонансной частоты (а) и коэффициента отражения (б) от угла изгиба антенн с различной шириной линии d

Fig. 9. Dependences of the resonant frequency (a) and the reflection coefficient (b) on the bending angle of antennas with different line widths d

Для антенны с шириной линии $d = 1$ мм резонансная частота варьируется в диапазоне 3.4–3.95 ГГц, достигая минимального значения 3.4 ГГц при 0° . При изгибе в отрицательную и положительную стороны наблюдается симметричное смещение частоты в сторону увеличения. В отличие от этого, антенна с шириной линии $d = 3$ мм демонстрирует несколько асимметричное поведение: при изгибе в положительную сторону частота резонанса быстро возрастает до 4.4 ГГц и остается практически неизменной, тогда как в отрицательную сторону рост более плавный (рис. 9, а), а явного насыщения не наблюдается. Стоит отметить, что частота резонанса на антенне с $d = 3$ мм также мини-

мальна при отсутствии изгиба, а ее значение составляет 3.8 ГГц, что близко к расчетной частоте 3.75 ГГц (отклонение 1.33%). В то же время антенна с $d = 1$ мм при нулевом угле изгиба демонстрирует заметное отклонение от расчетной частоты (14.67%).

Физической причиной такого поведения является изменение эквивалентной индуктивности L и емкости C антенны. Узкая линия ($d = 1$ мм) обладает большей индуктивностью из-за меньшей эффективной площади поперечного сечения проводника, что смещает резонанс в низкочастотную область. Вероятно, этот эффект усиливается в результате малой толщины проводящего слоя. Увеличение ширины d до 3 мм снижает L



и повышает резонансную частоту, приближая результаты эксперимента к расчетным.

Коэффициент отражения для антенны с линией $d = 1$ мм достигает оптимального значения -56.85 дБ при изгибе на угол -100° градусов что свидетельствует о почти идеальном согласовании с фидером. Однако в плоском состоянии (угол изгиба 0°) наблюдается значительное ухудшение коэффициента отражения -17.22 дБ, связанное с рассогласованием импеданса в результате малой толщины линии, что согласуется с рассуждениями выше (рис. 9, б). Для антенны с линией $d = 3$ мм наилучшее согласование (коэффициент отражения -42.34 дБ) достигается при изгибе на угол 20° , тогда как при угле изгиба -100° параметр ухудшается до -19.76 дБ.

Наблюдаемые изменения коэффициента отражения в гибкой петлевой рамочной антенне объясняются компенсацией исходной реактивной составляющей импеданса антенны противоположными по характеру паразитными реактивными элементами (L или C), возникающими при изгибе, и изменением площади антенны, приводящим к сдвигу резонансной частоты. Для узкой линии ($d = 1$ мм) сильный изгиб (-100°) резко уменьшает площадь, снижая индуктивность и увеличивая емкость, что смещает резонансную частоту до рабочего значения, обеспечивая улучшение согласования. Для широкой линии ($d = 3$ мм) малый изгиб ($+20^\circ$) вносит небольшую емкость, компенсирующую исходную индуктивную реактивность, достигая оптимального согласования. Дальнейшее увеличение изгиба уменьшает площадь, снижая индуктивность и увеличивая емкость, что приводит к плавному ухудшению согласования с ростом угла изгиба.

Заключение

Установлено, что дополнительный пассивирующий слой на поверхности медного тонкопленочного покрытия гибких подложек из полиимида улучшает качество деметаллизации. Без него наблюдаются участки с дефектами в виде неудаленной медной пленки, закорачивающей отдельные элементы антенны. На образцах с дополнительным пассивирующим слоем деметаллизация проходит точно по шаблону без дефектов. При этом никель обеспечивает более полное удаление меди, чем титан, что послужило основной причиной выбора никеля в качестве металла пассивирующего слоя при изготовлении гибких антенн.

Результаты экспериментов с готовыми антеннами показали высокую чувствительность частоты резонанса к изгибу в области малых углов (от -60° до $+60^\circ$). Это позволяет рассчитывать на применимость таких антенн в качестве датчиков микроперемещений. В то же время, изгиб необходимо учитывать при использовании петлевых антенн в качестве измерителей диэлектрической проницаемости биологических объектов, так как он существенно влияет на результаты измерений. При углах изгиба более 80° в обоих направлениях частота резонанса антенн слабо зависит от изгиба. При этом разработанные прототипы антенн имеют коэффициент отражения не выше -17 дБ в диапазоне углов изгиба от -100° до $+100^\circ$, что позволяет использовать их в качестве основы электроимпедансных сенсоров.

Список литературы / References

1. Zhan Y., Mei Y., Zheng L. Materials capability and device performance in flexible electronics for the Internet of Things. *J. Mater. Chem. C*, 2014, vol. 2, iss. 7, pp. 1220–1232. <https://doi.org/10.1039/C3TC31765J>
2. Kirtania S. G., Elger A. W., Hasan M. R., Wisniewska A., Sekhar K., Karacolak T., Sekhar P. K. Flexible antennas: A review. *Micromachines*, 2020, vol. 11, iss. 9, art. 847. <https://doi.org/10.3390/mi11090847>
3. Sethi P., Sarangi S. R. Internet of things: Architectures, protocols and applications. *J. Electr. Comput. Eng.*, 2017, vol. 2017, art. 9324035. <https://doi.org/10.1155/2017/9324035>
4. Gao W., Zhu Y., Wang Y., Yuan G., Liu J. M. A review of flexible perovskite oxide ferroelectric films and their application. *J. Materiomics*, 2020, vol. 6, iss. 1, pp. 1–16. <https://doi.org/10.1016/j.jmat.2019.11.001>
5. Huang S., Liu Y., Zhao Y., Ren Z., Guo C. F. Flexible electronics: Stretchable electrodes and their future. *Adv. Funct. Mater.*, 2019, vol. 29, iss. 6, art. 1805924. <https://doi.org/10.1002/adfm.201805924>
6. Park J., Park S., Yang W., Kam D. G. Folded aperture coupled patch antenna fabricated on FPC with vertically polarised end-fire radiation for fifth-generation millimetre-wave massive MIMO systems. *IET Microwaves, Antennas Propag.*, 2019, vol. 13, iss. 10, pp. 1660–1663. <https://doi.org/10.1049/iet-map.2018.5952>
7. Thielens A., Deckman I., Aminzadeh R., Arias A. C., Rabaey J. M. Fabrication and characterization of flexible spray-coated antennas. *IEEE Access.*, 2018, vol. 6, pp. 62050–62061. <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2018.2876286>
8. Khaleel H. R., Al-Rizzo H. M., Rucker D. G., Mohan S. A Compact Polyimide-Based UWB Antenna for Flexible Electronics. *IEEE Antennas Wirel. Propag. Lett.*, 2012, vol. 11, pp. 564–567. <https://doi.org/10.1109/LAWP.2012.2199956>
9. Mo L., Guo Z., Wang Z., Yang L., Fang Y., Xin Z., Li X., Chen Y., Cao M., Zhang Q., Li L. Nano-silver ink of



- high conductivity and low sintering temperature for paper electronics. *Nanoscale Res. Lett.*, 2019, vol. 14, art. 197. <https://doi.org/10.1186/s11671-019-3011-1>
10. Sharma P. K., Chung J.-Y. Poly-flex-antennas: Application of polymer substrates in flexible antennas. *Express Polym. Lett.*, 2024, vol. 18, iss. 4, pp. 371–390. <https://doi.org/10.3144/expresspolymlett.2024.28>
11. Lee J. S., Kim M., Oh J., Kim J., Cho S., Jun J., Jang J. Platinum-decorated carbon nanoparticle/polyaniline hybrid paste for flexible wideband dipole tag-antenna application. *J. Mater. Chem. A*, 2015, vol. 3, iss. 13, pp. 7029–7035. <https://doi.org/10.1039/C4TA07064J>
12. Ali Khan M. U., Raad R., Tubbal F., Theoharis P. I., Liu S., Foroughi J. Bending analysis of polymer-based flexible antennas for wearable, general IoT applications: A Review. *Polymers*, 2021, vol. 13, iss. 3, art. 357. <https://doi.org/10.3390/polym13030357>
13. Guerchouche K., Herth E., Calvet L. E., Roland N., Loyez C. Conductive polymer based antenna for wireless green sensors applications. *Microelectron. Eng.*, 2017, vol. 182, pp. 46–52. <https://doi.org/10.1016/j.mee.2017.08.007>
14. Zhou Y., Bayram Y., Du F., Dai L., Volakis J. L. Polymer-Carbon Nanotube Sheets for Conformal Load Bearing Antennas. *IEEE Trans. Antennas Propag.*, 2010, vol. 58, iss. 7, pp. 2169–2175. <https://doi.org/10.1109/TAP.2010.2048852>
15. Zhang J., Song R., Zhao X., Fang R., Zhang B., Qian W., Zhang J., Liu C., He D. Flexible graphene-assembled film-based antenna for wireless wearable sensor with miniaturized size and high sensitivity. *ACS Omega*, 2020, vol. 5, iss. 22, pp. 12937–12943. <https://doi.org/10.1021/acsomega.0c00263>
16. RF Patent No. RU 2778215 C1. IPC H01L 21/56, H01L 51/50, B82Y 30/00. Technologies for producing flexible and transparent electronic components based on graphene-like structures in polymer for electronics and microelectronics. Declared November 8, 2021, published August 15, 2022. Shiversky A. V., Abaimov S. G., Akhatov I. Sh. Patent Holder: Skolkovo Institute of Science and Technology. Available at: <https://patents.google.com/patent/RU2778215C1/ru> (accessed September 21, 2025) (in Russian).
17. Gharode D., Nella A., Rajagopal M. State-of-art design aspects of wearable, mobile, and flexible antennas for modern communication wireless systems. *Int. J. Commun. Syst.*, 2021, vol. 34, iss. 15, art. e4934. <https://doi.org/10.1002/dac.4934>
18. Locher I., Klemm M., Kirstein T., Troster G. Design and characterization of purely textile patch antennas. *IEEE Trans. Adv. Packag.*, 2006, vol. 29, iss. 4, pp. 777–788. <https://doi.org/10.1109/TADVP.2006.884780>
19. AbuTarboush H., Farooqui M., Shamim A. Inkjet-printed wideband antenna on resin-coated paper substrate for curved wireless devices. *IEEE Antennas Wirel. Propag. Lett.*, 2015, vol. 15, pp. 20–23. <https://doi.org/10.1109/LAWP.2015.2425797>
20. Arsenov P. V., Sobolev A. S., Efimov A. A., Ivanov V. V. Double slot aerosol jet printed antenna for X-band applications. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2021, vol. 2086, art. 012047. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2086/1/012047>
21. Roshni S. B., Jayakrishnan M. P., Mohanan P., Surendran K. P. Design and fabrication of an E-shaped wearable textile antenna on PVB-coated hydrophobic polyester fabric. *Smart Mater. Struct.*, 2017, vol. 26, iss. 10, art. 105011. <https://doi.org/10.1088/1361-665X/aa7c40>
22. El Gharbi M., Fernández-García R., Ahyoud S., Gil I. A Review of flexible wearable antenna sensors: Design, fabrication methods and applications. *Materials*, 2020, vol. 13, iss. 17, art. 3781. <https://doi.org/10.3390/ma13173781>
23. Agasieva S. V., Sedankin M. K., Leushin V. Y., Gudkov A. G., Zhuravleva K. V., Porokhov I. O., Gudkov G. A., Vesnin S. G. Conformal medical antenna based on a flexible substrate. *Biomedical Engineering*, 2022, vol. 6, iss. 6 (336), pp. 1–4 (in Russian). EDN: CWNGEN
24. Artemova T. K., Artemov K. S. An analysis of deformed flexible wearable patch antenna parameters. Rodionov A., ed. *2017 International Multi-Conference on Engineering, Computer and Information Sciences (SIBIRCON)*, Novosibirsk, September 18–22, 2017. IEEE, 2017, pp. 382–385. <https://doi.org/10.1109/SIBIRCON.2017.8109911>
25. Starodubov A. V., Galushka V. V., Serdobintsev A. A., Pavlov A. M., Korshunova G. A., Ryabukho P. V., Gorodkov S. Y. A novel approach for fabrication of flexible antennas for biomedical applications. *2018 18th Mediterranean Microwave Symposium (MMS), Istanbul, Turkey, 1 October – 02 November 2018*. IEEE, 2018, pp. 303–306. <https://doi.org/10.1109/MMS.2018.8612092>
26. Starodubov A. V., Serdobintsev A. A., Galushka V. V., Ryabukho P. V., Kozhevnikov I. O., Pavlov A. M. Study of flexible monopole antenna with coplanar feeding structure fabricated by magnetron sputtering and laser ablation technologies. *Antennas Design and Measurement International Conference (ADMInC)*, 2019, St. Petersburg Russia, 16–18 October 2019. IEEE, 2019, pp. 138–140. <https://doi.org/10.1109/ADMInC47948.2019.8969323>
27. Ozhogin I. S., Serdobintsev A. A., Kozhevnikov I. O., Chistyakov I. A., Galushka V. V., Pavlov A. M., Starodubov A. V. On the optimal operational mode of a CNC-controlled laser machine for ablation of thin metal layers on flexible dielectric substrates. *Proc. SPIE*, 2020, vol. 11846, art. 1184607. <https://doi.org/10.1117/12.2591939>
28. Liu L., Li L., Zhang S., Xu W., Wang Q. Polyimide-based dielectric materials for high-temperature capacitive energy storage. *Electron. Mater.*, 2024, vol. 5, pp. 303–320. <https://doi.org/10.3390/electronmat5040019>
29. Serdobintsev A. A., Venig S. B., Kozlowsky A. V., Volkovoyanova L. D. Influence of bending on the structural properties of crystallized silicon films on flexible substrates. *Izv. Saratov Univ. Physics*, 2024, vol. 24, iss. 3, pp. 290–296. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2024-24-3-290-296> (in Russian).



30. Chikova O. A., Tkachuk G. A., V'yukhin V. V. Viscosity of Cu–Ni melts. *Russ. J. Phys. Chem.*, 2019, vol. 93, pp. 198–203. <https://doi.org/10.1134/S0036024419020067>
31. McPeak K. M., Jayanti S. V., Kress S. J. P., Meyer S., Iotti S., Rossinelli A., Norris D. J. Plasmonic films can easily be better: Rules and recipes. *ACS Photonics*, 2015, vol. 2, iss. 3, pp. 326–333. <https://doi.org/10.1021/ph5004237>
32. Werner W. S. M., Glantschnig K., Ambrosch-Draxl C. Optical constants and inelastic electron-scattering data for 17 elemental metals. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 2009, vol. 38, iss. 4, pp. 1013–1092. <https://doi.org/10.1063/1.3243762>
33. Palm K. J., Murray J. B., Narayan T. C., Munday J. N. Dynamic optical properties of metal hydrides. *ACS Photonics*, 2018, vol. 5, iss. 11, pp. 4677–4686. <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.8b01243>

Поступила в редакцию 06.05.2025; одобрена после рецензирования 27.06.2025;
принята к публикации 10.07.2025; опубликована 28.11.2025

The article was submitted 06.05.2025; approved after reviewing 27.06.2025;
accepted for publication 10.07.2025; published 28.11.2025

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ. ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 425–437
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2025, vol. 25, iss. 4. P. 425–437
<https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-425-437>, EDN: LXEQFE

Научная статья
УДК 544.18:577.32

Водородная связь в моногидратах триглицеридов насыщенных жирных кислот: молекулярная динамика и квантовомеханическое моделирование

К. В. Березин^{1✉}, Е. Ю. Степанович², К. Н. Дворецкий³, Е. М. Антонова⁴, А. М. Лихтер²,
И. Ю. Янина^{1,5}

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

²Астраханский государственный университет имени В. Н. Татищева, Россия, 414056, г. Астрахань, ул. Татищева, д. 20а

³Саратовский государственный медицинский университет имени В. И. Разумовского, Россия, 410012, г. Саратов, ул. Большая Казачья, д. 112

⁴Астраханский государственный медицинский университет, Россия, 414000, г. Астрахань, ул. Бакинская, д. 121

⁵Национальный исследовательский Томский государственный университет, Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина, д. 36

Березин Кирилл Валентинович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры оптики и биофотоники, berezinkv@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0940-0388>, AuthorID: 142789

Степанович Екатерина Юрьевна, кандидат физико-математических наук, заведующий кафедрой технологии материалов и промышленной инженерии, teshn712@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6656-8278>, AuthorID: 588683

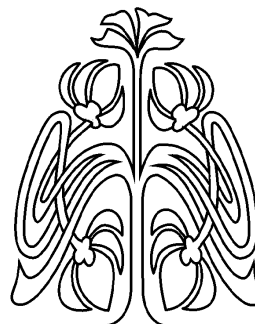
Дворецкий Константин Николаевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры биофизики и цифровых технологий, dcn@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8551-4902>, AuthorID: 308904

Антонова Екатерина Михайловна, ассистент кафедры физики, прикладной информатики и цифровой медицины, kaf_fpi@astgmu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6084-1632>, AuthorID: 1161849

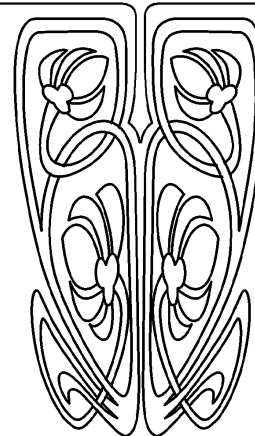
Лихтер Анатолий Михайлович, доктор технических наук, профессор кафедры физики, likhter@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9193-7998>, AuthorID: 120964

Янина Ирина Юрьевна, кандидат физико-математических наук, ¹доцент кафедры оптики и биофотоники, ⁵старший научный сотрудник, irina-yanina@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6814-556X>, AuthorID: 182063

Аннотация. В данной работе проведено комплексное исследование водородных связей в двух типах моногидратов триглицеридов насыщенных жирных кислот с использованием методов классической молекулярной динамики и теории функционала плотности. Для анализа были рассмотрены триглицериды с длиной цепей от триацетина до тристеарина с количеством метиленовых групп от 0 до 16 в каждой цепи. Установлено, что карбонильная группа сложного эфира центральной углеводородной цепи являются основным центром образования водородных связей. Моногидраты с участием центральной цепи обладают большей стабильностью, чем с участием боковых цепей. Энергия ассоциации для моногидратов первого типа достигает насыщения при увеличении длины цепи, начиная с триаприлина. Обнаружена линейная зависимость термодинамического параметра $T\Delta S$ и константы равновесия K_d от длины цепи для моногидратов первого типа, что связано с потерей конформационной энтропии при гидратации.



**НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ**





Ключевые слова: триглицериды, водородные связи, молекулярная динамика, теория функционала плотности, гидратация, термодинамика

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-44-00082, <https://rscf.ru/project/24-44-00082/>).

Для цитирования: Березин К. В., Степанович Е. Ю., Дворецкий К. Н., Антонова Е. М., Лихтер А. М., Янина И. Ю. Водородная связь в моногидратах триглицеридов насыщенных жирных кислот: молекулярная динамика и квантовомеханическое моделирование // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 425–437. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-425-437>, EDN: LXEQFE

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

Article

Hydrogen bonding in saturated acids triglyceride monohydrates: MD and DFT modeling

K. V. Berezin¹✉, E. Yu. Stepanovich², K. N. Dvoretzky³, E. M. Antonova⁴, A. M. Likhter², I. Yu. Yanina^{1,5}

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

²Astrakhan State University, 20a Tatischeva St., Astrakhan 414056, Russia

³V. I Razumovsky Saratov State Medical University, 112 B. Kazachya St., Saratov 410012, Russia

⁴Astrakhan State Medical University, 121 Bakinskaya St., Astrakhan 414000, Russia

⁵National Research Tomsk State University, 36 Lenina Av., Tomsk 634050, Russia

Kirill V. Berezin, berezinkv@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-0940-0388>, AuthorID: 142789

Ekaterina Yu. Stepanovich, teshn712@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6656-8278>, AuthorID: 588683

Konstantin N. Dvoretzky, dcn@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-8551-4902>, AuthorID: 308904

Ekaterina M. Antonova, kaf_fpi@astgmu.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3379-5092>, AuthorID: 1161849

Anatoly M. Likhter, likhter@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0001-9193-7998>, AuthorID: 120964

Irina Yu. Yanina, irina-yanina@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6814-556X>, AuthorID: 182063

Abstract. Background and Objectives: Triglycerides, as the primary components of fats and oils, play a crucial role in various scientific and industrial fields, including food production, energy, and pharmaceuticals. Their interaction with water molecules is particularly significant, yet many aspects of these interactions remain poorly understood. This study aims to investigate hydrogen bonding in monohydrates of saturated fatty acid triglycerides using molecular dynamics (MD) and density functional theory (DFT) simulations. The objectives include determining the thermodynamic parameters of association, analyzing the influence of hydrocarbon chain length on hydration, and identifying the most stable hydration configurations. **Materials and Methods:** The study employed classical molecular dynamics (GROMACS) with the AMBER-03 force field and DFT calculations (B3LYP/6-31+G(d) and wB97XD/6-311+G(d,p)) to model hydrogen bonds in monohydrates of triglycerides ranging from triacetin to tristearin (chain lengths of 0 to 16 methylene groups). The MD simulations involved a 4×4×4 nm periodic boundary cell with a triglyceride molecule surrounded by water, run for 500 ps at 300 K and 1 bar. Hydrogen bonds were identified using geometric criteria (distance ≤ 3.5 Å, angle ≤ 30°). DFT calculations optimized molecular structures and calculated thermodynamic parameters, including association energies, enthalpies, and equilibrium constants. **Results:** The results have revealed that carbonyl groups of the central ester chain are the primary sites for hydrogen bond formation. Monohydrates involving the central chain (Type 1) have exhibited a greater stability than those involving side chains (Type 2). The association energy for Type 1 monohydrates has saturated starting from tricaprylin (chain length of 6). A linear relationship has been observed between the thermodynamic parameter ΔS and the equilibrium constant K_a for Type 1 monohydrates, attributed to the loss of conformational entropy upon hydration. Non-classical hydrogen bonds (C-H...O) have also contributed to the stability of monohydrates, influencing their spatial structure. The study has found that hydration of longer chains requires higher energy to overcome entropy losses. **Conclusion:** The study has demonstrated that the central carbonyl group of triglycerides is the primary hydration site, with Type 1 monohydrates being more stable than Type 2. The association energy and enthalpy reach saturation for chains longer than tricaprylin, while linear dependencies of ΔS and K_a on chain length highlight the role of conformational entropy in hydration. These findings enhance the understanding of triglyceride-water interactions, providing insights relevant to food science, pharmaceuticals, and the development of lipid-based delivery systems. The combined use of MD and DFT has proved effective for analyzing these complex molecular interactions.

Keywords: triglycerides, hydrogen bonds, molecular dynamics, density functional theory, hydration, thermodynamics

Acknowledgements: This work was supported by the Russian Science Foundation (project No. 24-44-00082, <https://rscf.ru/project/24-44-00082/>).

For citation: Berezin K. V., Stepanovich E. Yu., Dvoretzky K. N., Antonova E. M., Likhter A. M., Yanina I. Yu. Hydrogen bonding in saturated acids triglyceride monohydrates: MD and DFT modeling. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 425–437 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-425-437>, EDN: LXEQFE

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



Введение

Триглицериды, являющиеся основными компонентами жиров и масел, представляют собой сложные эфиры, состоящие из глицерина и трёх цепей жирных кислот. Их взаимодействие с молекулами воды играет ключевую роль в различных процессах, изучаемых в научных областях, и реализующихся в производстве, включая пищевую промышленность, энергетику, и фармацевтику [1–3].

Природная гидрофобность триглицеридов приводит к их низкой растворимости в воде. Однако на границах раздела фаз, например, в эмульсиях, молекулы триглицеридов могут ориентироваться так, чтобы минимизировать межфазную энергию [4–6]. Исследования с использованием молекулярного моделирования показали, что на границе с водой триглицериды располагаются таким образом, что их глицериновый «скелет» ориентирован в сторону водной фазы, что способствует взаимодействию с молекулами воды. Такая ориентация позволяет воде проникать в слой триглицеридов, взаимодействуя с атомами кислорода в сложноэфирных группах, создавая пути для диффузии воды [3].

Триглицериды играют ключевую роль в стабилизации водно-органических взаимодействий. Исследования показывают, что триглицериды могут временно покрывать и стабилизировать крупные водно-органические взаимодействия, образующиеся в процессе эмульгирования. Эта стабилизация критически важна для формирования и поддержания эмульсий в различных областях применения [7]. Кроме того, наличие воды в матрице триглицеридов может влиять на растворимость и распределение малых молекул. Проводимые исследования направлены на выявление влияния изменения концентрации триглицеридных эфиров и поглощения воды на растворимость и распределение малых молекул в липидных носителях. Это даёт важные сведения для разработки систем доставки лекарств на основе липидов [8].

При изучении методами полноатомной молекулярной динамики проницаемости аромата в сложных молочных продуктах, таких как сливочное масло, выявлена сложная организация структура границы раздела жира с водой [9].

Экспериментальные исследования с помощью спектроскопии с временным разрешением (2D-IR) демонстрируют, что вода может стабилизироваться внутри триглицеридного масла в виде отдельных молекул или небольших кластеров,

образуя сильные одинарные водородные связи (ВС) с одной карбонильной группой триглицерида и более слабые двойные водородные связи, предположительно формируя «мостики» между карбонильными группами соседних молекул. Отмечается, что до конца не ясна молекулярная картина того, как молекулы воды организуются в масляной фазе [10]. Несмотря на значительный прогресс в понимании этих взаимодействий, многие аспекты остаются недостаточно изученными. В частности, требуют дальнейшего изучения механизмы формирования гидратных оболочек вокруг триглицеридов, влияние степени ненасыщенности жирных кислот и длины углеводородной цепи на гидратацию. Современные методы молекулярного моделирования, такие как молекулярная динамика и квантовая химия, позволяют изучать эти процессы на молекулярном уровне.

Целями данной работы ставились выявление структуры молекулярных моделей наиболее вероятных моногидратов триглицеридов насыщенных жирных кислот с различной длиной углеводородной цепи, определение термодинамических параметров ассоциации, установление их зависимости от расположения и длины углеводородной цепи. Теоретическим инструментом исследования выбрана совокупность метода классической молекулярной динамики и теории функционала плотности.

Выбор исходной пространственной структуры триглицеридов

Известно, что триглицериды жирных кислот обладают подвижной молекулярной структурой, что приводит к образованию множества конформеров, энергетические различия между которыми составляют величину порядка RT (R – универсальная газовая постоянная, T – абсолютная температура). Так, например, самый маленький триглицерид уксусной кислоты – триацетин – имеет 109 конформеров, из которых 30 имеют встречаемость более одного процента [11]. Таким образом, жир представляет собой равновесную конфигурацию большого числа близких по энергии конформеров триглицеридов. Поиск нижней по энергии конфигурации триглицеридов представляет собой отдельную задачу. В связи с этим в работе использовались молекулярные модели триглицеридов, находящихся в одном из возможных локальных минимумов, которые ранее использовались для описания спектральных свойств растительных масел [12–14].



Такая модельная конфигурация представляет собой «трезубец», когда все углеводородные цепи находятся в одной полуплоскости, а две карбонильные группы сложного эфира – в другой. Надо заметить, что сходная конфигурация может, в частности, реализовываться вблизи границы раздела жир – вода, когда карбонильные группы разворачиваются в сторону, чтобы минимизировать энергию взаимодействия. Исходная молекулярная модель триглицерида каприновой кислоты показана на рис. 1.

Для анализа были построены молекулярные модели восьми триглицеридов жирных кислот от триацетина до триглицерида стеариновой кислоты (тристеарина).

Моделирование методами классической молекулярной динамики

Моделирование межмолекулярного взаимодействия молекул триглицеридов жирных кислот с водой проводилось с помощью пакета классической молекулярной динамики (МД) GROMACS [15] с силовым полем AMBER-03 [16]. Модельная сцена представляла трехмерную ячейку (с размерами $4 \times 4 \times 4$ nm) с периодическими границами. Молекула триглицерида жирной кислоты помещалась случайным образом в пределах ячейки перед началом каждого моделирования. Остальное пространство заполнялось водным раствором. Начальные скорости атомов имели максвелловское распределение и задавались с помощью генератора случайных чисел па-

кета GROMACS. При проведении моделирования использовались термостат и баростат Берендсена [17], обеспечивающие сходимость термодинамических параметров системы к следующим значениям: $T_0 = 300$ K и $P_0 = 1$ бар. Временной шаг моделирования был равен 0.0001 пс, а полное время составило 5 нс. Состояние системы записывалось каждые 0.1 пс. Записанные траектории движения молекул обрабатывались средствами пакета GROMACS и с помощью программы VMD (Visual Molecular Dynamics) [18]. Для каждой исследуемой системы моделирование проводилось 20 раз с последующим усреднением результатов.

Далее с помощью программы VMD оценивалось среднее число водородных связей, образовавшихся между молекулами жирных кислот и молекулами воды в единицу времени. Полагалось, что ВС образуется, если выполняются следующие геометрические критерии: $R \leq 3.5$ Å [19] и $\phi \leq 30^\circ$, где R – расстояние между атомом донора А, ковалентно связанным с атомом водорода Н, и атомом акцептора В другой молекулы или функциональной группы той же молекулы, а ϕ – угол, образованный связями АН и АВ. Результаты статистической обработки образовавшихся в ходе межмолекулярного взаимодействия ВС для четырех триглицеридов жирных кислот представлены на рис. 2. По оси ординат отложены значения процента от заселенности – процента времени нахождения в водородосвязанном состоянии от общего времени наблюдения.

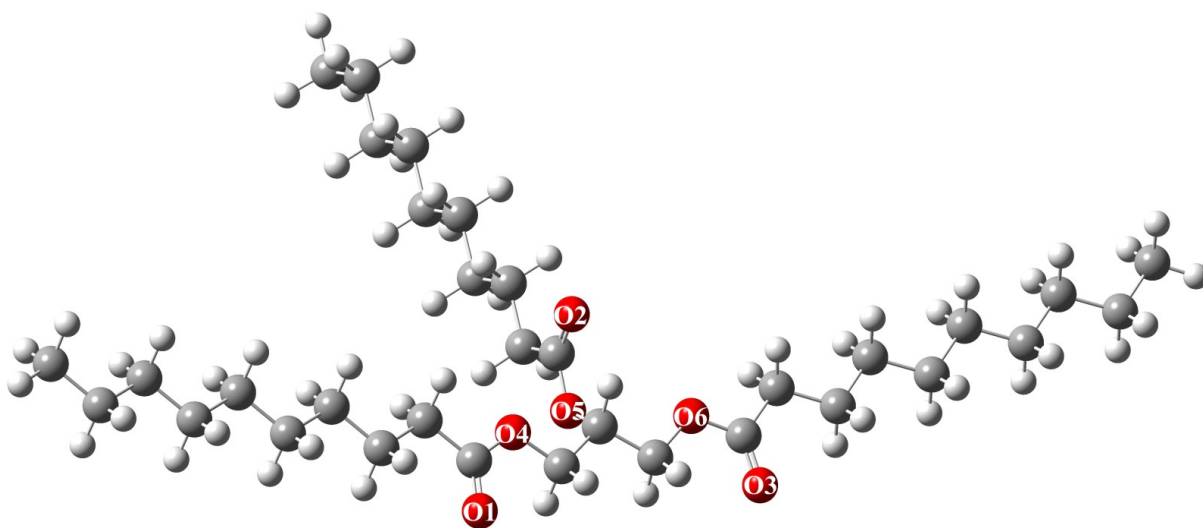


Рис. 1. Молекулярная модель триглицерида каприновой кислоты. Буквами с цифрами отмечены атомы кислорода (цвет онлайн)

Fig. 1. Molecular model of capric acid triglyceride. Oxygen atoms are marked with letters and numbers (color online)

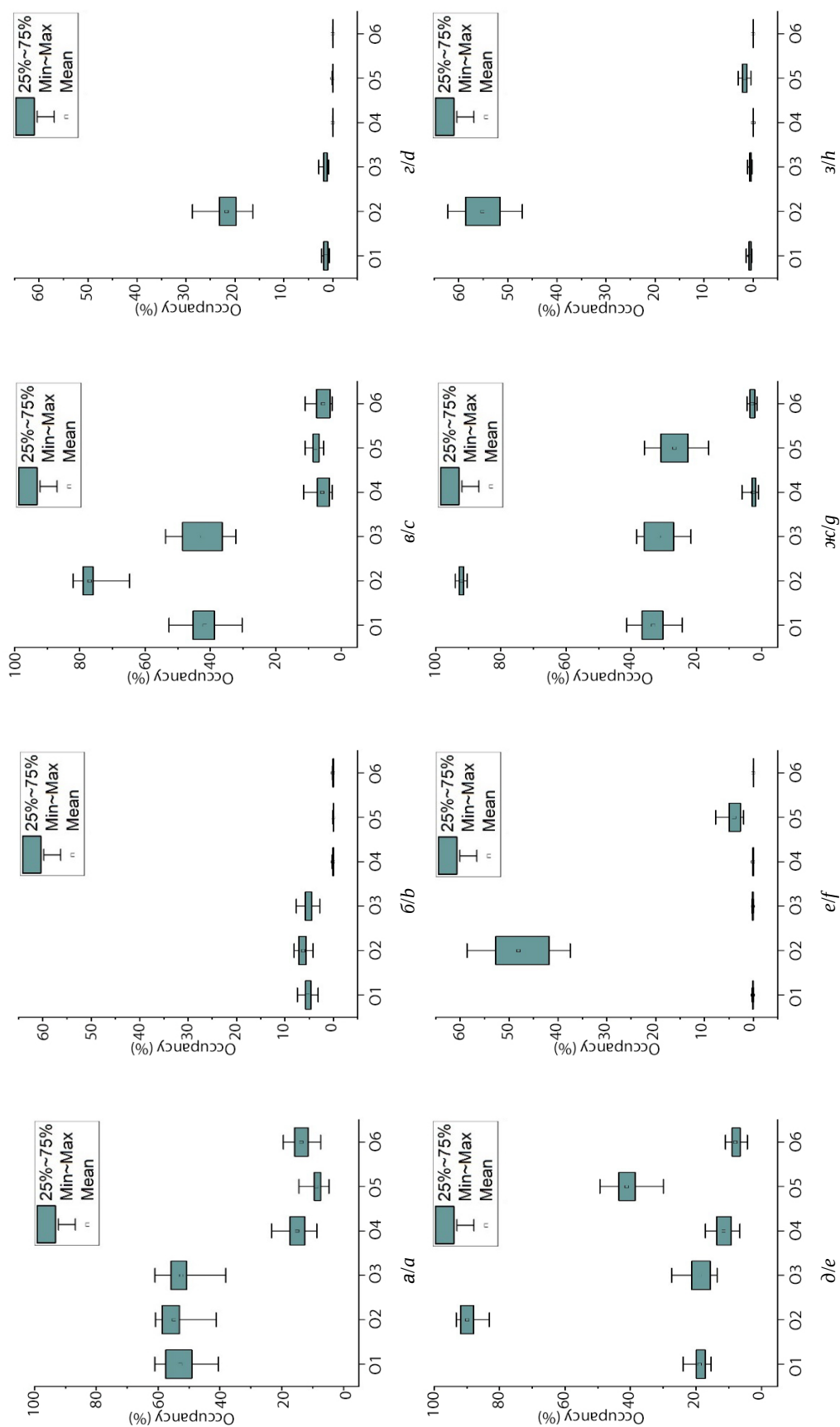


Рис. 2. Заселенности образования ВС между молекулами воды и различными атомами кислорода ряда триглицеридов жирных кислот: триацетин (а), трибутирин (б), трипальмитин (в) и трипальмитин (г) для атомов кислорода молекул триглицеридов (нумерация приведена на рис. 1). Аналогичные заселенности образования только множественных ВС для соответствующих жирных кислот представлены на рис. б, в, г. Легенда показывает: интерквартильный размах, диапазон от минимального до максимального значения, среднее значение (цвет онлайн)

Fig. 2. Populations of hydrogen bond formation between water molecules and various oxygen atoms of a series of fatty acid triglycerides: triacetin (a), tributyrin (b), tripalmitin (c), and tripalmitin (g) for the oxygen atoms of the triglyceride molecules (numbering is given in Fig. 1). Similar populations of the formation of only multiple hydrogen bonds for the corresponding fatty acids are shown in (b), (d), (f), and (h). Occupancy percentage is the time spent in a hydrogen-bonded state (as a percentage of the total observation time). The legend shows: interquartile range, the range from the minimum to the maximum value, and the mean value (color online)



Дополнительно рассмотрена заселенность образования ВС для ансамбля из 8 молекул трибутирина (рис. 3).

Квантово-механическое моделирование

Все квантово-химические расчеты молекулярных структур проводились с помощью программы Gaussian [20]. При выборе расчетного метода для анализа моделей межмолекулярных комплексов исходили из того, что, с одной стороны, должны получить хорошую оценку энтальпии образования комплексов, а с другой стороны – иметь адекватные времена расчета. В качестве тестовых объектов мы выбрали димер муравьиной кислоты и димер молекулы воды, для которых известны экспериментальные значения энергии ассоциации [21–24]. Часть рассматриваемых в работе молекулярных систем имеют относительно большой размер, поэтому при выборе метода

мы ограничились методами теории функционала плотности, а в качестве базисных наборов для расчета геометрических параметров и силового поля тестировали только небольшие стандартные базисы 6-31+G(d), 6-31G++(d), а для уточнения энергии в гибридных методах применяли расширенный базисный набор 6-311+G(d,p). Для теста были выбраны два функционала. Это наиболее часто используемый для расчета больших молекулярных систем функционал B3LYP [25, 26], а также функционал ω B97XD [27], который разработан специально для учета нековалентных взаимодействий. Для повышения точности и более лучшей сходимости при всех расчетах, включая тестовые, были применены более жесткие критерии оптимизации геометрии (opt=tight), самосогласованного поля (SCF=Tight) и интегральной сетки (Int=UltraFine). Энтальпию ассоциации в данном тесте мы рассчитывали тремя спосо-

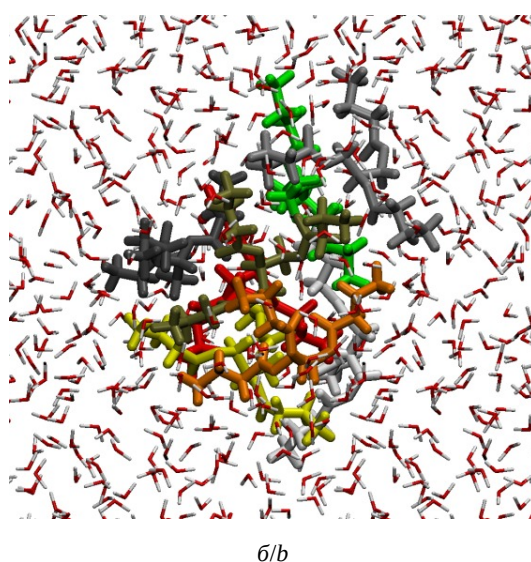
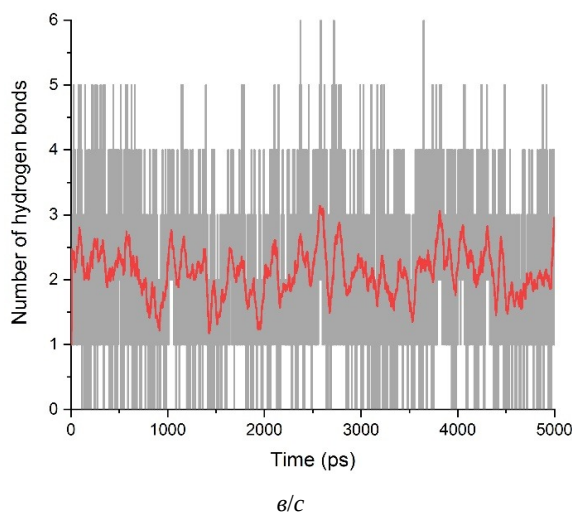
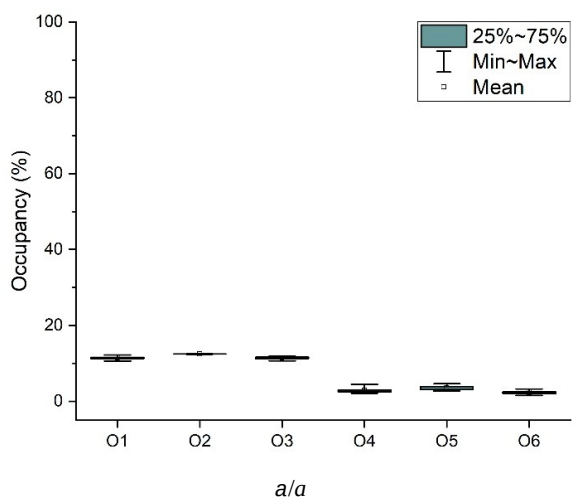


Рис. 3. Заселенность образования ВС между молекулами воды и различными атомами кислорода ансамбля из 8 молекул трибутирина (а). Пример конфигурации ансамбля молекул трибутириновой кислоты в окружении молекул воды (б). Зависимость числа образовавшихся водородных связей между молекулами воды и атомами кислорода молекулы трибутирина от времени (в). Красной (ломаной) линией показан результат аппроксимации скользящей средней с шириной окна $n = 50$ (цвет онлайн)

Fig. 3. Occupancy of HB formation between water molecules and various oxygen atoms of a tributyrin ensemble of 8 molecules (a). Example configuration of a tributyrin molecule ensemble surrounded by water molecules (b). The dependence of the number of formed hydrogen bonds between water molecules and oxygen atoms of the tributyrin molecule on time (c). The red line shows the result of a moving average approximation with a window width of $n = 50$ (color online)



бами. В первом случае рассчитывали полную электронную энергию и волновые числа оптимизированных структур димера и мономера, а также суперпозиционную базисную ошибку (*BSSE*) [28] для данного базиса. Энтальпия рассчитывалась по формуле

$$\Delta H_T^0 = \Delta E + \Delta ZPE + BSSE + \Delta H_{term}, \quad (1)$$

где ΔE – разница полных электронных энергии димера и мономеров, ΔZPE – разница нулевых колебательных энергий, *BSSE* суперпозиционная ошибка, ΔH_{term} – термодинамическая поправка, которая рассчитывалась по формулам [29].

Во втором случае использовали гибридную схему расчета, когда геометрические параметры и волновые числа рассчитывались с помощью метода B3LYP/6-31+G(d), а электронная энергия уточнялась с помощью однократной процедуры самосогласованного поля (СПП) с использованием метода wB97XD/6-311+G(d,p). Такой гибридный подход – широко распространенная и теоретически обоснованная стратегия в квантовой химии, направленная на достижение баланса между точностью и вычислительной эффективностью. Функционал B3LYP обеспечивает надежные результаты для большинства молекулярных систем, включая водородные связи. Этот функционал является быстрым и эффективным для трудоемких процедур, особенно для комплексов среднего и большого размера. Функционал wB97XD является ключевой частью гибридного метода. Данный функционал является представителем нового поколения DFT-методов с улучшенным описанием межмолекулярных взаимодействий. Он корректно описывает как короткодействующие, так и далекодействующие электронные взаимодействия. Наиболее важным преимуществом функционала wB97XD является введенная эмпирическая поправка на дисперсионные силы. Дисперсионные взаимодействия играют значительную роль в энергии стабилизации комплексов с водородной связью и других не ковалентных комплексов. Классические функционалы, такие как B3LYP, не могут адекватно описать эти силы. Поэтому применение wB97XD с дисперсионной поправкой обеспечивает гораздо более точную энергию ассоциации. Использование расширенного базиса 6-311+G(d,p) для одноточечного расчета энергии позволяет точнее вычислить значение энергии, так как он обеспечивает более детальное описание электронной плотности. Для расчета энергии,

особенно для тонких эффектов межмолекулярного взаимодействия, больший базис предпочтителен. Для этого базиса рассчитывалась и величина *BSSE*.

Энтальпия рассчитывалась так же по формуле (1). В третьем случае оценка энтальпии проводилась с помощью эмпирической формулы (2), которая учитывает изменение частоты валентного колебания при образовании водородной связи [30].

$$-\Delta H = 0.3\sqrt{\Delta\omega - 40}, \quad (2)$$

где $\Delta\omega$ – изменение волнового числа валентного колебания (в нашем случае O–H).

Молекулярные модели димеров оптимизированные методом B3LYP/6-31+G(d) показана на рис. 4.

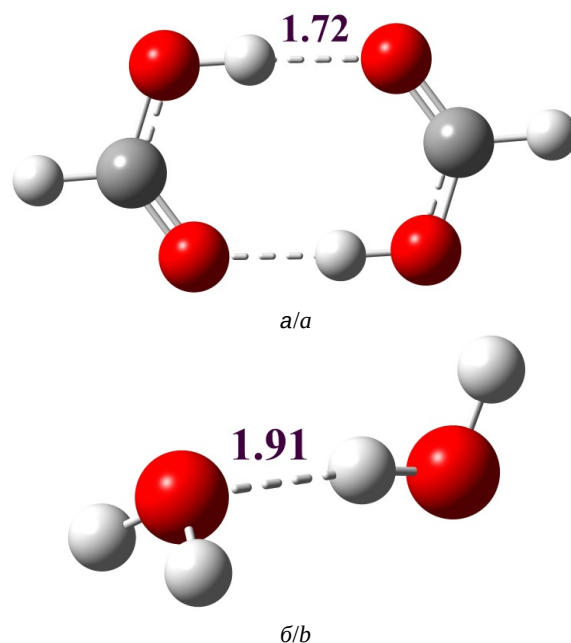


Рис. 4. Молекулярные модели димера муравьиной кислоты (а) и димера воды (б), оптимизированные методом B3LYP/6-31+G(d). Пунктирными линиями показаны водородные связи. Цифрами на рисунке показаны длины водородных связей в ангстремах (цвет онлайн)

Fig. 4. Molecular models of formic acid dimer (a) and water dimer (b), optimized by the B3LYP/6-31+G(d) method. Hydrogen bonds are shown by dotted lines. The numbers in the figure indicate the lengths of hydrogen bonds in angstrom (color online)

Димер муравьиной кислоты получается путем образования двух симметричных водородных связей между гидроксильными и карбонильными группами и принадлежит к группе симметрии C_{2h} . Димер молекулы воды принадлежит к группе симметрии C_s .



Результаты тестовых расчетов

Результаты проведенного тестового расчета энтальпии ассоциации представлены в табл. 1.

Анализ данных, приведенных в табл. 1, показывает, что методы, основанные на гибридном функционале B3LYP с базисными функциями 6-31+G(d) и 6-31++G(d), дают высокие средние процентные ошибки, особенно для энтальпии при ОК (около 12–12.5%), и общие средние ошибки более 10%. Методы, основанные на функционале wB97XD, значительно точнее и обеспечивают лучший результат. Средние процентные ошибки находятся в районе 1–1.4%. Гибридный метод B3LYP/6-31+G(d)/wB97XD/6-311+G(d,p) тоже дает хороший результат с общей средней ошибкой около 2.4%. Применение эмпирической формулы (2) связано с самыми высокими средними процентными ошибками для температурной энтальпии (от 23% до 26%), что свидетельствует о ее неспособности относительно точно предска-

зывать энтальпию ассоциации для данных систем по сравнению с квантово-химическими расчетами. Следует заметить, что использование базисных наборов для расчета комплексных систем без использования диффузных функций категорически нежелательно, несмотря на удовлетворительные значения энтальпии, которые получаются за счет компенсации завышенной энергии ассоциации и большой BSSE, а также значительную (в 3 раза) экономию время расчета. Это сказывается, например, на пространственной геометрии димера воды: так, метод B3LYP/6-31G(d) сильно занижает угол (на 18 градусов относительно метода B3LYP/6-31+G(d)) между осью соединяющие атомы кислорода и плоскостью молекулы воды, которая является акцептором протона, а также не находит минимум энергии, что подтверждается отрицательным значением одного либрационного колебания димера. Замена функционала B3LYP на wB97XD увеличивает общее время расчета

Таблица 1 / Table 1

Разницы полных энергий ΔE , термодинамические параметры (энтальпия ΔH для разных температур), ΔZPE и суперпозиционные ошибки BSSE в ед. (кДж/моль) образования димеров муравьиной кислоты и воды, рассчитанные разными методами

Differences in total energies, thermodynamic parameters and superposition errors in units (kJ/mol) of the formation of formic acid and water dimers, calculated by different methods

Димер муравьиной кислоты / Formic acid dimer						
Использованный метод / The method used	ΔE	ΔZPE	BSSE	ΔH_0^0	ΔH_{296K}^0	ΔH Формула (2)
B3LYP/6-31+G(d)	-66.3	8.3	5.3	-52.6	-54.1	-48.9
B3LYP/6-31++G(d)	-66.4	8.5	5.1	-52.8	-54.3	-49.0
B3LYP/6-31+G(d)/wB97XD/6-311+G(d,p)	-71.4	8.3	3.2	-59.9	-61.4	–
wB97XD/6-31+G(d)	-72.9	8.3	5.4	-59.2	-60.7	-48.8
wB97XD/6-31G++(d)	-72.9	8.5	5.2	-59.3	-60.8	-51.0
Эксперимент / Experiment [12]	–	–	–	-59.5 ± 0.5	-60.3 ± 0.7	–
Димер молекулы воды / Dimer of water molecule						
Использованный метод / The method used	ΔE	ΔZPE	BSSE	ΔH_0^0	$\Delta H_{218.15K}^0$	ΔH (1)
B3LYP/6-31+G(d)	-27.0	10.5	4.8	-11.6	-14.4	-10.5
B3LYP/6-31++G(d)	-27.0	10.7	5.0	-11.4	-14.2	-10.2
B3LYP/6-31+G(d)/wB97XD/6-311+G(d,p)	-26.4	10.5	3.4	-12.5	-15.2	–
wB97XD/6-31+G(d)	-28.2	10.5	4.7	-13.1	-15.8	-11.0
wB97XD/6-31G++(d)	-28.7	10.7	4.8	-13.2	-16.1	-10.6
Эксперимент и термодинамические таблицы (ATcT) / Experiment and Thermodynamic Tables (ATcT)	–	–	–	13.22 ± 0.12^1 [22] 13.220 ± 0.096^2 [24]	13.56 ± 3.97^3 [23] 15.454 ± 0.074^2 [24]	–

Примечание. ¹Переведено оригинальное значение в единицы кДж/моль ($1105 \pm 10 \text{ см}^{-1}$).

²Значения получены с помощью активных термохимических таблиц (ATcT).

³Переведено оригинальное значение в единицы кДж/моль ($3.24 \pm 0.95 \text{ ккал/моль}$).

Note. ¹The original value was converted to kJ/mol units ($1105 \pm 10 \text{ см}^{-1}$).

²The values were obtained using active thermochemical tables (ATcT).

³The original value was converted to kJ/mol units ($3.24 \pm 0.95 \text{ kcal/mol}$).



приблизительно в 1.5 раза. В гибридном методе добавление однократной СПП процедуры увеличивает время расчета незначительно, всего на шесть процентов. Исходя из этого в качестве оптимального метода оценки энтальпии данных комплексных систем был выбран гибридный метод.

Результаты и их обсуждение

Результаты молекулярной динамики показывают, что самыми доступными для образования ВС являются карбонильные группы сложного эфира, при этом влияет разное строение центральной и одинаковых двух боковых углеводородных цепей. Заселенность образования ВС с центральной цепью гораздо выше чем с боковыми. При этом заселенность в отличие от боковых растет с увеличением длины цепи. Похожая ситуация наблюдается для атома кислорода О5 центральной цепи, здесь речь идет уже о относительном росте заселенности по сравнению с боковыми

цепями в зависимости от длины цепи. Для трикаприлина заселенность О5 стала даже выше чем вероятность образования с боковыми карбоновыми группами. Но при переходе к трипальмитину относительная заселенность опять стала ниже, оставаясь сравнимой по величине. Такие перепады заселенностей возможно связаны с изменением конформационных возможностей цепей при их росте. В случае с ансамблем из восьми молекул трибутирина помещенных в воду, как и ожидалось, заселенность образования водородных связей заметно снизилась за счет образования гидрофобных агрегатов. Также выровнялась заселенность центральной и боковых цепей. При этом общие тенденции заселенности сохранились. Исходя из этого, для дальнейшего анализа были построены две наиболее вероятные модели моногидратов первого типа (Тип 1) и второго типа (Тип 2) где акцептором протона выступают кислороды О2 и О3 центральной и боковой цепи соответственно. Структура моногидратов триаце-

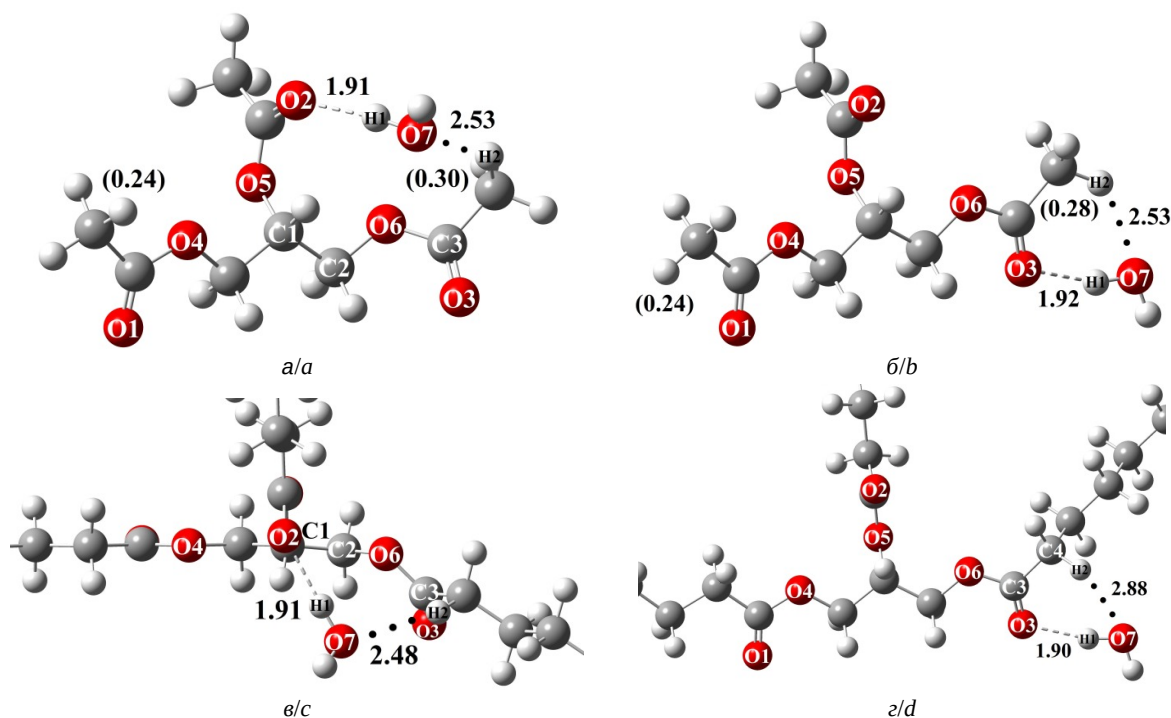


Рис. 5. Пространственная структура моногидратов триацетина: Тип 1 (а), Тип 2 (б). Фрагменты структуры моногидратов тристеарина: Тип 1 (в), Тип 2 (г), оптимизированные методом B3LYP/6-31+G(d). Пунктирными линиями обозначены классические водородные связи, точками – неклассические водородные связи. Буквами с номерами отмечены все атомы кислорода, некоторые атомы углерода и водорода, которые необходимы для обсуждения. Цифрами указаны длины водородных связей в ангстремах. Цифрами в скобках заряды на атомах по Малликену

Fig. 5. Spatial structure of triacetin monohydrates: Type 1 (a), Type 2 (b) and fragments of the structure of triasterol monohydrates Type 1 (c), Type 2 (d) optimized by the B3LYP/6-31+G(d) method. Classical hydrogen bonds are marked with dash lines, non-classical hydrogen bonds are marked with dots. All oxygen atoms, some carbon and hydrogen atoms, which are necessary for the discussion, are marked with letters with numbers. The numbers indicate the lengths of hydrogen bonds in angstroms. The numbers in brackets indicate the charges on the atoms according to Mulliken



тина и триастерина оптимизированные методом B3LYP/6-31+G(d) показана на рис. 5.

Как видно из рис. 5, пространственная структура моногидратов стабилизируется не только образованием классической ВС О–Н...О, но и образованием неклассических водородных связей (НВС) С–Н...О где донором протона выступают метильные и метиленовые группы. Подтверждением образования этих связей служит изменение зарядов на атомах водорода H2 по сравнению с симметричными их аналогами на другой цепи. В случае моногидрата Типа 1 молекула воды выступает мостиком между центральной и боковой цепью триглицерида. Образование НВС заметно влияет на пространственную структуру цепей триглицеридов. Образования НВС в моногидратах Типа 1 приводит к сильному отклонению цепи рис. 5, в от первоначального направления, двугранный угол C1C2O6C3 изменяется на 46 градусов. Аналогичная ситуация наблюдается в моногидратах Типа 2, двугранный угол O6C3C4H2 меняется на 89 градусов. Исключением является триацетин, поскольку при

оптимизации пространственной конфигурации с образованием НВС практически не потребовалось вращать цепь. При переходе от триацетина к более длинным триглицеридам меняется длина НВС, что связано с заменой метильной группы на метиленовую. В моногидратах Типа 1 она немного уменьшается, а для Типа 2 значительно увеличивается. Расчет термодинамических параметров (табл. 2) показывает, что моногидраты Типа 1 в сравнении с Типом 2 являются заметно более стабильными, что согласуется с данными молекулярной динамики.

Анализ термодинамических параметров показал, что для моногидратов наблюдаются несколько регрессионных зависимостей между параметрами ассоциации и длиной углеводородных цепей, которые стоит обсудить. Графическое представление этих зависимостей показано на рис. 6.

Как видно из рис. 6 линейная зависимость между энергией ассоциации и длиной цепей для обоих моногидратов слабо обусловлена, применение полиномиальной зависимости второй

Таблица 2 / Table 2

Длины водородных связей R_H в ангстремах, разница электронных энергий ΔE , суперпозиционная ошибка $BSSE$, термодинамические характеристики (энтальпия ΔH для температур 0K и 298.15 K) в единицах кДж/моль и константы равновесия моногидратов триглицеридов насыщенных кислот, рассчитанные методом B3LYP / 6-31+G (d) / wB97XD / 6-311+G (d,p)

Hydrogen bond lengths in angstroms, electron energy difference, superposition error, thermodynamic characteristics in kJ/mol units, and equilibrium constants of saturated acid triglyceride monohydrates calculated by the B3LYP / 6-31+G (d) / wB97XD / 6-311+G (d,p) method

Перечень моногидратов. Тип 1 / List of monohydrates of the Type 1	R_H	ΔE	$BSSE$	ΔZPE	ΔH_0^0	$\Delta H_{298.15}^0$	$T\Delta S$	K_α
Триацетин / Triacetin	1.91	-36.8	3.8	8.8	-24.2	-25.9	-37.0	1.1×10^{-2}
Трибутирин / Tributyrin	1.91	-37.1	4.1	8.6	-24.4	-25.8	-37.0	1.1×10^{-2}
Трикаприлин / Tricaprylin	1.91	-37.4	4.2	8.6	-24.6	-26.0	-37.8	8.3×10^{-3}
Трикаприн / Tricaprin	1.91	-37.4	4.2	8.6	-24.6	-25.9	-38.1	7.3×10^{-3}
Трилаурин / Trilaurin	1.91	-37.4	4.2	8.9	-24.3	-25.8	-38.8	5.4×10^{-3}
Тримиристин / Trimyristin	1.91	-37.4	4.2	8.7	-24.5	-25.9	-38.4	6.4×10^{-3}
Трипальмитин / Tripalmitin	1.91	-37.5	4.2	8.7	-24.5	-25.9	-38.7	5.6×10^{-3}
Тристеарин / Tristearin	1.91	-37.3	4.2	8.8	-24.3	-25.7	-39.2	4.4×10^{-3}
Перечень моногидратов. Тип 2 / List of monohydrates of the Type 2	R_H	ΔE	$BSSE$	ΔZPE	ΔH_0^0	$\Delta H_{298.15}^0$	$T\Delta S$	K_α
Триацетин / Triacetin	1.92	-29.6	2.0	7.8	-19.8	-20.6	-32.1	9.6×10^{-3}
Трибутирин / Tributyrin	1.91	-30.6	2.4	9.2	-19.0	-20.2	-34.0	3.7×10^{-3}
Трикаприлин / Tricaprylin	1.90	-31.6	2.6	9.5	-19.4	-20.8	-35.0	3.2×10^{-3}
Трикаприн / Tricaprin	1.90	-31.6	2.5	9.5	-19.6	-20.9	-34.7	3.8×10^{-3}
Трилаурин / Trilaurin	1.90	-31.7	2.6	9.3	-19.8	-21.0	-33.8	5.7×10^{-3}
Тримиристин / Trimyristin	1.90	-31.5	2.5	9.4	-19.6	-20.8	-34.2	4.7×10^{-3}
Трипальмитин / Tripalmitin	1.90	-31.6	2.6	9.6	-19.5	-20.8	-34.7	3.6×10^{-3}
Тристеарин / Tristearin	1.90	-31.7	2.6	9.0	-20.1	-21.0	-31.9	1.2×10^{-2}

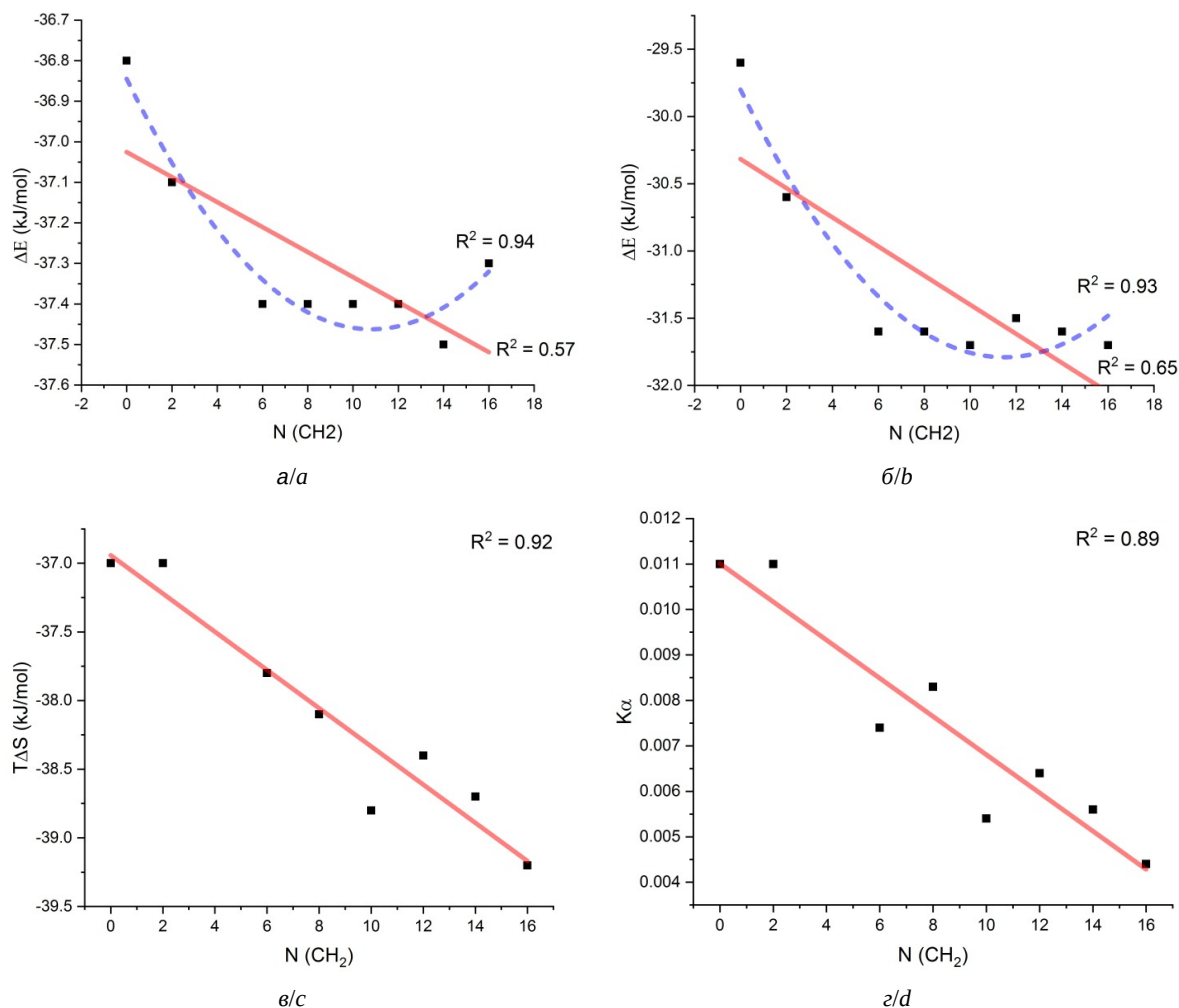


Рис. 6. Зависимость от количества метиленовых групп: величины ΔE – Тип 1 (а), Тип 2 (б); величины $T\Delta S$ (в) и константы равновесия K_α (г) моногидратов Тип 1. Сплошной линией на рисунках показана прямая линейной регрессии, пунктирной линией – полиномиальная регрессия второй степени. Приведены значения коэффициента детерминации R^2 (цвет онлайн)

Fig. 6. Dependence on the number of methylene groups of the value: of ΔE for Type 1 (a) and Type 2 (b); the value of $T\Delta S$ (c), and the equilibrium constant K_α (d) for Type 1 monohydrates. The solid line in the figures represents the linear regression line, the dashed line shows the second-degree polynomial regression, and the corresponding coefficients of determination R^2 are also provided (color online)

степени дает хорошие значения детерминации, но появляется минимум в области 11 метиленовых групп, которые сложно объяснить. Скорее всего за счет изменения структурных параметров, к которым относятся появление метиленовых групп и начальное удлинение цепей, непосредственно влияющих на структуру моногидратов, энергия ассоциации увеличивается до трикаприлина, а дальше остается стабильной с небольшими отклонениями. Для значений энтальпии, которые кроме энергии включают в себя и другие параметры, наблюдается аналогичная ситуация. Для моногидратов Типа 1 в отличие от Типа 2 существуют явные линейные регресси-

онные зависимости параметров $T\Delta S$ и константы равновесия K_α от длины углеводородной цепи рис. 6, в, г. Это указывает на то, что моногидраты Типа 1, в которых одна молекула воды связывает две цепи, влияют на изменение энтропии иначе, чем моногидраты Типа 2. При этом по мере увеличения длины цепей число допустимых конформаций связанных цепей уменьшается по сравнению с их возможным количеством в отсутствие гидратации. Для Типа 2 такая зависимость не наблюдается, что судя по всему связано с тем, что гидратирование затрагивает только ограниченную часть одной цепи. Падение константы равновесия для Типа 1 объясняется



тем, что для длинных цепей гидратация требует больших энергозатрат на преодоления потери конформационной энтропии.

Заключение

На основании комплексного молекулярного моделирования можно заключить, что атом кислорода карбонильной группы центральной цепи является центром гидратации насыщенных триглицеридов, поскольку молекулярная динамика показывает наибольшую заселенность образования ВС с молекулами воды, а квантовая механика наибольшую энергию ассоциации. Энергия и энтальпии ассоциации моногидратов Типа 1 и Типа 2 не имеют уверенной регрессионной зависимости от длины углеводородной цепи. Начиная с трикаприлина эти параметры выходят на насыщение с небольшими отклонениями. До трикаприлина изменение этих параметров связано с изменением стерических затруднений при начальном увеличении цепей, что, в частности, предполагает замену метильной группы на метиленовую при образовании НВС для стабилизации моногидрата. Существует линейная регрессия параметров $T\Delta S$ и K_α от длины углеводородной цепи для моногидрата Типа 1. Причина заключается в том, что с увеличением длины цепей количество доступных конформаций для двух связанных цепей становится меньше по сравнению с их числом в отсутствие гидратации. Поэтому для более длинных цепей процесс гидратации сопровождается большими энергозатратами, необходимыми для компенсации потери конформационной энтропии. Результаты работы вносят вклад в понимание механизмов гидратации триглицеридов и их роли в стабилизации водно-органических взаимодействий, что имеет значение для пищевой промышленности, фармацевтики и разработки липидных носителей.

Список литературы / References

1. McClements D. J. *Food Emulsions: Principles, Practices, and Techniques*. 3rd edition. Boca Raton, CRC Press, 2015. 714 p. <https://doi.org/10.1201/b18868>
2. Ravotti R., Worlitschek J., Pulham C., Stamatiou A. Triglycerides as novel phase-change materials: A review and assessment of their thermal properties. *Molecules*, 2020, vol. 25, iss. 23, art. 5572. <https://doi.org/10.3390/molecules25235572>
3. Tascini A. S., Noro M. G., Chen R., Seddon J. M., Bresme F. Understanding the interactions between sebum triglycerides and water: A molecular dynamics simulation study. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2018, vol. 20, iss. 3, pp. 1848–1860. <https://doi.org/10.1039/C7CP06889A>
4. Chumpitaz L. D. A., Coutinho L. F., Meirelles A. J. A. Surface tension of fatty acids and triglycerides. *J. Amer. Oil Chem. Soc.*, 1999, vol. 76, iss. 3, pp. 379–382. <https://doi.org/10.1007/s11746-999-0245-6>
5. Javadi A., Dowlati S., Shourni S., Rusli S., Eckert K., Miller R., Kraume M. Enzymatic hydrolysis of triglycerides at the water–oil interface studied via interfacial rheology analysis of lipase adsorption layers. *Langmuir*, 2021, vol. 37, iss. 44, pp. 12919–12928. <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.1c01963>
6. Caruso B., Wilke N., Perillo M. A. Triglyceride lenses at the air–water interface as a model system for studying the initial stage in the biogenesis of lipid droplets. *Langmuir*, 2021, vol. 37, iss. 37, pp. 10958–10970. <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.1c01359>
7. Kinard T. C., Wrenn S. P. Triglycerides stabilize water/organic interfaces of changing area via conformational flexibility. *Langmuir*, 2024, vol. 40, iss. 5, pp. 2500–2509. <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.3c02473>
8. Cao Y., Marra M., Anderson B. D. Predictive relationships for the effects of triglyceride ester concentration and water uptake on solubility and partitioning of small molecules into lipid vehicles. *J. Pharm. Sci.*, 2004, vol. 93, iss. 11, pp. 2768–2779. <https://doi.org/10.1002/jps.20126>
9. Benedikt T., Briesen K. H. Water–triglyceride interfaces limit permeability and diffusion of aromamolecules in butter. *Eur. J. Lipid Sci. Technol.*, 2024, vol. 126, iss. 12, art. 2300248. <https://doi.org/10.1002/ejlt.202300248>
10. Groot C. C. M., Velikov K. P., Bakker H. J. Structure and dynamics of water molecules confined in triglyceride oils. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, vol. 18, iss. 42, pp. 29361–29368. <https://doi.org/10.1039/C6CP05883C>
11. Papageorgiou D. G., Demetropoulos I. N., Lagaris I. E., Papadimitriou P. T. How many conformers of the 1,2,3-propanetriol triacetate are in gas phase and in aqueous solution? *Tetrahedron*, 1996, vol. 52, iss. 2, pp. 677–686. [https://doi.org/10.1016/0040-4020\(95\)00918-3](https://doi.org/10.1016/0040-4020(95)00918-3)
12. Berezin K. V., Dvoretiskii K. N., Chernavina M. L., Novoselova A. V., Nechaev V. V., Likhter A. M., Shagautdinova I. T., Smirnov V. V., Antonova E. M., Grechukhina O. N. The use of IR spectroscopy and density functional theory for estimating the relative concentration of triglycerides of oleic and linoleic acids in a mixture of olive and sunflower seed oils. *Opt. Spectrosc.*, 2019, vol. 127, iss. 6, pp. 955–961. <https://doi.org/10.1134/S0030400X1912004X>
13. Berezin K. V., Dvoretiskii K. N., Chernavina M. L., Novoselova A. V., Nechaev V. V., Antonova E. M., Shagautdinova I. T., Likhter A. M. The Use of Raman spectroscopy and methods of quantum chemistry for assessing the relative concentration of triglycerides of oleic and linoleic acids in a mixture of olive oil and sunflower seed oil. *Opt. Spectrosc.*, 2018, vol. 125, iss. 3, pp. 311–316. <https://doi.org/10.1134/S0030400X18090059>
14. Berezin K. V., Antonova E. M., Shagautdinova I. T., Chernavina M. L., Dvoretiskiy K. N., Grechukhina O. N., Vasilyeva L. M., Rybakov A. V., Likhter A. M. FT-IR spectrum of grape seed oil and quantum models of



- fatty acids triglycerides. *Proc. SPIE*, 2018, vol. 10716, art. 1071625. <https://doi.org/10.1117/12.2316488>
15. Van der Spoel D., Lindahl E., Hess B., Groenhof G., Mark E. A., Berendsen H. J. C. GROMACS: Fast, flexible, and free. *J. Comput. Chem.*, 2005, vol. 26, iss. 16, pp. 1701–1718. <https://doi.org/10.1002/jcc.20291>
16. Duan Y., Wu C., Chowdhury S., Lee M. C., Xiong G., Zhang W., Yang R., Cieplak P., Luo R., Lee T., Caldwell J., Wang J., Kollman P. A point-charge force field for molecular mechanics simulations of proteins based on condensed-phase quantum mechanical calculations. *J. Comp. Chem.*, 2003, vol. 24, iss. 16, pp. 1999–2012. <https://doi.org/10.1002/jcc.10349>
17. Berendsen H. J. C., Postma J. P. M., van Gunsteren W. F., DiNola A., Haak J. R., Molecular dynamics with coupling to an external bath. *J. Chem. Phys.*, 1984, vol. 81, iss. 8, pp. 3884–3690. <https://doi.org/10.1063/1.448118>
18. Humphrey W., Dalke A., Schulten K. VMD: Visual molecular dynamics. *J. Mol. Graph.*, 1996, vol. 14, iss. 1, pp. 33–38. [https://doi.org/10.1016/0263-7855\(96\)00018-5](https://doi.org/10.1016/0263-7855(96)00018-5)
19. Loof H. D., Nilsson L., Rigler R., Molecular dynamics simulation of galanin in aqueous and nonaqueous solution. *J. Am. Chem. Soc.*, 1992, vol. 114, iss. 11, pp. 4028–4035. <https://doi.org/10.1021/ja00037a002>
20. Frisch M. J., Trucks G., Schlegel H. B., Scuseria G. E., Robb M. A., Cheeseman J. R., Scalmani G., Barone V., Mennucci B., Petersson G. A., Nakatsuji H., Caricato M., Li X., Hratchian H. P., Izmaylov A. F., Bloino J., Zheng G., Sonnenberg J. L., Hada M., Ehara M. [et al.]. *Gaussian 09, Revision A.02*. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
21. Kollipost F., Wugt Larsen R., Domanskaya A. V., Nörenberg M., Suhm M. A., Communication: The highest frequency hydrogen bond vibration and an experimental value for the dissociation energy of formic acid dimer. *J. Chem. Phys.*, 2012, vol. 136, iss. 15, art. 151101. <https://doi.org/10.1063/1.4704827>
22. Rocher-Casterline B. E., Ch'ng L. C., Mollner A. K., Reisler H. Communication: Determination of the bond dissociation energy (D_0) of the water dimer, $(\text{H}_2\text{O})_2$, by velocity map imaging. *J. Chem. Phys.*, 2011, vol. 134, iss. 21, art. 211101. <https://doi.org/10.1063/1.3598339>
23. Nakayama T., Fukuda H., Kamikawa T., Sakamoto Y., Sugita A., Kawasaki M., Amano T., Sato H., Sakaki S., Morino I., Inoue G. Effective interaction energy of water dimer at room temperature: An experimental and theoretical study. *J. Chem. Phys.*, 2007, vol. 127, iss. 13, art. 134302. <https://doi.org/10.1063/1.2773726>
24. Ruscic B. Active thermochemical tables: Water and Water Dimer. *J. Phys. Chem. A*, 2013, vol. 117, iss. 46, pp. 11940–11953. <https://doi.org/10.1021/jp403197t>
25. Becke A. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. *J. Chem. Phys.*, 1993, vol. 98, iss. 7, pp. 5648–5652. <https://doi.org/10.1063/1.464913>
26. Lee C., Yang W., Parr R. G., Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Phys. Rev. B*, 1988, vol. 37, iss. 2, pp. 785–789. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.785>
27. Chai J.-D., Head-Gordon M. Systematic optimization of long-range corrected hybrid density functionals. *J. Chem. Phys.*, 2008, vol. 128, iss. 8, art. 084106. <https://doi.org/10.1063/1.2834918>
28. Simon S., Duran M., Dannenberg J. How does basis set superposition error change the potential surfaces for hydrogen-bonded dimers? *J. Chem. Phys.*, 1996, vol. 105, iss. 24, pp. 11024–11031. <https://doi.org/10.1063/1.472902>
29. Fayfel A. B., Berezin K. V. Program for calculating thermodynamic characteristics of intermolecular complexes based on quantum-mechanical calculations. Tuchin V. V., ed. *Problemy opticheskoy fiziki: Materialy 7 Mezhdunarodnoy molodezhnoy nauchnoy shkoly po optike, lazernoj fizike i biofizike. Vol. 2* [Problems of Optical Physics: Proceedings of the 7th International youth scientific school on optics, laser physics and biophysics. Vol. 2]. Saratov, The State Scientific Center “College” Publ., 2004, pp. 100–101 (in Russian).
30. Iogansen A. V. Infrared spectroscopy and spectral determination of hydrogen bond energy. In: Sokolov N. D., ed. *Vodorodnaya svyaz'* [Hydrogen bond]. Moscow, Nauka, 1981, pp. 112–155 (in Russian).

Поступила в редакцию 30.06.2025; одобрена после рецензирования 06.08.2025;
принята к публикации 10.09.2025; опубликована 28.11.2025

The article was submitted 30.06.2025; approved after reviewing 06.08.2025;
accepted for publication 10.09.2025; published 28.11.2025



Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 438–448

Izvestiya of Saratov University. Physics, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 438–448

<https://fizika.sgu.ru>

<https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-438-448>, EDN: NPDCQA

Научная статья

УДК 535.361:610.849.19:618.723



Конструкция модулятора терагерцового излучения на основе эффекта многоволновой интерференции в слоистой структуре, состоящей из большого числа жидкокристаллических π -ячеек

Анфал Фадиль Ахмед Муламахавш, Г. В. Симоненко[✉]

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

Анфал Фадиль Ахмед Муламахавш, аспирант кафедры оптики и биофотоники, anf.al.fadhel@yahoo.com, <https://orcid.org/0009-0007-7803-3565>
Георгий Валентинович Симоненко, доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры оптики и биофотоники, simonenkogv@sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6283-6335>, AuthorID: 28982

Аннотация. На основе компьютерного моделирования предлагается оригинальная жидкокристаллическая конструкция модулятора ТГц излучения, состоящая из стопки расположенных друг за другом одинаковых «классических» π -ячеек. Принцип работы модулятора основан на явлении многоволновой интерференции, которая управляется электрическим полем. Матричным методом исследованы характеристики предлагаемого устройства – зависимости пропускания устройства от управляющего напряжения, контрастного отношения, величины пропускания модулятора при подаче на него максимального управляющего напряжения. Показано, что контрастное отношение модулятора падает с ростом длины волны модулируемого излучения, а пропускание модулятора в состоянии с максимальным значением управляющего напряжения такой зависимости не проявляет. Обнаружено, что десятичный логарифм контрастного отношения модулятора линейно зависит от числа элементарных π -ячеек, входящих в его конструкцию. Коэффициент наклона этой линейной функции убывает с ростом длины волны модулируемого излучения. Показано, что описанная конструкция жидкокристаллического модулятора ТГц излучения критична к технологическому разбросу в толщину элементарной жидкокристаллической ячейки. Однако величина этого разброса укладывается в простую технологию изготовления элементарных π -ячеек и не требует улучшения.

Ключевые слова: модулятор, жидкий кристалл, компьютерное моделирование, характеристики устройства

Для цитирования: Анфал Фадиль Ахмед Муламахавш, Симоненко Г. В. Конструкция модулятора терагерцового излучения на основе эффекта многоволновой интерференции в слоистой структуре, состоящей из большого числа жидкокристаллических π -ячеек // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 438–448. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-438-448>, EDN: NPDCQA

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

Article

Design of a terahertz radiation modulator based on the effect of multi-wave interference in a layered structure consisting of a large number of liquid crystal π -cells

Anfal Fadhil Ahmed Mulamahawsh, G. V. Simonenko[✉]

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

Anfal Fadhil Ahmed Mulamahawsh, anf.al.fadhel@yahoo.com

Georgy V. Simonenko, simonenkogv@sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6283-6335>, AuthorID: 28982

Abstract. Background and Objectives: An original design of a liquid crystal THz radiation modulator is proposed based on computer modeling. It consists of a stack of identical “classical” π -cells located one after another. **Materials and Methods:** Based on a computer model and by using the matrix method, the characteristics of the proposed device are studied: dependence of the device transmission on the control voltage, contrast ratio, and the modulator transmission value when the maximum control voltage is applied to it. **Results:** It has been shown that the modulator contrast ratio decreases with increasing wavelength of the modulated radiation, and the modulator transmission in the state with the maximum value of the control voltage does not exhibit such a dependence. It has been found that the decimal logarithm of the modulator contrast ratio linearly depends on the number of elementary π -cells included in its design. The slope coefficient of this linear function decreases with increasing wavelength of the modulated radiation. It has been shown that the described design of the THz radiation LC modulator is critical



to the technological spread in the thickness of the elementary LC cell. However, the magnitude of this spread fits into the simple technology of manufacturing elementary π -cells and does not require improvement.

Keywords: modulator, liquid crystal, computer simulation, device characteristics

For citation: Anfal Fadhil Ahmed Mulamahawsh, Simonenko G. V. Design of a terahertz radiation modulator based on the effect of multi-wave interference in a layered structure consisting of a large number of liquid crystal π -cells. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 438–448 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-438-448>, EDN: NPDCQA

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

Введение

В настоящее время терагерцовый (ТГц) диапазон широко используется в беспроводной связи, системах безопасности, биологических системах визуализации и других областях науки и техники [1–8]. В силу этого актуальной задачей является разработка методов и устройств, способных модулировать исходное ТГц излучение. Для этих целей используются как механические модуляторы [9–12], так и более перспективные устройства на основе жидких кристаллов (ЖК) [13, 14]. ЖК модуляторы обладают рядом достоинств: они характеризуются хорошей широкополосной оптической анизотропией показателей преломления, являются одними из немногих материалов в ТГц-диапазоне с низкими потерями на поглощение, имеют большой диапазон перестройки фазового сдвига посредством внешнего поля [15].

Для модуляции ТГц излучения можно использовать различные конструкции ЖК устройств [13, 14, 16], которые основаны на управлении оптическими свойствами ЖК с помощью внешнего электрического поля. Так как при наложении внешнего электрического поля на слой ЖК изменяется его показатель преломления, а конструкция ЖК устройства является многослойной, то для модуляции ТГц излучения можно использовать явление многоволновой интерференции в такой структуре. С учетом этого настоящая статья посвящена исследованию оптических свойств оригинального многослойного ЖК модулятора ТГц излучения в условиях существования эффекта многоволновой интерференции и управления показателем преломления ЖК посредством внешнего электрического поля.

Конструкция модулятора и метод описания его характеристик

Принципы модуляции электромагнитного ТГц излучения могут быть основаны на использовании различных электрооптических эффектов в ЖК. Наиболее распространенным из них является управление показателем преломления

ЖК посредством воздействия внешним электрическим полем [17]. Если говорить об использовании определенных конструкций на базе ЖК ячеек, то наиболее верным выбором будет модулятор на основе «классической» π -ячейки. Это заключение обосновывается тем, что подобная конструкция имеет оптимальное сочетание динамических (малые времена срабатывания) и оптических (высокое контрастное отношение и высокий коэффициент пропускания) характеристик [18, 19]. В этом случае модуляцию электромагнитного излучения с помощью ЖК ячеек можно осуществить с использованием либо эффекта интерференции поляризованных волн [16], либо эффекта многоволновой интерференции [20]. Во втором случае модуляция излучения происходит за счет изменения показателя преломления необыкновенной волны в зависимости от внешнего управляющего напряжения. При изменении значения показателя преломления ЖК необыкновенной волны изменяется разность фаз интерферирующих волн, и, следовательно, меняется коэффициент пропускания модулятора. При этом показатель преломления ЖК для необыкновенной волны меняется при воздействии на ЖК электрического поля от своего максимального значения n_e до минимального n_o , что может позволить осуществить модуляцию излучения с большой глубиной.

Следует учитывать, что модуляция излучения возможна только при выполнении условия:

$$L_{\min} = \frac{\lambda_0}{2(n_e - n_o)}, \quad (1)$$

где $L_{\min}$ – толщина слоя ЖК, λ_0 – длина волны модулируемого излучения, n_e и n_o – коэффициенты преломления ЖК для необыкновенной и обыкновенной волн соответственно. Условие (1) отражает то обстоятельство, что фаза суммарной волны, прошедшей через модулятор в состоянии, когда напряжение не подано на ЖК (показатель преломления ЖК равен n_e), должна отличаться на π от фазы волны, прошедшей через модулятор в состоянии, когда рабочее напряжение подано на ЖК (показатель преломления ЖК стремится к n_o).



Очевидно, что если для ТГц излучения использовать только одну рабочую ЖК ячейку, то условие (1) выполняется только для очень больших значений толщин слоя ЖК. Известно [18, 19], что увеличение толщины слоя ЖК приводит к резкому росту времени реакции ЖК на управляющее напряжение, так как время реакции пропорционально квадрату толщины слоя ЖК.

Для решения этой проблемы была предложена конструкция модулятора не на одной ЖК ячейке, а на основе N одинаковых ЖК ячеек [16]. Стоит заметить, что описанная в этой работе конструкция модулятора основана на эффекте интерференции поляризованных волн в многослойной структуре из ЖК ячеек. В отличие от этой конструкции, мы предлагаем использовать только эффект многоволновой интерференции в многослойной структуре, состоящей из N одинаковых ЖК ячеек. Благодаря этому в этой конструкции необязателен выходной поляризатор, что дает увеличение коэффициента пропускания устройства. На рис. 1 показана схематическое изображение структуры такого модулятора. За основу взята одна «классическая» π -ячейка, толщина которой равна 2 мкм. Выбор такой ЖК ячейки в качестве базы позволит получить малые времена полного срабатывания ЖК устройства [18]. «Классическая» π -ячейка представляет собой гомогенную нематическую ЖК ячейку с антисимметричными граничными условиями и с незакрученной структурой ЖК. Антисимметричные граничные условия в ЖК ячейке означают, что угол наклона молекул ЖК на одной ориентирующей поверхности имеет такое же значение как и угол наклона молекул

ЖК на другой ориентирующей поверхности, но с противоположным знаком. Как отмечено выше, одна такая ячейка не пригодна для модуляции ТГц излучения, поэтому для соответствующего получения максимума интерференции поляризованных волн используем набор, состоящий из N одинаковых элементарных π -ячеек, каждая из которых имеет собственное электроуправление. Значения управляющего напряжения для каждой ЖК ячейки одинаковы, а напряжение подается одновременно на все ячейки. При этом направление ориентации молекул ЖК в каждой из ячеек совпадает друг с другом. Тогда минимальное число таких π -ячеек определяется интерференционным условием (1) следующим образом:

$$N_{\min} = \frac{L_{\min}}{L_o},$$

где L_o – толщина одной элементарной π -ячейки.

Пусть на такую структуру падает линейно поляризованная электромагнитная волна под углом падения 0° . Вектор поляризации падающей электромагнитной волны должен совпадать с направлением поляризации необыкновенной волны, возникающей в ЖК. Тип поляризации волны, распространяющейся в ЖК ячейке, изменяться не будет, так как излучение распространяется вдоль нормали к поверхности ячейки. То есть в прямом направлении распространяется только одна электромагнитная волна и тогда коэффициент пропускания суммарного излучения T_e можно получить, используя матричный формализм Абельеса [21, 22]. В этом случае устройство будет описываться комплексной матрицей S размера 2×2 , а коэффициент пропускания T_e такого

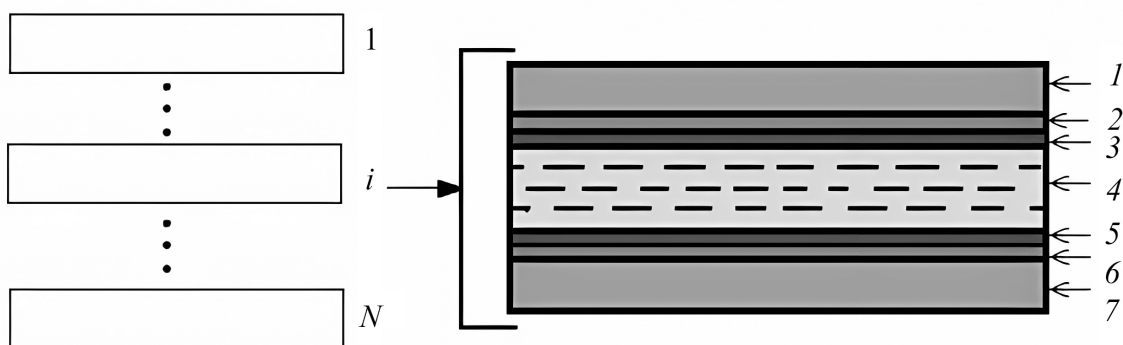


Рис. 1. Схематическое представление модулятора ТГц излучения на основе N ЖК ячеек: слева – стопка N одинаковых π -ячеек на основе ЖК; справа – отдельная ячейка: 1 и 7 – стеклянные подложки; 2 и 6 – управляющие электродные слои; 3 и 5 – ориентирующие слои; 4 – рабочий слой ЖК

Fig. 1. Schematic representation of a THz radiation modulator based on N LC cells: on the left – a stack of N identical π -cells based on LC; on the right – a single cell: 1 and 7 – glass substrates; 2 and 6 – control electrode layers; 3 and 5 – orienting layers; 4 – working LC layer



модулятора можно вычислить согласно представлению:

$$T_e = \tau \cdot \tau^*, \quad \tau = \frac{1}{S_{11}}, \quad (2)$$

где S_{11} – матричный элемент суммарной матрицы Абелеса S всего ЖК модулятора. Матрица S определяется как

$$S = I_1 \cdot (S_i)^N \cdot I_2, \quad (3)$$

где I_1, I_2 – матрицы Абелеса границы раздела воздух – стекло и стекло – воздух, соответственно; S_i – матрица Абелеса i -й π -ячейки (способ ее нахождения подробно описан в работе [22]).

На основе описанного алгоритма разработанная программа *Is-n* на языке Fortran 95 для расчета коэффициента пропускания ЖК модулятора, работающего на базе «классической» π -ячейки. Входными параметрами программы *Is-n* являются следующие параметры ЖК ячейки: показатель преломления и толщина стеклянных подложек; показатель преломления и толщина электродных слоев; показатель преломления и толщина ориентирующих слоев; средний по толщине необыкновенный показатель преломления ЖК (n_e) и толщина его слоя L_0 . К входным параметрам программы относятся также длина волны модулируемого электромагнитного излучения λ и число одинаковых ЖК ячеек N . Выходным параметром этой программы является значение коэффициента пропускания всего ЖК модулятора T_e . Для расчета среднего по толщине показателя преломления необыкновенного ЖК для заданного управляющего напряжения использовался программный комплекс MOUSE – LCD [18, 19, 23]. Точность компьютерного моделирования характеристик предложенного модулятора подтверждена сравнением с данными, полученными с помощью известного пакета программ MOUSE-LCD [19].

Результаты и их обсуждение

Рассмотрим влияние основных конструктивных параметров модулятора (толщины слоя элементарной ячейки L_0 и числа элементарных ячеек N) на коэффициент пропускания модулятора T_e . При моделировании считается, что каждая элементарная π -ячейка заполнена ЖК смесью со следующими физическими параметрами (значения даны в системе СГС): $k_{11} = 10.5 \cdot 10^{-6}$ дин, $k_{22} = 6.9 \cdot 10^{-6}$ дин, $k_{33} = 16.8 \cdot 10^{-6}$ дин, $\epsilon_{\perp} = 4.88$, $\epsilon_{\parallel} = 13.54$, вращательная вязкость $\gamma_1 = 0.15$ пуаз. При этом, по данным работ [24, 25],

некоторые ЖК вещества имеют слабую дисперсионную зависимость показателей преломления, что в первом приближении позволяет считать эту характеристику постоянной для ТГц диапазона.

Кроме этого следует заметить, что, по данным работы [24], существуют ЖК смеси, для которых коэффициент поглощения в ТГц диапазоне не превышает 10 см^{-1} , что позволяет считать слой ЖК непоглощающим. Во всех дальнейших расчетах эти физические параметры ЖК оставались постоянными, а значения технологических параметров стандартной π -ячейки (толщин и показателей преломления) взяты из работы [26]. Граничные условия в каждой элементарной π -ячейке считались следующими: 2° – угол наклона молекул ЖК на первой ориентирующей поверхности, -2° – угол наклона на второй ориентирующей поверхности, 0° – угол закрутки ЖК структуры.

ЖК модулятор является разновидностью ЖК устройства преобразования оптического излучения. Построение модели ЖК модулятора электромагнитного излучения сводится к определению трех характеристик – зависимости коэффициента пропускания устройства от управляющего напряжения, контрастного отношения и максимального пропускания устройства [27].

Контрастное отношение C или контрастность ЖК модулятора определяется как

$$C = \frac{T_e^{\text{on}}}{T_e^{\text{off}}}, \quad (4)$$

где T_e^{off} – коэффициент пропускания модулятора для случая, когда управляющие напряжение на его электродах равно нулю (оп-состояние); T_e^{on} – коэффициент пропускания модулятора для случая, когда управляющие напряжение на его электродах равно рабочему значению (off-состояние). Коэффициент пропускания в состоянии с максимальным его значением соответствует коэффициенту пропускания ЖК модулятора в оп-состоянии.

Вычисленная зависимость $T_e = T_e(U)$ ЖК модулятора для различных длин волн модулируемого излучения показана на рис. 2, а. Понять, почему пропускание такого ЖК модулятора зависит от управляющего напряжения, можно с помощью формулы Эйри для многоволновой интерференции [28]:

$$T = \frac{1}{(1 + 4\rho \cdot \sin^2(\pi \cdot n \cdot \frac{L}{\lambda}) / (1 - \rho)^2)}, \quad (5)$$



где T – коэффициент пропускания излучения, ρ – коэффициент отражения границы раздела воздух – пластина, n – показатель преломления, L – толщина пластины, λ – длина волны.

Очевидно, что если показатель преломления n (в данном случае – слоя ЖК) зависит от управляющего напряжения U (рис. 2, б), то и коэффициент пропускания будет являться функцией от этой величины. Стоит отметить, что, так как предлагаемая конструкция ЖК модулятора содержит очень большое число различных слоев с различными конструктивными параметрами, то простой аналитической зависимости коэффициента пропускания от этих параметров не существует. При этом форма зависимости $T_e = T_e(U)$ является стандартной для всех электрооптических эффектов, наблюдаемых в ЖК. Однако величина коэффициента пропускания зависит от фазы интерферирующих волн, и она различна для разных длин волн модулируемого излучения при одном и том же наборе конструктивных параметров модулятора. Благодаря этому величина T_e^{off} для малых длин волн значительно меньше, чем в области больших значений λ . Поэтому значения конструктивных параметров модулятора, которые обеспечивают необходимые характеристики модуляции излучения, зависят от длины волны модулируемого излучения. Это существенным образом отличает ЖК модуляторы видимого диапазона, которые

имеют один набор величин конструктивных параметров устройства для всего модулируемого спектра излучения. В то же время значения T_e^{on} слабо зависят от длины волны излучения (см. рис. 2, а). Следовательно, контрастное отношение ЖК модулятора будет сильно зависеть от длины волны модулируемого излучения.

На рис. 3 представлена зависимость логарифма контрастного отношения ЖК модулятора от числа элементарных π -ячеек, входящих в его конструкцию. Как показывает моделирование, зависимость $\lg C$ от числа элементарных π -ячеек N описывается линейной функцией с уровнем достоверности не ниже 93%. Для меньшей длины волны модулируемого излучения прямая имеет более высокий коэффициент наклона прямой. Поэтому если используется одна и та же конструкция ЖК модулятора для различных длин волн, то модуляцию излучения более эффективно можно проводить для более коротких длин волн. В силу этого конструкция ЖК модулятора (число элементарных ЖК ячеек) существенно зависит от длины волны модулируемого излучения.

Для ЖК модуляторов видимого диапазона существенную роль играет технологический разброс толщин рабочего зазора ЖК ячейки [18, 27]. Это объясняется тем, что основным физическим явлением, на базе которого работают почти все современные ЖК устройства отображения и преобразования информации, является

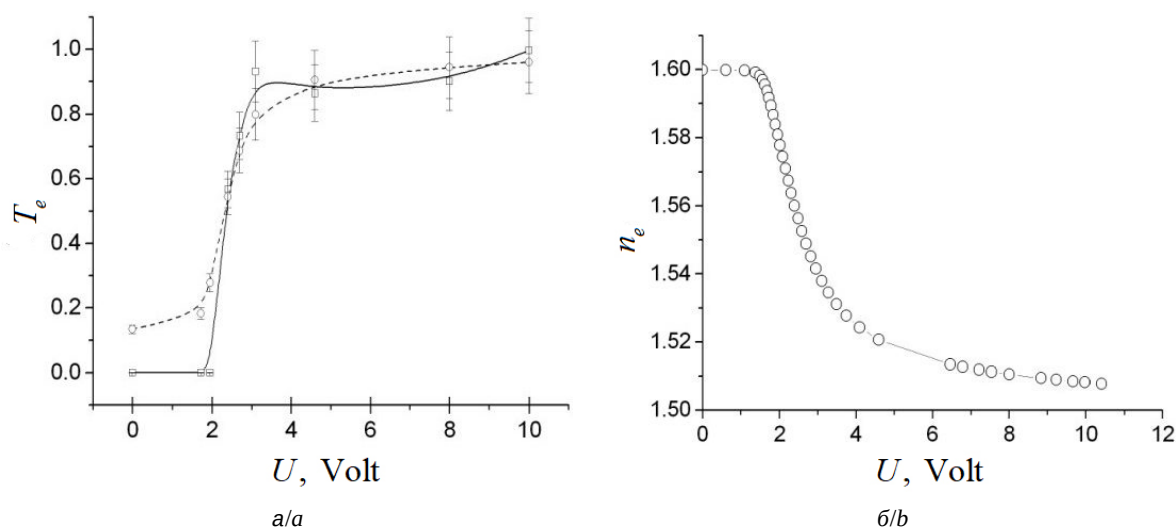


Рис. 2. Зависимость пропускания ЖК модулятора на основе π -ячейки без выходного поляризатора T_e (а) и среднего по толщине показателя преломления ЖК слоя n_e (б) от управляющего напряжения U для длин волн излучения: 17.5 мкм (---○---) и 1.5 мкм (—□—). Число элементарных π -ячеек $N = 30$

Fig. 2. Dependence of the transmission of the LC modulator based on a π -cell without an output polarizer T_e (a) and the average refractive index of the LC layer n_e (b) on the control voltage U for radiation wavelengths: 17.5 μm (---○---), 1.5 μm (—□—). The number of elementary π -cells is $N = 30$

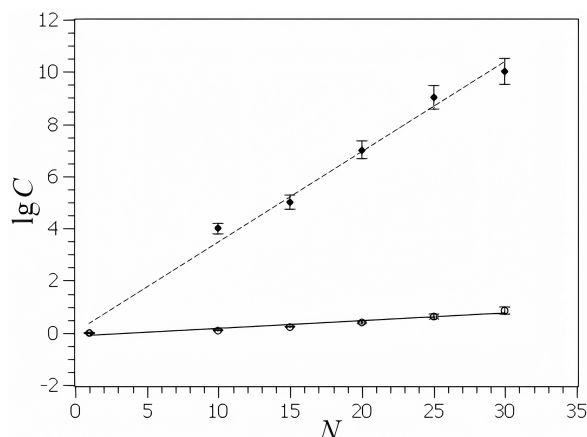


Рис. 3. Зависимость контрастного отношения ЖК модулятора от числа элементарных π -ячеек N для длин волн излучения: 17.6 мкм (—○—) и 1.5 мкм (---●---)

Fig. 3. Dependence of the contrast ratio of the LC modulator on the number of elementary π -cells N for radiation wavelengths: 17.5 μm (—○—) 1.5 μm (---●---)

тот или иной вид интерференции. Аналогичное заключение можно сделать и о предлагаемой конструкции ЖК модулятора ТГц излучения. Так,

на рис. 4 представлены зависимости коэффициента пропускания ЖК модулятора в состоянии «включено» T_e^{on} от толщины элементарной π -ячейки L_0 . Как можно видеть, зависимость $T_e^{\text{on}} = T_e^{\text{on}}(L_0)$ имеет осцилляции, число которых зависит от длины волны излучения, но не зависит от числа элементарных ЖК ячеек. Осциллирующий характер этой зависимости также можно понять, анализируя формулу (5), в которой пропускание объекта описывается гармонической функцией от отношения толщины слоя образца к длине волны излучения.

Величина амплитуды осцилляций (см. рис. 4) может составлять до 40% от максимальной величины. Это показывает, что данная конструкция ЖК модулятора ТГц излучения критична к технологическому разбросу в толщине элементарной ЖК ячейки. Однако величина этого разброса соответствует простой технологии изготовления элементарных π -ячеек [26], и поэтому не требует улучшения. Таким образом, оставаясь в рамках стандартной технологии

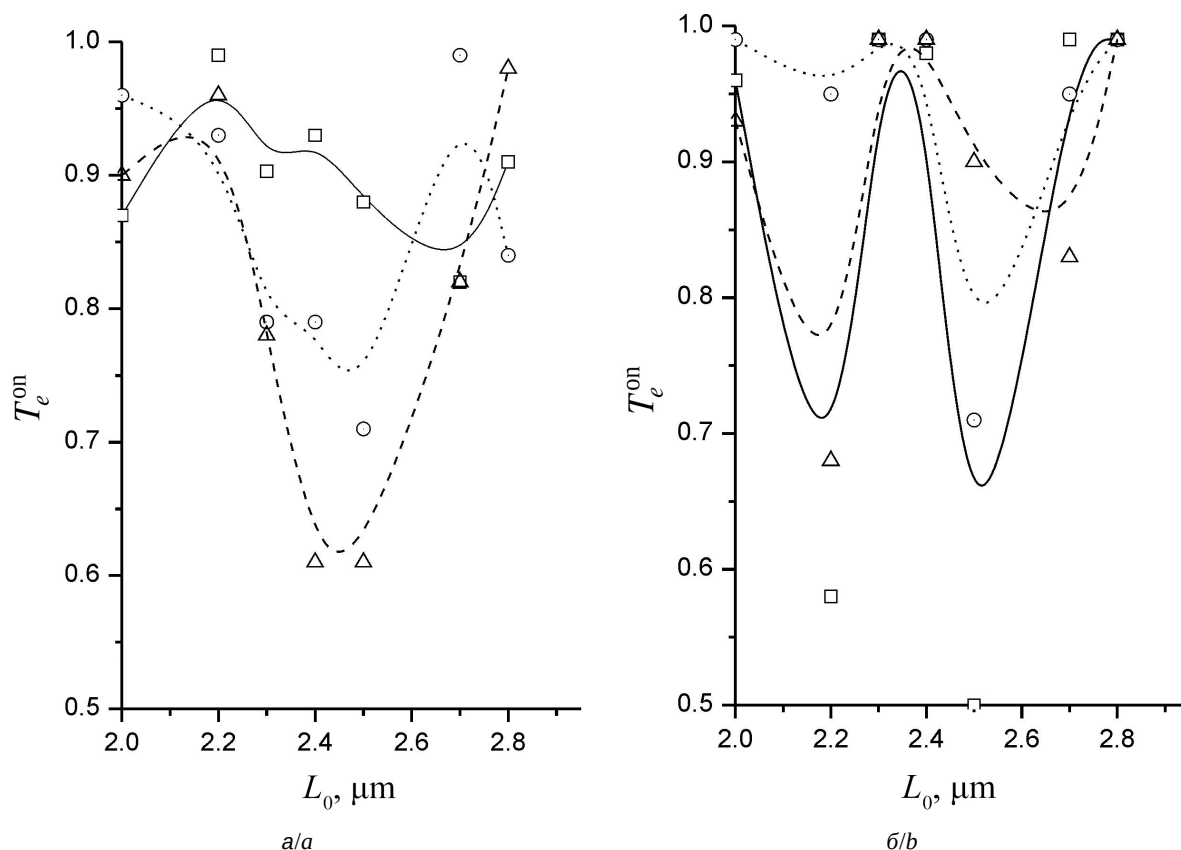


Рис. 4. Зависимость коэффициента пропускания T_e^{on} модулятора в он-состоянии от толщины элементарной π -ячейки L_0 для $\lambda = 17.5 \mu\text{m}$ (a) и $1.5 \mu\text{m}$ (б): $N = 30$ (—□—), $N = 20$ (···○···), $N = 10$ (---△---)

Fig. 4. Dependence of the transmittance of T_e^{on} of the modulator in the on-state on the thickness of the unit π -cell L_0 for $\lambda = 17.5 \mu\text{m}$ (a) and $1.5 \mu\text{m}$ (b): $N = 30$ (—□—), $N = 20$ (···○···), $N = 10$ (---△---)



производства промышленных ЖК устройств обработки и отображения информации, можно изготовить новый класс устройств модуляции излучения ТГц диапазона.

В отличие от видимого диапазона, в котором модуляция излучения производится устройством с одинаковыми технологическими параметрами для всего спектра излучения, для ТГц излучения это не так. В этом случае описанный выше модулятор с определенным набором технологических параметров пригоден только для очень узкого спектра излучения, так как основой его работы является многоволновая интерференция. Согласно современным представлениям (см., например, [29]), приоритетными областями применения предложенной конструкции ТГц модулятора могут быть:

- *медицина* (томография и иные медицинские исследования [30]), поскольку ТГц излучение является неионизирующим и относительно безопасным для человека;
- *системы безопасности*, так как высокая проникающая способность ТГц излучения позволяет использовать его для обнаружения предметов, скрытых за препятствиями [31];
- *системы связи* (беспроводные широкополосные высокоскоростные системы связи, в частности, для будущего поколения мобильной связи 6G [32]).

Практический интерес представляет сравнение основных характеристик предложенного устройства с характеристиками других конструкций модуляторов ТГц излучения [31, 33, 34]. В таблице представлены результаты такого сравнения. Описанная в статье конструкция модулятора (столбец 5) имеет сопоставимые характеристики с другими устройствами, но об-

ладает существенным преимуществом в технологии производства, так основана на стандартных ЖК ячейках, известных с середины 1970-х гг.

Заключение

В настоящей статье описана оригинальная конструкция ЖК модулятора излучения ТГц диапазона, в которой для получения модуляции используется явление многоволновой интерференции в многослойной структуре устройства. Конструкция модулятора представляет из себя стопку расположенных друг за другом одинаковых «классических» п-ячеек без выходного поляризатора. Методом компьютерного моделирования, основанного на матрицах Абелеса, проведено исследование функциональных характеристик предложенного многослойного ЖК модулятора излучения ТГц диапазона. Показано, что зависимость пропускания такого ЖК модулятора от управляющего напряжения имеет для ЖК устройства преобразования информации стандартный вид. Однако пропускание модулятора в off-состоянии (управляющее напряжение на электродах равно рабочему значению) существенно зависит от длины волны излучения и существенно меньше для малых длины волн. В то же время величина пропускания модулятора в on-состоянии (управляющее напряжение на электродах равно нулю) такой зависимости не проявляет. При этом зависимость десятичного логарифма контрастного отношения модулятора от числа элементарных п-ячеек имеет линейный характер, а коэффициент наклона этой зависимости для малых длин волн модулируемого излучения существенно больше чем для более низко частных волн. Таким образом, используя

Характеристики модуляторов ТГц-излучения

Characteristics of THz modulators

Характеристики / Characteristics	Физический принцип / Physical principle			
	На базе ячейки Голя / Based on the Golay cell [31]	На базе углеродных нанотрубок / Based on carbon tubes [33]	Интерференция поляризованных волн в ЖК / The interference of polarized waves in LC [34]	Многоволновая интерференция в ЖК / The multipath interference in LC
Глубина модуляции, % / Modulation depth, %	20	80	95	80–99
Полное время отклика прибора, мс / Full response time of the device, ms	> 25	10^{-9}	2	2
Рабочее напряжение, В / Working voltage, V	> 100	–	< 15	< 15



технологии изготовления «классических» п-ячеек, можно получить модуляцию ТГц излучения с высоким контрастным отношением и малыми временами срабатывания.

Список литературы

1. Zhou Le, Zhong T., Liu Yu., Yu T., Neyts K., Luo Zh., Wang H., Sun J., Zhou Ji., Shen Ya. When structured light encounters liquid crystals // *Adv. Funct. Mater.* 2024. Vol. 34. Art. 2404614 <https://doi.org/10.1002/adfm.202404614>
2. Wang L., Wang Ya., Zong G., Hu W., Lu Ya. Liquid crystal based tunable terahertz metadivices // *J. of Materiomics.* 2025. Vol. 11, № 1. P. 10–16. <https://doi.org/10.1016/j.jmat.2024.04.012>
3. Harter T., Fuellner C., Kemal J. N., Ummethala S., Steinmann J. L., Brosi M., Hesler J. L., Bruendermann E., Mueller A. S., Freude W., Randel S., Koos C. Generalized Kramers-Kronig receiver for coherent terahertz communications // *Nature Photonics.* 2020. Vol. 14, № 10. P. 601–606. <https://doi.org/10.1038/s41566-020-0675-0>
4. Luomahaara J., Sipola H., Gronberg L., Mayra A., Aikio M., Timofeev A., Tappura K., Rautiainen A., Tamminen A., Vesterinen V., Leivo M., Gao F., Vasama H., Luukanen A., Hassel J. A passive, fully staring THz video camera based on kinetic inductance bolometer arrays // *IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol.* 2020. Vol. 11, iss. 1. P. 101–108. <https://doi.org/10.1109/TTHZ.2020.3029949>
5. Mu T., Ye Y., Dai Z., Zhao R., Yang M., Ren X. Silver nanoparticles-integrated terahertz metasurface for enhancing sensor sensitivity // *Optics Express.* 2022. Vol. 30, iss. 23. P. 41101–41109. <https://doi.org/10.1364/OE.472520>
6. Lin Q. W., Wong H., Huitema L., Crunteanu A. Coding metasurfaces with reconfiguration capabilities based on optical activation of phase-change materials for terahertz beam manipulations // *Adv. Opt. Mater.* 2022. Vol. 10, № 1. Art. 2101699. <https://doi.org/10.1002/adom.202101699>
7. Mittleman D. M. Twenty years of terahertz imaging // *Opt. Express.* 2018. Vol. 26, iss. 8. P. 9417–9431. <https://doi.org/10.1364/OE.26.009417>
8. Sun Q. S., He Y. Z., Liu K., Fan S. T., Parrott E. P. J., Pickwell-MacPherson E. Recent Advances in Terahertz Technology for Biomedical Applications // *Quant. Imag. Med. Surg.* 2017. Vol. 7, № 3. P. 345–355. <https://doi.org/10.21037/qims.2017.06.02>
9. Alonso-del Pino M., Jung-Kubiak C., Reck T., Llombart N., Chattopadhyay G. Beam Scanning of Silicon Lens Antennas Using Integrated Piezomotors at Submillimeter Wavelengths // *IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol.* 2019. Vol. 9, iss. 1. P. 47–54. <https://doi.org/10.1109/TTHZ.2018.2881930>
10. Yang Y., Gurbuz O. D., Rebeiz G. M. An eight-element 370–410-GHz phased-array transmitter in 45-nm CMOS SOI with PeakEIRP of 8–8.5 dBm // *IEEE Trans. Microwave Theory Technol.* 2016. Vol. 64, iss. 12. P. 4241–4249. <https://doi.org/10.1109/TMTT.2016.2613850>
11. Niu T., Withayachumnankul W., Ung B. S. Y., Menekse H., Bhaskaran M., Sriram S., Fumeaux C. Experimental demonstration of reflectarray antennas at terahertz frequencies // *Opt. Express.* 2013. Vol. 21, iss. 3. P. 2875–2889. <https://doi.org/10.1364/OE.21.002875>
12. Fu X., Yang F., Liu C., Wu X., Cui T. J. Terahertz beam steering technologies: From phased arrays to field-programmable metasurfaces // *Adv. Opt. Mater.* 2020. Vol. 8, № 3. Art. 1900628. <https://doi.org/10.1002/adom.201900628>
13. Oh-E M., Zheng D. Reversibly switching liquid crystals between three orthogonal orientation states for use in rapid-response THz phase shifters // *Opt. Express.* 2023. Vol. 31. P. 8632–8640. <https://doi.org/10.1364/OE.484171>
14. Ji Y., Jiang X., Fan F., Zhao H., Cheng J., Wang X., Chang S. Active terahertz beam deflection based on a phase gradient metasurface with liquid crystal-enhanced cavity mode conversion // *Opt. Express.* 2023. Vol. 31. P. 1269–1281. <https://doi.org/10.1364/OE.479856>
15. Беляев В. Жидкокристаллические устройства для модуляции терагерцового излучения // *Электроника: наука, технология, бизнес.* 2020. № 5. С. 96–98. <https://doi.org/10.22184/1992-4178.2020.196.5.96.98>
16. Симоненко Г. В., Муламахавш А. Ф. А. Модуляция терагерцового излучения с помощью жидкокристаллических п-ячеек // *Прикладная физика.* 2024. № 3. С. 13–19. <https://doi.org/10.51368/1996-0948-2024-3-13-19>
17. He Z., Gou F., Chen R., Yin K., Zhan T., Wu S.-T. Liquid crystal beam steering devices: Principles, recent advances, and future developments // *Crystals.* 2019. Vol. 9, iss. 6. P. 292–300. <https://doi.org/10.3390/cryst9060292>
18. Симоненко Г. В. Компьютерное моделирование характеристик быстродействующих классических модуляторов на основе жидких кристаллов. Саратов : Издательство Саратовского университета, 2018. 136 с.
19. Yakovlev D. A., Chigrinov V. G., Kwok H. S. Modeling and optimization of LCD optical performance. Chichester, Wiley, 2015. XXIII+554 p. <https://doi.org/10.1002/9781118706749>
20. Муламахавш А. Ф. А., Симоненко Г. В. Оптические характеристики жидкокристаллических ячеек в терагерцовом диапазоне // *Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM-2024 / под ред. Г. В. Симоненко, В. В. Тучина.* Саратов : Издательство «Саратовский источник», 2024. С. 71–79. <https://doi.org/10.24412/ci-37275-2024-1-71-79>
21. Azzam R. M. A., Bashara N. M. Ellipsometry and polarized light. Amsterdam, North Holland, 1977. XVII+529 p.
22. Mulamahawsh Anfal Fadhil Ahmed, Simonenko G. V. Dependence of the electromagnetic radiation transmission coefficient of liquid crystal π -cells in the Terahertz Range // *J. of Optics and Photonics Research.* 2025, P. 1–6. (online). URL: <https://ojs.bonviewpress.com>



- com/index.php/JOPR/article/view/5210/1402 (дата обращения: 26.09.2025). <https://doi.org/10.47852/bonviewJOPR52025210>
23. Chigrinov V. G., Simonenko G. V., Yakovlev D. A., Podjachev Yu. B. The optimization of LCD electrooptical behavior using MOUSE – LCD software // *Mol. Cryst. Liq. Cryst. Sc. Techn. Section A. Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 2000. Vol. 351. P. 17–25. <https://doi.org/10.1080/10587250008023248>
24. Park H., Parrott E. P. J., Fan Fan, Lim M., Han H., Chigrinov V. G., Pickwell-MacPherson E. Evaluating liquid crystal properties for use in terahertz devices // *Opt. Express*. 2012. Vol. 20, iss. 11. P. 11899–11905. <https://doi.org/10.1364/OE.20.011899>
25. Li X., Tan N., Pivnenko M., Sibik J., Zeitler J. A., Chu D. Daping high-birefringence nematic liquid crystal for broadband THz applications // *Liquid crystal*. 2016. Vol. 43, № 7. P. 955–962. <https://doi.org/10.1080/02678292.2016.1153732>
26. Курчаткин С. П. Поверхностные явления и структура термотропных жидких кристаллов в капиллярных объемах : дис. ... д-ра хим. наук: 02.00.04 / Саратовский государственный университет. Саратов, 2001. 290 с.
27. Сухаруев А. С. Жидкокристаллические индикаторы. М. : Радио и связь, 1991. 256 с.
28. Born M., Wolf E. Principles of optics: Electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light. 7th (expanded) ed. Cambridge : Cambridge University Press, 1999. 985 p.
29. Радивон А. В., Пауков М. И., Катыба Г. М., Рагинов Н. И., Черных А. В., Езерский А. С., Циплакова Е. Г., Раков И. И., Арсенин А. В., Спектор И. Е., Зайцев К. И., Красников Д. В., Петров Н. В., Насибулин А. Г., Волков В. А., Бурданова М. Г. Пространственная модуляция терагерцового излучения при помощи генераторов оптических вихрей на основе тонких пленок одностенных углеродных нанотрубок // *Оптика и спектроскопия*. 2025. Т. 133, вып. 3. С. 303–307. <https://doi.org/10.61011/OS.2025.03.60248.15-25>
30. Smolyanskaya O. A., Chernomyrdin N. V., Konovko A. A., Zaytsev K. I., Ozheredov I. A., Cherkasova O. P., Nazarov M. M., Guillet J.-P., Kozlov S. A., Kistenev Yu. V., Coutaz J.-L., Mounaix P., Vaks V. L., Son J.-H., Cheon H., Wallace V. P., Feldman Yu., Popov I., Yaroslavsky A. N., Shkurinov A. P., Tuchin V. V. Terahertz biophotonics as a tool for studies of dielectric and spectral properties of biological tissues and liquids // *Progress in Quantum Electronics*. 2018. Vol. 62. P. 1–17. <https://doi.org/10.1016/j.pquantelec.2018.10.001>
31. Гибин И. С., Котляр П. В. Приёмники излучения терагерцового диапазона (обзор) // *Успехи прикладной физики*. 2018. Т. 6, № 2. С. 117–129. EDN: UOIVWF
32. 6G: *The Next Horizon. From Connected People and Things to Connected Intelligence* / eds. Tong W., Zhu P. Cambridge : Cambridge University Press, 2021. XVI+474 p. <https://doi.org/10.1017/9781108989817>
33. Burdanova M. G., Katyba G. M., Kashtiban R., Komandin G. A., Butler-Caddle E., Staniforth M., Mkrtchyan A. A., Krasnikov D. V., Gladush Y. G., Sloan J., Nasibulin A. G., Lloyd-Hughes J. Ultrafast, high modulation depth terahertz modulators based on carbon nanotube thin films // *Carbon*. 2020. Vol. 4. P. 1–6. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.11.008>
34. Симоненко Г. В. Жидкокристаллический модулятор на базе п-ячейки для ТГц-измерений // *Фотоника*. 2025. Т. 19, вып. 5. С. 19–24. <https://doi.org/10.22184/1993-7296.FRos.2025.19.5.378.388>

References

1. Zhou Le, Zhong T., Liu Yu., Yu T., Neyts K., Luo Zh., Wang H., Sun Ji., Zhou Ji, Shen Ya. When Structured Light Encounters Liquid. *Adv. Funct. Mater.*, 2024, vol. 34, art. 2404614. <https://doi.org/10.1002/adfm.202404614>
2. Wang L., Wang Ya., Zong G., Hu W., Lu Ya. Liquid crystal based tunable terahertz metadevices. *J. of Materials*, 2025, vol. 11, no. 1, pp. 10–16. <https://doi.org/10.1016/j.jmat.2024.04.012>
3. Harter T., Fuellner C., Kemal J. N., Ummethala S., Steinmann J. L., Brosi M., Hesler J. L., Bruendermann E., Mueller A. S., Freude W., Randel S., Koos C. Generalized Kramers-Kronig receiver for coherent terahertz communications. *Nature Photonics*, 2020, vol. 14, no. 10, pp. 601–606. <https://doi.org/10.1038/s41566-020-0675-0>
4. Luomahaara J., Sipola H., Gronberg L., Mayra A., Aikio M., Timofeev A., Tappura K., Rautiainen A., Tamminen A., Vesterinen V., Leivo M., Gao F., Vasama H., Luukanen A., Hassel J. A passive, fully staring THz video camera based on kinetic inductance bolometer arrays. *IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol.*, 2020, vol. 11, iss. 1, pp. 101–108. <https://doi.org/10.1109/TTHZ.2020.3029949>
5. Mu T., Ye Y., Dai Z., Zhao R., Yang M., Ren X. Silver nanoparticles-integrated terahertz metasurface for enhancing sensor sensitivity. *Optics Express*, 2022, vol. 30, iss. 23, pp. 41101–41109. <https://doi.org/10.1364/OE.472520>
6. Lin Q. W., Wong H., Huitema L., Crunteanu A. Coding metasurfaces with reconfiguration capabilities based on optical activation of phase-change materials for terahertz beam manipulations. *Adv. Opt. Mater.*, 2022, vol. 10, no. 1, art. 2101699. <https://doi.org/10.1002/adom.202101699>
7. Mittleman D. M. Twenty years of terahertz imaging. *Opt. Express*, 2018, vol. 26, iss. 8, pp. 9417–9431. <https://doi.org/10.1364/OE.26.009417>
8. Sun Q. S., He Y. Z., Liu K., Fan S. T., Parrott E. P. J., Pickwell-MacPherson E. Recent advances in terahertz technology for biomedical applications. *Quant. Imag. Med. Surg.*, 2017, vol. 7, no. 3, pp. 345–355. <https://doi.org/10.21037/qims.2017.06.02>
9. Alonso-del Pino M., Jung-Kubiak C., Reck T., Lombart N., Chattopadhyay G. Beam scanning of silicon lens antennas using integrated piezomotors at submillimeter wavelengths. *IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol.*, 2019, vol. 9, iss. 1, pp. 47–54. <https://doi.org/10.1109/TTHZ.2018.2881930>



10. Yang Y., Gurbuz O. D., Rebeiz G. M. An eight-element 370–410-GHz phased-array transmitter in 45-nm CMOS SOI with PeakEIRP of 8–8.5 dBm. *IEEE Trans. Microwave Theory Technol.*, 2016, vol. 64, iss. 12, pp. 4241–4249. <https://doi.org/10.1109/TMTT.2016.2613850>
11. Niu T., Withayachumnankul W., Ung B. S. Y., Menekse H., Bhaskaran M., Sriram S., Fumeaux C. Experimental demonstration of reflectarray antennas at terahertz frequencies. *Opt. Express*, 2013, vol. 21, iss. 3, pp. 2875–2889. <https://doi.org/10.1364/OE.21.002875>
12. Fu X., Yang F., Liu C., Wu X., Cui T. J. Terahertz beam steering technologies: From phased arrays to field-programmable metasurfaces. *Adv. Opt. Mater.*, 2020, vol. 8, no. 3, art. 1900628. <https://doi.org/10.1002/adom.201900628>
13. Oh-E M., Zheng D. Reversibly switching liquid crystals between three orthogonal orientation states for use in rapid-response THz phase shifters. *Opt. Express*, 2023, vol. 31, pp. 8632–8640. <https://doi.org/10.1364/OE.484171>
14. Ji Y., Jiang X., Fan F., Zhao H., Cheng J., Wang X., Chang S. Active terahertz beam deflection based on a phase gradient metasurface with liquid crystal-enhanced cavity mode conversion. *Opt. Express*, 2023, vol. 31, pp. 1269–1281. <https://doi.org/10.1364/OE.479856>
15. Belyaev V. Liquid-crystal based devices for terahertz radiation modulation. *Elektronika: nauka, tekhnologiya, biznes* [Electronics: Science, Technology, Business], 2020, no. 5, pp. 96–98. <https://doi.org/10.22184/1992-4178.2020.196.5.96.98> (in Russian).
16. Simonenko G. V., Mulamakhavsh A. F. A. Modulation of terahertz radiation using liquid crystal π -cells. *Applied Physics*, 2024, no. 3, pp. 13–19. <https://doi.org/10.51368/1996-0948-2024-3-13-19> (in Russian).
17. He Z., Gou F., Chen R., Yin K., Zhan T., Wu S.-T. Liquid crystal beam steering devices: Principles, recent advances, and future developments. *Crystals*, 2019, vol. 9, iss. 6, pp. 292–300. <https://doi.org/10.3390/cryst9060292>
18. Simonenko G. V. *Komp'yuternoe modelirovaniye kharakteristik bystrodeistviyushchikh klassicheskikh modulyatorov na osnove zhidkikh kristallov* [Computer simulation of characteristics of high-speed classical modulators based on liquid crystals]. Saratov, Saratov State University Publ., 2018. 136 p. (in Russian).
19. Yakovlev D. A., Chigrinov V. G., Kwok H. S. *Modeling and optimization of LCD optical performance*. Chichester, Wiley, 2015. XXIII+554 p. <https://doi.org/10.1002/9781118706749>
20. Mulamakhavsh A. F. A., Simonenko G. V. Optical characteristics of liquid crystal cells in the terahertz range. *Problems of Optical Physics and Biophotonics. SFM-2024*. Simonenko G. V., Tuchin V. V., eds. Saratov, Izdatelstvo Saratovskiy Istochnik, 2024. Pp. 71–79. <https://doi.org/10.24412/cl-37275-2024-1-71-79> (in Russian).
21. Azzam R. M. A., Bashara N. M. *Ellipsometry and polarized light*. Amsterdam, North Holland, 1977. XVII+529 p.
22. Mulamahawsh Anfal Fadhil Ahmed, Simonenko G. V. Dependence of the electromagnetic radiation transmission coefficient of liquid crystal π -cells in the terahertz range. *J. of Optics and Photonics Research (online first)*, 2025. 6 p. Available at: <https://ojs.bonviewpress.com/index.php/JOPR/article/view/5210/1402> (accessed September 26, 2025). <https://doi.org/10.47852/bonviewJOPR52025210>
23. Chigrinov V. G., Simonenko G. V., Yakovlev D. A., Podjachev Yu. B. The optimization of LCD electrooptical behavior using MOUSE – LCD software. *Mol. Cryst. Liq. Cryst. Sc. Techn. Section A. Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, 2000, vol. 351, iss. 1, pp. 17–25. <https://doi.org/10.1080/10587250008023248>
24. Park H., Parrott E. P. J., Fan Fan, Lim M., Han H., Chigrinov V. G., Pickwell-MacPherson E. Evaluating liquid crystal properties for use in terahertz devices. *Opt. Express*, 2012, vol. 20, iss. 11, pp. 11899–11905. <https://doi.org/10.1364/OE.20.011899>
25. Li X., Tan N., Pivnenko M., Sibik J., Zeitler J. A., Chu D. High-birefringence nematic liquid crystal for broadband THz applications. *Liquid Crystal*, 2016, vol. 43, no. 7, pp. 955–962. <https://doi.org/10.1080/02678292.2016.1153732>
26. Kurchatkin S. P. *Poverkhnostnye yavleniya i struktura termotropnykh zhidkikh kristallov v kapillyarnykh ob'yemakh*. Dis. d-ra khim. nauk [Surface phenomena and structure of thermotropic liquid crystals in capillary volumes. Dr. Diss. (Chem.)]. Saratov, 2001. 290 p. (in Russian).
27. Sukharier A. S. *Zhidkokristallicheskie indicatory* [Liquid crystal indicators]. Moscow, Radio i svyaz', 1991. 256 p. (in Russian).
28. Born M., Wolf E. *Principles of optics: Electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*. 7th (expanded) edition. Cambridge, Cambridge University Press, 1999. 985 p.
29. Radivon A. V., Paukov M. I., Katyba G. M., Raginov N. I., Chernykh A. V., Ezersky A. S., Tsiplakova E. G., Rakov I. I., Arsenin A. V., Spektor I. E., Zaitsev K. I., Krasnikov D. V., Petrov N. V., Nasibulin A. G., Volkov V. A., Burdanova M. G. Spatial modulation of terahertz radiation using optical vortex generators based on thin films of single-walled carbon nanotubes. *Opt. and Spectr.*, 2025, vol. 133, iss. 3, pp. 303–307. <https://doi.org/10.61011/OS.2025.03.60248.15-25>
30. Smolyanskaya O. A., Chernomyrdin N. V., Konovko A. A., Zaytsev K. I., Ozheredov I. A., Cherkasova O. P., Nazarov M. M., Guillet J.-P., Kozlov S. A., Kistenev Yu. V., Coutaz J.-L., Mounaix P., Vaks V. L., Son J.-H., Cheon H., Wallace V. P., Feldman Yu., Popov I., Yaroslavsky A. N., Shkurinov A. P., Tuchin V. V. Terahertz biophotonics as a tool for studies of dielectric and spectral properties of biological tissues and liquids. *Progress in Quantum Electronics*, 2018, vol. 62, pp. 1–17. <https://doi.org/10.1016/j.pquantelec.2018.10.001>
31. Gibin I. S., Kotlyar P. V. Terahertz radiation detectors. *Applied Physics*, 2018, vol. 6, no. 2, pp. 117–129. EDN: UOIVWF



32. Tong W., Zhu P., eds. *6G: The Next Horizon. From Connected People and Things to Connected Intelligence*. Cambridge, Cambridge University Press, 2021. XVI+474 p. <https://doi.org/10.1017/9781108989817>
33. Burdanova M. G., Katyba G. M., Kashtiban R., Komandin G. A., Butler-Caddle E., Staniforth M., Mkrtchyan A. A., Krasnikov D. V., Gladush Y. G., Sloan J., Nasibulin A. G., Lloyd-Hughes J. Ultrafast, high modulation depth terahertz modulators based on carbon nanotube thin films. *Carbon*, 2021, vol. 173, pp. 243–252. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.11.008>
34. Simonenko G. V. Liquid Crystal Modulator Based on a π -Cell for THz Measurements. *Photonics*, 2025, vol. 19, iss. 5, pp. 19–24. <https://doi.org/10.22184/1993-7296.FRos.2025.19.5.378.388>

Поступила в редакцию 11.07.2025; одобрена после рецензирования 05.09.2025;
принята к публикации 10.09.2025; опубликована 28.11.2025

The article was submitted 11.07.2025; approved after reviewing 05.09.2025;
accepted for publication 10.09.2025; published 28.11.2025



БИОФИЗИКА И МЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 449–459
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 449–459
<https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-449-459>, EDN: VRTKVY

Научная статья
УДК 53.097

Сравнение крупнозернистой и полноатомной систем «мембрана-растворитель» как моделей мемконденсатора при воздействии переменного электрического поля

И. И. Злочевский[✉], Д. В. Завьялов

Волгоградский государственный технический университет, Россия, 400005, г. Волгоград, проспект имени В. И. Ленина, д. 28

Злочевский Илья Игоревич, аспирант кафедры физики, ilya_zl98@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0002-9094-7830>, AuthorID: 1240656

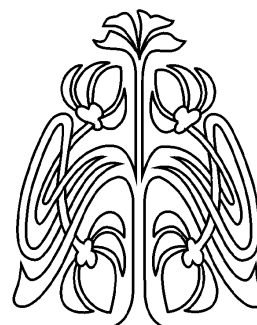
Завьялов Дмитрий Викторович, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физики, sinegordon@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-9497-9613>, AuthorID: 34548

Аннотация. Целью исследования является сравнение крупнозернистой и полноатомной систем «мембрана-растворитель» как моделей мемконденсатора при воздействии переменного электрического поля. Исследуемая система состояла из липидной мембраны, погруженной в водный раствор KCl. Две количественно схожие системы состояли из 512 молекул липида типа дипальмитоилфосфатидилхолин (1,2-Dipalmitoyl-sn-Glycero-3-Phosphocholine), двух водных отсеков по 40 Å и 3 М соли. Моделирование молекулярной динамики было проведено с помощью пакета программ GROMACS. В работе было использовано два вида модельных силовых полей: полноатомное charmm36m и крупнозернистые martin22p, а также видоизмененное силовое поле v2.2refPOL+refION. К системам было приложено переменное электрическое поле с напряженностью в 0.5, 1.0 и 1.5 В/нм с частотой 1 ГГц. В работе представлены методы регистрации изменения концентрации ионов в водных отсеках с учетом различия между использованными силовыми полями. На основании представленных результатов были сделаны выводы, что каждая система проявляет себя как конденсатор, где накопление заряда происходит на одной из сторон мембраны, а графики распределения частиц указывают на различный характер расположения положительных и отрицательных ионов. При оценке зависимости суммарного заряда от значения напряженности поля, была выявлена нелинейная зависимость и существование эффекта гистерезиса. В связи с этим, представленные системы могут быть использованы для изучения мемемкостных свойств мембран.

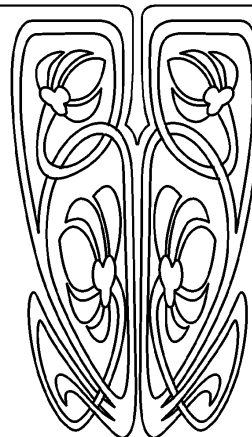
Ключевые слова: липидная мембрана, молекулярная динамика, полноатомная модель, крупнозернистая модель, переменное электрическое поле, конденсатор, мемконденсатор

Для цитирования: Злочевский И. И., Завьялов Д. В. Сравнение крупнозернистой и полноатомной систем «мембрана-растворитель» как моделей мемконденсатора при воздействии переменного электрического поля // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 449–459. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-449-459>, EDN: VRTKVY

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



**НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ**





Article

Comparison of coarse-grained and all-atom “membrane-solvent” systems as models of memcapacitors under alternating electric fieldI. I. Zlochevskiy[✉], D. V. Zav'yalov

Volgograd State Technical University, 28 V. I. Lenin Avenue, Volgograd 400005, Russia

Ilya I. Zlochevskiy, ilya_zl98@mail.ru, <https://orcid.org/0009-0002-9094-7830>, AuthorID: 1240656Dmitry V. Zav'yalov, sinegordon@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-9497-9613>, AuthorID: 34548

Abstract. Background and Objectives: The lipid membrane is one of the most important structures of a living cell, representing a barrier with selective permeability. Many biological processes are associated with changes in the concentration of positive and negative ions inside and outside the cell. In this regard, the membrane is more widely represented as an electric capacitor. In modern studies on the effect of an alternating field on biomolecular lipids, the existence of a nonlinear capacitance-voltage dependence is also mentioned, which makes the lipid membrane a promising candidate for the role of a memcapacitor. Since the use of practical membrane models is associated with their instability, the molecular dynamics method has become widespread. A similar memory effect was obtained in studies using a coarse-grained model. On all-atom systems, this effect is poorly represented in the literature. The all-atom model more fully describes the interaction of particles, so it would be relevant to compare the coarse-grained and all-atomic membrane-solvent system as models of a memcapacitor under the influence of an alternating electric field. **Materials and Methods:** The studied system consisted of a lipid membrane immersed in an aqueous KCl solution. Two quantitatively similar systems consisted of 512 lipid molecules, such as dipalmitoylphosphatidylcholine (1,2-Dipalmitoyl-sn-Glycero-3-Phosphocholine), two water compartments of 40 Å and 3 M salt. Two types of force fields were used in the work, a all-atom charmm36m, as well as coarse-grained force fields martini2p and a modified force field – v2.2refPOL+refION. An alternating electric field with a strength of 0.5, 1.0 and 1.5 V/nm with a frequency of 1 GHz was applied to the systems. Molecular dynamics simulations were performed using GROMACS. **Results:** Under the action of the field, each system has behaved as a “classical” capacitor, where oppositely charged particles have been accumulated on opposite sides of the membrane. The nature of the ion distribution is also similar for the studied systems, positive particles are able to penetrate into the membrane, located inside the hydrophilic structures, and the charge peaks of negative particles are outside the membrane. A significant difference between the all-atom and coarse-grained models is the numerical value of the accumulated charge. Based on the results obtained, we can also talk about the nonlinear dependence of the total charge value in relation to the field strength value and the existence of the hysteresis effect. **Conclusion:** In this regard, the presented systems can be used to study the memcapacitive properties.

Keywords: lipid membrane, molecular dynamics, all-atom model, coarse-grained model, alternating electric field, capacitor, memcapacitor

For citation: Zlochevskiy I. I., Zav'yalov D. V. Comparison of coarse-grained and all-atom “membrane-solvent” systems as models of memcapacitors under alternating electric field. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 449–459 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-449-459>, EDN: VRTKVY

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

Введение

Биологические мембраны представляют собой сложноупорядоченные липидные структуры, состоящие из различных типов липидных молекул. Липидные молекулы – амфифильные соединения, обладающие как гидрофобными, так и гидрофильными радикалами. С точки зрения электрофизиологии липидную мембрану можно представить как конденсатор, в котором роль пластин выполняют электролиты наружного и внутреннего растворов, контактирующие с погруженными в них гидрофильными головками, а неполярная область, образованная углеводородными остатками, выполняет функцию диэлектрического слоя [1].

Для изучения емкостных свойств биологических мембран было разработано множество экспериментальных методов, основанных на использовании биомолекулярных липидных мембран и воздействии на них переменного электрического поля [2–4]. В работах [3–6] отмечается

существование эффекта гистерезиса при оценке зависимости заряд – напряжение. Такой характер отклика на приложенное поле делает липидную мембрану перспективным кандидатом на роль мемконденсатора [7–9].

В последнее время одним из основных теоретических методов исследования электрофизических свойств биомембран стал метод молекулярной динамики. При исследовании липидных мембран этим методом существует возможность использовать два вида моделей силовых полей – полноатомную (AA, all-atom) и крупнозернистую (CG, coarse-grained) модели [10–12]. Силовые CG-поля основаны на обобщенном представлении нескольких атомов одной частицей. Такой подход позволяет проводить исследования больших систем при длительном времени моделирования, что было бы невозможно при использовании традиционных силовых AA-полей. Однако, использование CG-моделей сопряжено с ограничениями, связанными с неполным пред-



ставлением структурных деталей, и требует осторожности при количественной интерпретации результатов [13]. Так, например, при исследовании влияния электрического поля на липидные мембраны [14, 15] показано, что образование пор в AA- и CG-моделировании происходит по-разному: в полноатомных симуляциях поры формируются при меньших напряженностях поля (0.2–0.5 В/нм), тогда как в крупнозернистых моделях требуются более сильные воздействия (0.5–1.0 В/нм).

В работах [16–18] при использовании CG-молекулярной динамики обнаружено, что система «мембрана-растворитель» под действием переменного электрического поля проявляет свойства, характерные для мемконденсатора. С учетом вышесказанного относительно ограничений CG-моделей в части корректности учета воздействия электрического поля на мембрану представляется целесообразным проведение сравнительного анализа CG- и AA-моделей системы «мембрана-растворитель» для оценки их отклика на воздействие переменного электрического поля, а также для определения преимуществ и ограничений каждого типа моделей.

Использованные модели силовых полей

Для рассмотренных систем биомембран, количественно схожих между собой, были выбраны два вида моделей силовых полей – полноатомного charmm36m [19] и крупнозернистого martini2 (версия martini22p [20–22]), а также модели версии v2.2refPOL+refION с видоизмененными одновалентными ионами K^+ и Cl^- [23, 24].

Стоит сразу уточнить причины выбора данных силовых полей, несмотря на существование более поздней версии силового поля Martini – Martini3 [25]. Эта версия силового поля предоставляется с неполярной моделью воды, что может быть критичным фактором при моделировании процесса распространения ионов в водной среде. Использование различных версий силового поля Martini2 обусловлено различным описанием ионов. В более ранней версии martini22p авторы указывают на недостаток моделей представленных ионов, у которых отсутствуют дальнедействующие электростатические взаимодействия. Такой способ представления моновалентных ионов встречается и в других силовых CG-полях, например rSPICA [26]. силовое AA-поле Charmm было выбрано как одно из распространенных силовых полей для моделирования липидных мембран [27].

Параметры молекулярной динамики

Каждая анализируемая система состояла из липидной мембраны, содержащей 512 молекул фосфатидилхолина (DPPC) (рис. 1), равномерно распределенных между двумя слоями (по 256 липидов в каждом монослое). Мембрана была

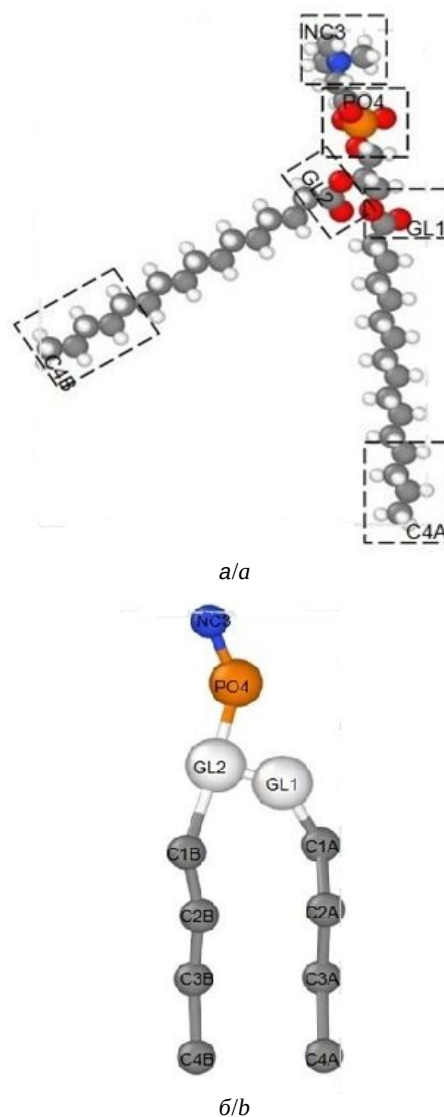


Рис. 1. Молекула DPPC в полноатомном (а) и крупнозернистом (б) представлениях. Атомы углерода показаны серым цветом, водорода – белым, кислорода – красным, фосфора – оранжевым, азота – синим. Пунктирные черные линии схематично обозначают принцип объединения атомов при переходе к крупнозернистому представлению (цвет онлайн)

Fig. 1. The DPPC molecule in all-atom (a) and coarse-grained (b) representations. Carbon atoms are shown in gray, hydrogen in white, oxygen in red, phosphorus in orange, and nitrogen in blue. The dashed black lines schematically indicate the particle grouping approach used for the CG-representation (color online)



окружена водными отсеками толщиной 40 Å с каждой стороны, в которых содержались ионы K^+ и Cl^- с концентрацией 3 М. Выбранный размер системы ($X \times Y \times Z$ нм) с указанным количеством липидов обеспечивает: достаточную площадь мембраны ($\sim 64 \text{ nm}^2$) для минимизации артефактов периодических граничных условий, оптимальное соотношение между вычислительной нагрузкой и репрезентативностью системы, эффективное время моделирования при сохранении физически значимых характеристик мембраны, а также предотвращение нефизических взаимодействий между периодическими образами липидных молекул.

Для CG-систем ионы K^+ были представлены по аналогии как Na^+ [28]. Для систем с использованием силового поля charmm36m и классического martini22p был использован генератор входных данных CHARMM-GUI [29], для версии v2.2refPOL+reflON ионы были заменены на модифицированные частицы в том же количестве. Изображения систем представлены на рис. 2.

Моделирование молекулярной динамики было проведено с помощью GROMACS (версия 2023.3). Предварительно для каждой системы была осуществлена минимизация энергии, уравнивание системы, моделирование без электрического поля и моделирование с приложенным переменным электрическим полем.

Минимизация энергии для каждой системы основывалась на алгоритме наискорейшего спуска. Уравнивание систем происходило

в два этапа: сначала в ансамбле с постоянным количеством частиц, объемом и температурой, а затем в ансамбле с постоянным количеством частиц, давлением и температурой. Для AA-систем при уравнивании были использованы термостат v-rescale и баростат c-rescale. Для CG-систем были использованы термостат v-rescale и баростат Berendsen. Термостат v-rescale обеспечивает правильное каноническое распределение для обоих типов систем. Баростат c-rescale для AA-моделей гарантирует корректное описание флуктуаций давления. Баростат Berendsen для CG-систем позволяет плавно достичь равновесного состояния без чрезмерных осцилляций. Увеличенные временные константы для CG-моделей компенсируют уменьшенное число степеней свободы. Такая стратегия уравнивания обеспечила стабильные начальные условия для последующего динамического моделирования при сохранении физически достоверных параметров системы. Температура была установлена 298.15 K.

При моделировании учитывалось, что к системе было приложено переменное электрическое поле:

$$E(t) = E_0 \cos[\omega(t - t_0)].$$

Расчеты велись для значений напряженности 0.05, 0.1, 0.15 В/нм и значения угловой частоты 0.006283 рад/пс, что соответствует периоду в 1 нс. Выбор таких параметров поля обусловлен необходимостью соблюдения баланса между

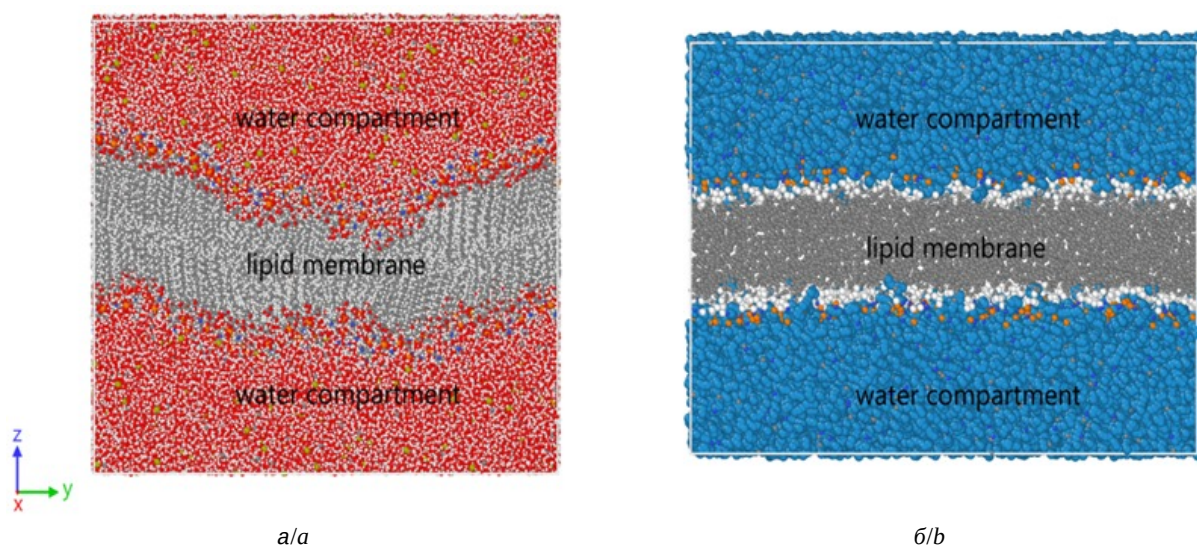


Рис. 2. AA-система (а) и CG-система (б) (цвет онлайн)

Fig. 2. AA-system (a) and CG-system (b) (color online)



эффективным воздействием на мембрану и сохранением ее структурной целостности в ходе моделирования. Выбранные значения напряженности охватывают диапазон от подпороговых величин (0.05 В/нм), вызывающих лишь незначительные изменения ориентации липидных диполей, до близких к критическим (0.15 В/нм), при которых наблюдаются начальные стадии перестройки бислоя без полного разрушения мембраны. Такой подход позволяет исследовать электроупругие свойства липидного бислоя в различных режимах воздействия. Для АА-систем подобные параметры электрического поля представляют особый интерес, так как находятся в пограничной области между слабыми воздействиями, вызывающими лишь поляризацию мембраны, и сильными полями, приводящими к необратимой электропорации.

Временной диапазон моделирования для каждой системы составил 50 нс: для АА-системы – с шагом в 2 фс (0.002 пс), для CG-системы – с шагом в 20 фс (0.02 пс). В выходной файл траектории записывались каждые 20 пс.

Анализ результатов и их обсуждение

Анализ результатов осуществлялся на основе регистрации изменения распределения ионов K^+ и Cl^- для каждой системы в разные моменты периода действия электрического поля.

Общий принцип расчета изменения положения ионов в водном отсеке заключается в разделении симуляционной коробки на определенное количество отсеков (слайсов), перпендикулярно направленным к оси z и, соответственно, параллельно расположению мембраны. Усредненный по нескольким периодам действия электрического поля суммарный заряд q в каждом из слоев рассчитывался по формуле:

$$|q| = \frac{\sum_{i=1}^N n_i \cdot Q}{N},$$

где n_i – количество частиц в данном отсеке, N – количество периодов, Q – заряд частицы. Регистрация осуществлялась в разные моменты времени периода действия электрического поля: $0, 0.25T, 0.5T, 0.75T, T$, где T – период поля.

Представленные результаты для CG-систем (рис. 3) демонстрируют предполагаемый эффект накопления разноименных зарядов вблизи гидрофильных головок на противоположных листах мембраны. На одной стороне липидной мембраны накапливались положительно заряженные ионы K^+ , на противоположной стороне – отрицательные ионы Cl^- . На стороне, где происходит накопление положительно заряженных зарядов, концентрация отрицательных зарядов падает, и наоборот.

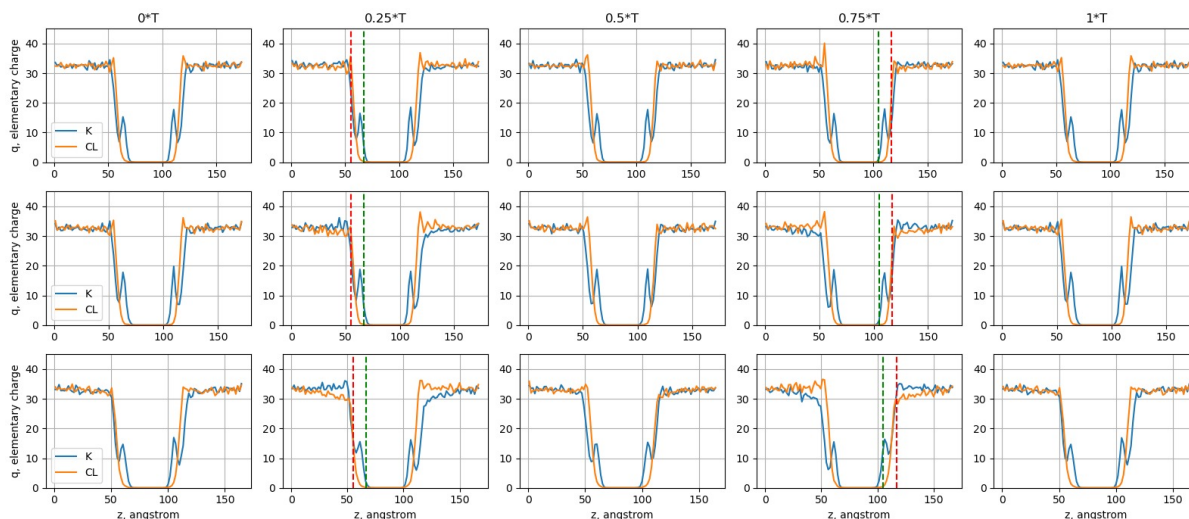


Рис. 3. Изменение распределения ионов K^+ и Cl^- для системы с использованием силового поля martini22p в разные моменты периода поля при напряженности 0.5 (верхний ряд), 0.1 (средний ряд) и 0.15 (нижний ряд) В/нм. Красной и зеленой пунктирной линией разделены два пика накопления катионов, между ними заключена «яма» с пониженной концентрацией (цвет онлайн)

Fig. 3. Changes in the distribution of K^+ and Cl^- ions for the system using the martini22p force field at different moments of the field period at a strength of 0.5, 0.1, 0.15 V/nm (upper, middle and lower rows, respectively); the red and green dotted lines separate two peaks of cation accumulation, with a “hole” with reduced concentration between them (color online)



Однако накопление зарядов K^+ и Cl^- , как можно наблюдать на графиках, имеет различный характер распределения. В отличие от Cl^- , который имеет один пик накопления заряда вблизи плоскости мембраны, K^+ способен накапливаться не только непосредственно на поверхности мембраны, но и проникать внутрь, до гидрофобных хвостов.

Независимо от момента периода действия электрического поля по всей площади наблюдается существование минимального количества заряда в данной области, который незначительно изменяется с течением времени. Однако в момент накопления заряда вблизи мембраны так называемая «яма» с пониженной концентрацией положительных ионов между двумя пиками становится менее выпуклой, тем самым стремясь к плавному переходу между зонами с повышенной концентрацией. Такая особенность распределения положительных ионов объясняет различие в максимальных значениях концентрации ионов вблизи мембраны на противоположных сторонах, где концентрация отрицательных ионов всегда оказывается больше, чем концентрация положительных ионов на противоположной стороне.

При увеличении напряженности поля наблюдается увеличение заряда вблизи мембраны, при максимальном значении в 0.15 В/нм количество разноименно заряженных частиц на противоположных листах достигает одинаковых значений, а «яма» все больше стремится к выравниванию. Представленное выше качественное описание по-

ведения системы с использованием силового поля *martini22p* также характерно и для использованного поля *v2.2refPOL+refION*.

В свою очередь, полученные графики распределения ионов для АА-системы (рис. 4), указывают на отсутствие накопления заряда именно вблизи мембраны, при этом характер распределения ионов искажается. Как было сказано выше, предполагалось, что данный результат связан с описанием ионов в CG-системе. Однако при использовании силового поля с модифицированными ионами были получены схожие результаты.

Так как факт упорядоченного движения ионов под действием электрического поля является как теоретически «ожидаемым», так и практически воссозданным в схожих исследованиях для различных процессов, было высказано предположение, что именно существенное различие между поведением АА- и CG-моделей липидной мембраны играет важную роль в моделировании исследуемого процесса. Использованный метод расчета не учитывает более сложную структуру АА-модели бислоя. Как отражено на рис. 5, где представлены профили двух мембран, даже в пиковые моменты значения поля 0.15 В/нм CG-модель не подвержена какому-либо виду деформации (рис. 5, б), поэтому при делении симуляционной коробки на слайсы, описанном выше, возникает четкое разделение между мембраной и растворителем.

В свою очередь, АА-представление мембраны (рис. 5, а), еще на этапе уравнивания

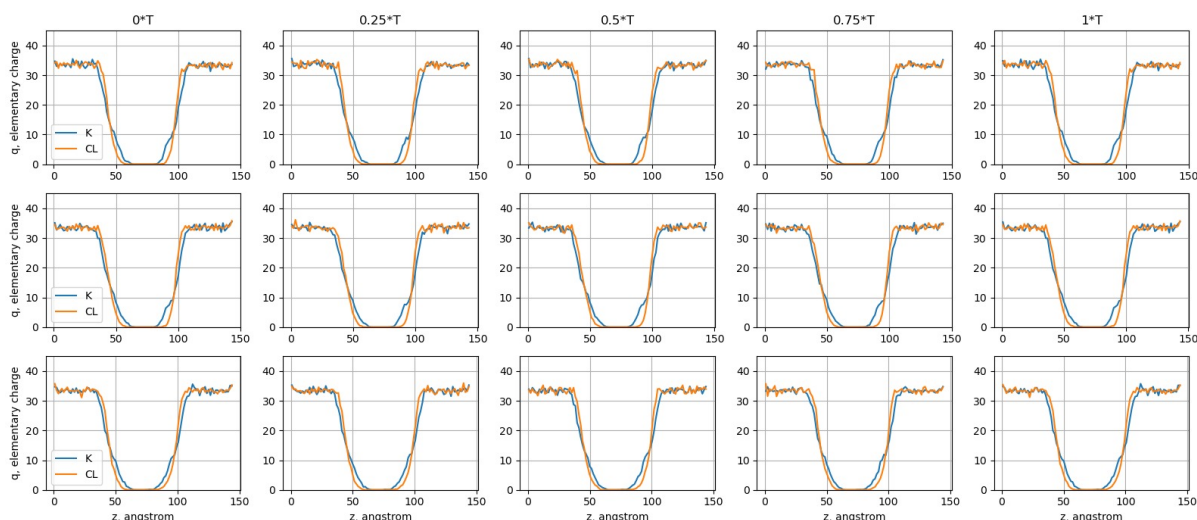


Рис. 4. Изменение распределения ионов K^+ и Cl^- для системы с использованием силового поля *charmm36m* в разные моменты периода поля при напряженности 0.5 (верхний ряд), 0.1 (средний ряд), 0.15 (нижний ряд) В/нм (цвет онлайн)

Fig. 4. Change in the distribution of K^+ and Cl^- ions for the system using the *charmm36m* force field at different moments of the field period at a strength of 0.5, 0.1, 0.15 V/nm, (upper, middle and lower row, respectively)

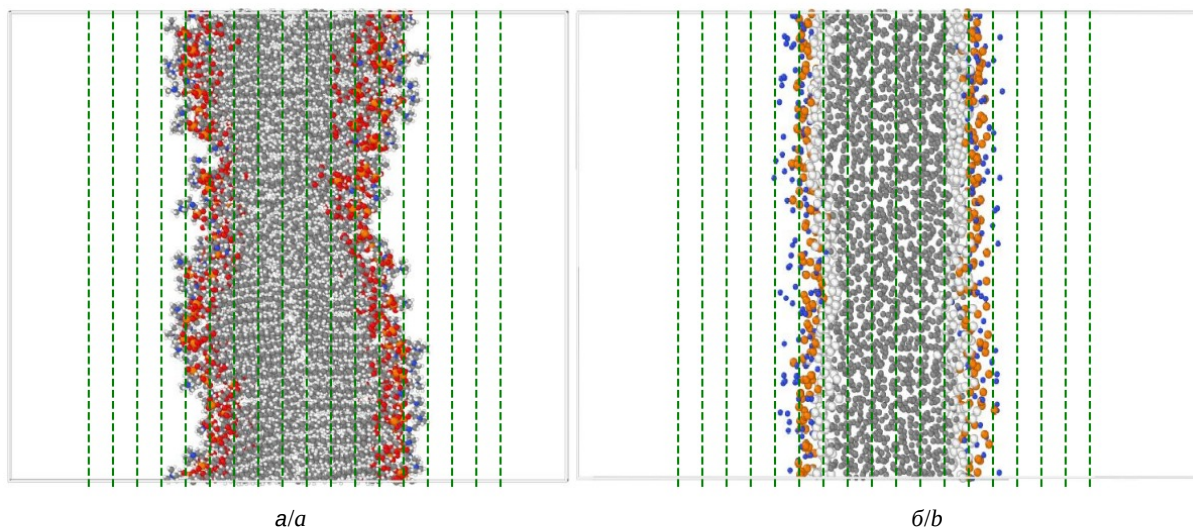


Рис. 5. Профиль AA- (а) и CG- (б) моделей мембраны; зелеными штрихованными линиями представлены слайсы, разделяющие симуляционную коробку на отсеки (цвет онлайн)

Fig. 5. Profile of the AA- (a) and CG- (b) membrane models, the green dashed lines represent slices dividing the simulation box into compartments (color online)

принимает более сложную структуру, которая способна меняться со временем. Такая неоднородность распределения мембраны по слайсам приводит к «размытию» картины распределения заряда (во всяком случае, вблизи мембраны). Такого эффекта можно избежать, уменьшая количество слайсов, тем самым увеличивая их площадь и заключая все гидрофильные головки в один из них. Однако такой подход не учитывает распределение зарядов вблизи мембраны и их особенности.

В связи с этим, был использован метод, схожий с методом радиального распределения (Radial Distribution Function, RDF) [30]. Предполагается, что частицы фосфора менее подвижны по сравнению с частицей азота и образуют плоскость мембраны, которая может изменяться со временем. Описание радиуса вокруг каждого атома дублирует данную плоскость мембраны на расстояние, равное указанному радиусу. Таким образом, система все также будет поделена на отсеки, однако они будут динамичны и будут изменяться вместе с изменениями мембраны, при этом изначально учитывать ее более сложную структуру. Количество частиц, заключенных в отсеке, описанном двумя соседними значениями радиуса, находилось по формуле:

$$n = \frac{\sum_{i=1}^N n_r - n_{r-1}}{N},$$

где n – количество частиц в данном отсеке, n_r – количество частиц, находящихся в области ради-

уса r , описанной вокруг частицы фосфора, N – количество периодов. Определение количества ионов в радиусе r было ограничено половиной симуляционной коробки во избежание захвата ионов на противоположной стороне, а при перекрывании дублирующие частицы не учитывались. Значение r были взяты от 1 до 50 Å с увеличением в 1 Å.

Результаты для CG- и AA-моделей представлены на рис. 6, 7. На представленных графиках для CG-модели (рис. 6), аналогично выше представленным результатам (см. рис. 3), наблюдается накопление заряда вблизи мембраны в разные моменты периода поля. Однако стоит отметить, что картина распределения ионов при использовании данного метода может изменяться при других значениях шага увеличения радиуса r . Например, на рис. 6 (нижний ряд) характер распределения катионов отличается от описанного ранее (см. рис. 3); схожей картины можно добиться, уменьшив шаг радиуса.

Результаты для AA-моделей (рис. 7) указывают на существование пика заряда вблизи мембраны и на схожий характер распределения K^+ и Cl^- , где положительные ионы могут проникать внутрь до гидрофобных хвостов. Однако из-за небольшого количества перехода частиц из одного отсека в другой судить о какой-то связи с действием поля невозможно. Это может быть связано со способностью мембраны изменять свои параметры – толщину и площадь. Изменение толщины и (как следствие) площади,

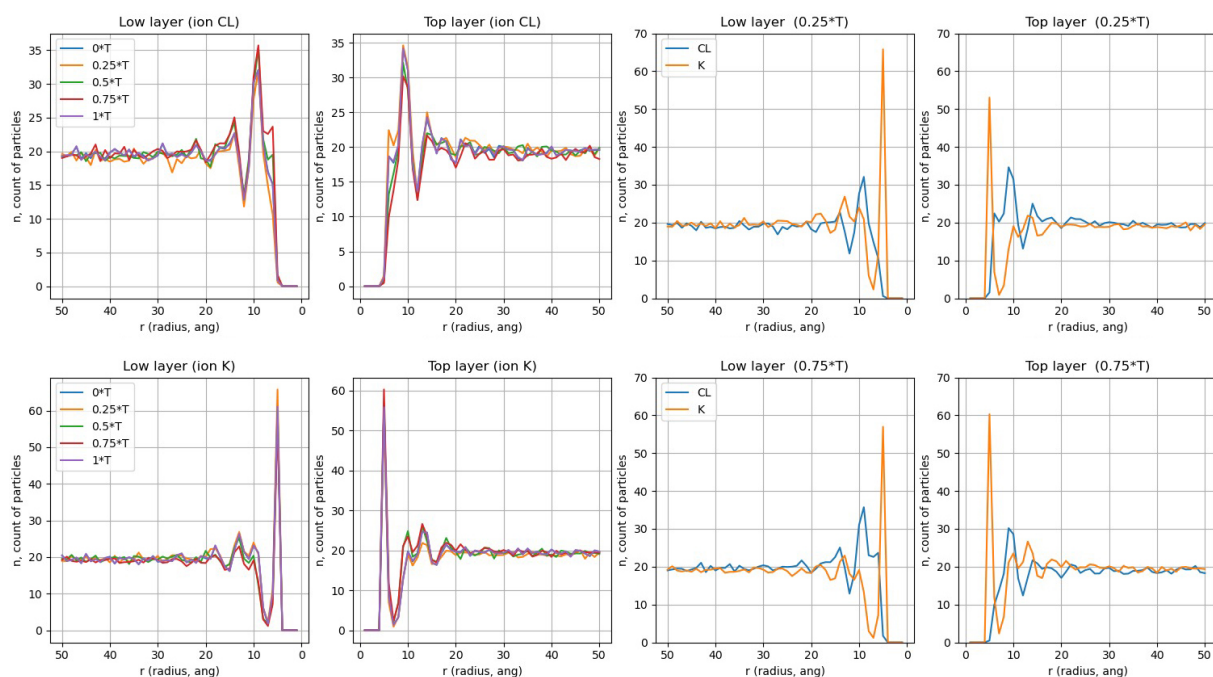


Рис. 6. Изменение распределения ионов K^+ и Cl^- при использовании силового поля martini22p, в отсеке, описанном двумя соседними значениями r для разных моментов периода поля при напряженности 0.1 В/нм (цвет онлайн)

Fig. 6. Change in the distribution of K^+ and Cl^- ions, using the martini22p force field, in the compartment described by two adjacent r values for different moments of the field period at a strength of 0.1 V/nm (color online)

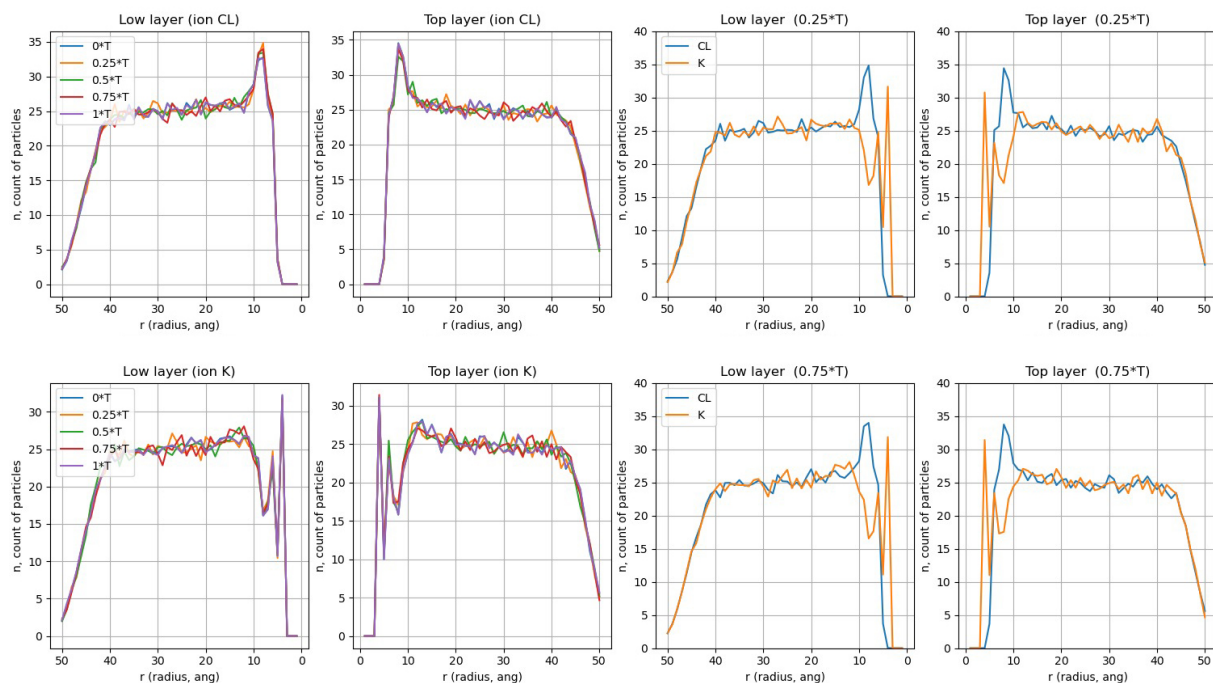


Рис. 7. Изменение распределения ионов K^+ и Cl^- при использовании силового поля charmm36m в отсеке, описанном двумя соседними значениями r для разных моментов периода поля при напряженности 0.1 В/нм

Fig. 7. Change in the distribution of K^+ and Cl^- ions, using the charmm36m force field, in the compartment described by two adjacent r values for different moments of the field period at a strength of 0.1 V/nm



может вовлекать или наоборот вытеснять растворитель, что приводит к перераспределению зарядов, а не к накоплению, как в случае CG-мембраны, которая мало подвержена деформации.

Хотя схожей ситуации с накоплением заряда и изменений его вблизи мембраны в CG-системе не наблюдается, результаты указывают на явное изменение положения частиц под действием электрического поля. В связи с этим целесообразно рассматривать область накопления заряда не вблизи мембраны, а во всем водном отсеке с одной стороны бислоя, где изменение количества частиц будет связано с переходом ионов из одного отсека в другой через периодические границы (периодические граничные условия).

На рис. 8 представлены изменения значений суммарного заряда ионов относительно среднего значения площади симуляционной коробки в водном отсеке. Для системы с использованием силового поля *martini22p* изменение значения суммарного заряда имеет синусоидальный характер. Для значений напряженности поля 0.05 и 0.15 V/nm схожая картина сохраняется с изменением амплитуды исследуемой величины. Для CG-модели также характерна малая зависимость результатов от количества периодов, на основе которых осуществляется усреднение значений.

Для AA-системы количество частиц, осуществляющих переход из одного отсека в другой,

значительно меньше чем для CG-системы. Однако представленные результаты (рис. 8, а), указывают на упорядоченное движение заряда под действием поля, тем самым изменяя суммарный заряд в водном отсеке.

На рис. 9 представлен график зависимости суммарного заряда от напряженности поля. Несмотря на незначительное изменение заряда с каждой стороны мембраны, представленные результаты указывают на существование зависимости изменения количества частиц в водных отсеках при увеличении напряженности поля. Полученные данные, усредненные по 50 периодам действия поля, демонстрируют нелинейную зависимость, стремящуюся к замкнутому эллипсу, который был получен после аппроксимации методом наименьших квадратов. В связи с этим можно утверждать о существовании эффекта гистерезиса, проявляющегося в исследуемой системе.

Выводы

Проведенный сравнительный анализ CG- и AA-моделей системы «мембрана-растворитель» позволил количественно оценить их отклик на воздействие переменного электрического поля и выявить ключевые различия в результатах, получаемых в рамках этих подходов к моделированию. Экспериментально подтверждено, что

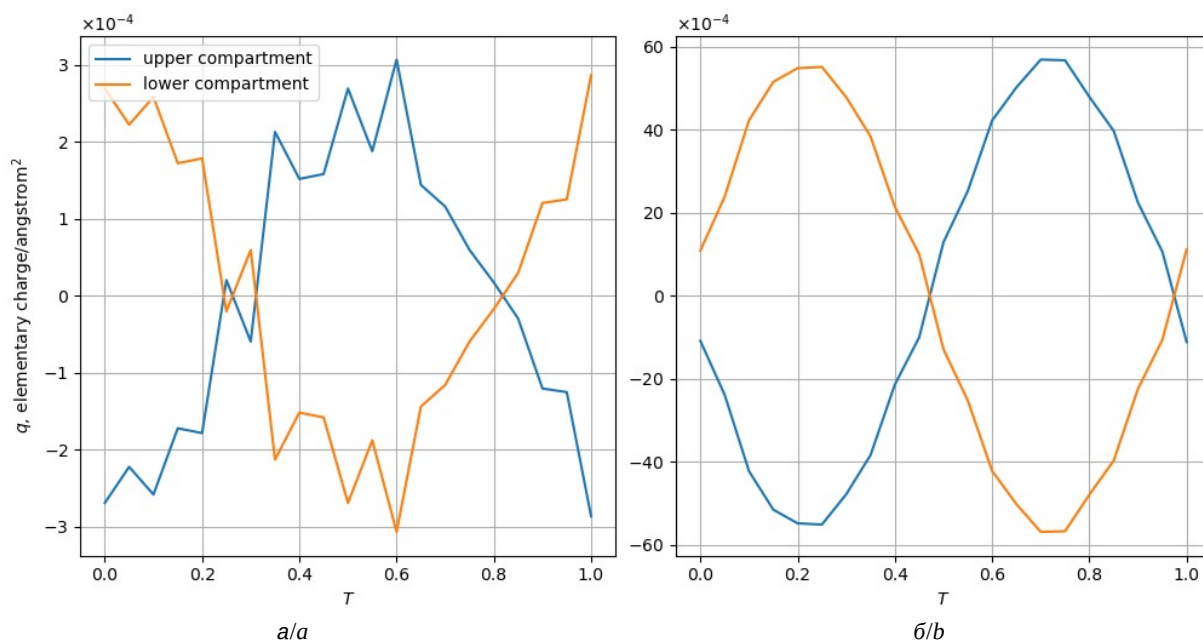


Рис. 8. Изменение суммарного заряда ионов K^+ и Cl^- для силового поля *charmm36m* (а) и *martini22p* (б) при напряженности 0.1 В/нм (цвет онлайн)

Fig. 8. Change in the total charge of K^+ and Cl^- ions for the *charmm36m* (a) and *martini22p* (b) force fields, at a strength of 0.1 V/nm (color online)

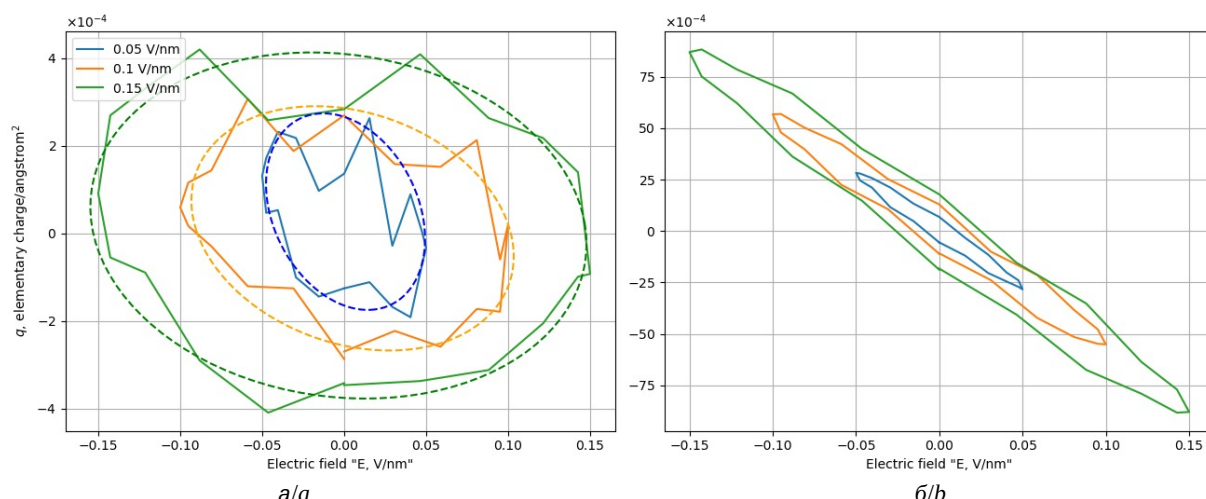


Рис. 9. Зависимость суммарного заряда от напряженности поля (для значений 0.05 (синий цвет), 0.1 (оранжевый цвет) и 0.15 (зеленый цвет) В/нм) с использованием силовых полей charmm36m (а) и martini22p (б). Сплошной линией соединены точки, полученные в численном эксперименте; пунктирной линией того же цвета показана аппроксимирующая кривая, построенная методом наименьших квадратов (цвет онлайн)

Fig. 9. Dependence of the total charge on the field strength for systems using the charmm36m force field (a) and martini22p (b). The solid line shows the experimental data: 0.05 (blue), 0.1 (orange) и 0.15 (green) V/nm, the dotted line of the same color shows the values after approximation by the least squares method (color online)

обе системы демонстрируют свойства мемконденсатора, проявляя классическое конденсаторное поведение с пространственным разделением зарядов, сходный характер распределения ионов у поверхности мембраны, а также нелинейную зависимость накопленного заряда от напряженности поля и наличие гистерезисных эффектов.

Критическое различие между моделями обнаружено в абсолютных значениях накопленного заряда, что обусловлено упрощенным описанием электростатических взаимодействий в CG-подходе. Тем не менее, качественное соответствие динамических характеристик подтверждает адекватность крупнозернистых моделей для изучения емкостных свойств мембран.

Список литературы / References

1. El-Beyrouthy J., Freeman E. Characterizing the structure and interactions of model lipid membranes using electrophysiology. *Membranes*, 2021, vol. 11, iss. 5, art. 319. <https://doi.org/10.3390/membranes11050319>
2. Taylor G. J., Venkatesan G. A., Collier C. P., Sarles S. A. Direct in situ measurement of specific capacitance, monolayer tension, and bilayer tension in a droplet interface bilayer. *Soft Matter*, 2015, vol. 11, iss. 38, pp. 7592–7605. <https://doi.org/10.1039/c5sm01005e>
3. El-Beyrouthy J., Makhoul-Mansour M. M., Taylor G., Sarles S. A., Freeman E. C. A new approach for investigating the response of lipid membranes to electrocompression by coupling droplet mechanics and membrane biophysics. *J. of the Royal Society Interface*,

2019, vol. 16, iss. 161, art. 20190652. <https://doi.org/10.1098/rsif.2019.0652>

4. Gross L. C. M., Heron J. R., Baca S. C., Wallace M. I. Determining membrane capacitance by dynamic control of droplet interface bilayer area. *Langmuir*, 2011, vol. 27, iss. 23, pp. 14335–14342. <https://doi.org/10.1021/la203081v>
5. Najem J. S., Hasan M. S., Williams R. S., Weiss R. J., Rose G. S., Taylor G. J., Sarles S. A., Collier C. P. Dynamical nonlinear memory capacitance in biomimetic membranes. *Nature Communications*, 2019, vol. 10, iss. 1, art. 3239. <https://doi.org/10.1038/s41467-019-11223-8>
6. Smirnova E. Y., Anosov A. A. Bilayer lipid membrane as memcapacitance: Capacitance-voltage pinched hysteresis and negative insertion conductance. *Membranes*, 2023, vol. 13, iss. 1, art. 97. <https://doi.org/10.3390/membranes13010097>
7. Di Ventra M., Pershin Y. V. On the physical properties of memristive, memcapacitive and meminductive systems. *Nanotechnology*, 2013, vol. 24, no. 25, art. 255201. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/24/25/255201>
8. Yin Z. Y., Tian H., Chen G. H., Chua L. O. What are memristor, memcapacitor and meminductor? *IEEE Transactions on Circuits and Systems II: Express Briefs*, 2015, vol. 62, iss. 4, pp. 402–406. <https://doi.org/10.1109/TCSII.2014.2387653>
9. Pershin Y. V., Di Ventra M. Memcapacitive neural networks. *Electronics Letters*, 2014, vol. 50, iss. 3, pp. 141–143. <https://doi.org/10.1049/el.2013.2463>
10. Hsieh M. K., Yu Y., Klauda J. B. All-atom modeling of complex cellular membranes. *Langmuir*, 2021, vol. 38, iss. 1, pp. 3–17. <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.1c02084>



11. Sharma P., Desikan R., Ayappa K. G. Evaluating coarse-grained MARTINI force-fields for capturing the ripple phase of lipid membranes. *J. Phys. Chem. B*, 2021, vol. 125, iss. 24, pp. 6587–6599. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c03277>
12. Guo J., Bao Y., Li M., Li S., Xi L., Xin P., Wu L., Liu H., Mu Y. Application of computational approaches in biomembranes: From structure to function. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 2023, vol. 13, iss. 6, art. e1679. <https://doi.org/10.1002/wcms.1679>
13. Periole X., Marrink S. J. The Martini coarse-grained force field. *Biomolecular Simulations: Methods and Protocols*, 2012, pp. 533–565. https://doi.org/10.1007/978-1-62703-017-5_20
14. Polak A., Bonhenry D., Dehez F., Kramar P., Miklavčič D., Tarek M. On the electroporation thresholds of lipid bilayers: Molecular dynamics simulation investigations. *J. of Membrane Biology*, 2013, vol. 246, no. 11, pp. 843–850. <https://doi.org/10.1007/s00232-013-9570-7>
15. S. A. Kirsch, R. A. Böckmann. Membrane pore formation in atomistic and coarse-grained simulations. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Biomembranes*, 2016, vol. 1858, no. 10, pp. 2266–2277. <https://doi.org/10.1016/j.bbamem.2015.12.031>
16. Lavrentovich M. O., Carrillo J. M. Y., Collier C. P., Katsaras J., Bolmatov D. Curvature memory in electrically stimulated lipid membranes. *Langmuir*, 2025, vol. 41, iss. 5, pp. 3157–3165. <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.4c03799>
17. Scott H. L., Bolmatov D., Premadasa U. I., Doughty B., Carrillo J. M. Y., Sacci R. L., Lavrentovich M., Collier C. P. Cations control lipid bilayer memcapacitance associated with long-term potentiation. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2023, vol. 15, iss. 37, pp. 44533–44540. <https://doi.org/10.1021/acsami.3c09056>
18. Zlochevskiy I. I., Zav'yalov D. V. The effect of an alternating electric field on the DPPC membrane system in an aqueous NaCl solution. *Math. Phys. Comp. Sim.*, 2023, vol. 26, no. 3, pp. 105–114. <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2023.3.8>
19. Klauda J. B., Venable R. M., Freitas J. A., O'Connor J. W., Tobias D. J., Mondragon-Ramirez C., Vorobyov I., MacKerell Jr. A. D., Pastor R. W. Update of the CHARMM all-atom additive force field for lipids: Validation on six lipid types. *J. Phys. Chem. B*, 2010, vol. 114, iss. 23, pp. 7830–7843. <https://doi.org/10.1021/jp101759q>
20. Marrink S. J., De Vries A. H., Mark A. E. Coarse grained model for semiquantitative lipid simulations. *J. Phys. Chem. B*, 2004, vol. 108, iss. 2, pp. 750–760. <https://doi.org/10.1021/jp036508g>
21. Marrink S. J., Risselada H. J., Yefimov S., Tieleman D. P., de Vries A. H. The MARTINI force field: Coarse grained model for biomolecular simulations. *J. Phys. Chem. B*, 2007, vol. 111, iss. 27, pp. 7812–7824. <https://doi.org/10.1021/jp071097f>
22. Wassenaar T. A., Ingolfsson H. I., Bockmann R. A., Tieleman D. P., Marrink S. J. Computational lipidomics with insane: A versatile tool for generating custom membranes for molecular simulations. *J. of Chemical Theory and Computation*, 2015, vol. 11, iss. 5, pp. 2144–2155. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00209>
23. Michalowsky J., Michalowsky J., Schafer L. V., Holm C., Smiatek J. A refined polarizable water model for the coarse-grained MARTINI force field with long-range electrostatic interactions. *J. Chem. Phys.*, 2017, vol. 146, iss. 5, art. 054501. <https://doi.org/10.1063/1.4974833>
24. Michalowsky J., Zeman J., Holm C., Smiatek J. A polarizable MARTINI model for monovalent ions in aqueous solution. *J. Chem. Phys.*, 2018, vol. 149, iss. 16, art. 163319. <https://doi.org/10.1063/1.5028354>
25. Souza P. C. T., Alessandri R., Barnoud J., Thallmair S., Faustino I., Grünwald F., Patmanidis I., Abdizadeh H., Bruininks B. M. H., Wassenaar T. A., Kroon P. C., Melcr J., Nieto V., Corradi V., Khan H. M., Domański J., Javanainen M., Martinez-Seara H., Reuter N., Best R. B., Vattulainen I., Monticelli L., Periole X., Tieleman D. P., de Vries A. H., Marrink S. J. Martini 3: A general purpose force field for coarse-grained molecular dynamics. *Nature Methods*, 2021, vol. 18, pp. 382–388. <https://doi.org/10.1038/s41592-021-01098-3>
26. Miyazaki Y., Okazaki S., Shinoda W. PSPICA: A coarse-grained force field for lipid membranes based on a polar water model. *J. of Chemical Theory and Computation*, 2020, vol. 16, iss. 1, pp. 782–793. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.9b00946>
27. Pastor R. W., MacKerell A. D. Development of the CHARMM force field for lipids. *J. Phys. Chem. Lett.*, 2011, vol. 2, iss. 13, pp. 1526–1532. <https://doi.org/10.1021/jz200167q>
28. Basdevant N., Dessaux D., Ramirez R. Ionic transport through a protein nanopore: A Coarse-Grained Molecular Dynamics Study. *Scientific Reports*, 2019, vol. 9, iss. 1, art. 15740. <https://doi.org/10.1038/s41598-019-51942-y>
29. Jo S., Kim T., Iyer V. G., Im W. CHARMM-GUI: A web-based graphical user interface for CHARMM. *J. Comp. Chem.*, 2008, vol. 29, iss. 11, pp. 1859–1865. <https://doi.org/10.1002/jcc.20945>
30. Patra M., Karttunen M., Hyvönen M. T., Falck E., Lindqvist P., Vattulainen I. Molecular dynamics simulations of lipid bilayers: Major artifacts due to truncating electrostatic interactions. *Biophysical Journal*, 2003, vol. 84, iss. 6, pp. 3636–3645. [https://doi.org/10.1016/S0006-3495\(03\)75094-2](https://doi.org/10.1016/S0006-3495(03)75094-2)

Поступила в редакцию 07.06.2025; одобрена после рецензирования 09.07.2025;
принята к публикации 10.07.2025; опубликована 28.11.2025

The article was submitted 07.06.2025; approved after reviewing 09.07.2025;
accepted for publication 10.07.2025; published 28.11.2025



Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 460–473

Izvestiya of Saratov University. Physics, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 460–473

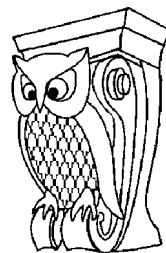
<https://fizika.sgu.ru>

<https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-460-473>, EDN: WUGGKY

Научная статья

УДК 621.384.3:61

Термовизуализация микрогемодинамики и интегрированное картирование активности потовых желез как метод диагностики автономной нейропатии



А. А. Сагайдачный¹✉, А. В. Антонов¹, И. С. Залетов¹, Д. И. Майсков¹, А. В. Фомин¹, С. Н. Потахин², Ан. В. Скрипаль¹

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

²Саратовский государственный медицинский университет имени В. И. Разумовского, Россия, 410012, г. Саратов, ул. Большая Казачья, д. 112

Сагайдачный Андрей Александрович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры медицинской физики, andsag@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5296-1968>, AuthorID: 612410

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

Залетов Иван Сергеевич, ассистент кафедры медицинской физики, izaletov25@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-1419-7372>, AuthorID: 1035350

Майсков Дмитрий Игоревич, ассистент кафедры медицинской физики, dmayskov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3487-2590>, AuthorID: 1035884

Фомин Андрей Владимирович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры медицинской физики, 89050344175@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1568-8317>, AuthorID: 683997

Потахин Сергей Николаевич, доктор медицинских наук, профессор, заведующий кафедрой госпитальной хирургии лечебного факультета, potakhin_sn@rambler.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4159-3047>

Скрипаль Анатолий Владимирович, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой медицинской физики, skripalav@info.sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9080-0057>, AuthorID: 33340

Аннотация. Динамическая инфракрасная термография является перспективным методом для визуализации физиологических процессов, не только микрогемодинамики, но и активности эккринных потовых желез. Нарушение активности потовых желез в исследуемых зонах может свидетельствовать, прежде всего, о повреждении холинергических нервных волокон. **Цель:** разработка нового подхода к анализу динамических термограмм, основанного на разделении исходного температурного сигнала на две независимых компоненты: вазомоторный (микрогемодинамика) и судомоторный (активность потовых желез), и применение данного подхода для выявления нейропатии в группе пациентов с сахарным диабетом 2-го типа. **Материалы и методы:** Запись динамических термограмм проводилась с помощью охлаждаемой камеры с температурной чувствительностью 0.02°C в процессе выполнения дыхательной пробы, заключающейся в трех резких вдохах с интервалом 2 мин. Термограммы регистрировались у 11 здоровых испытуемых и 11 пациентов с сахарным диабетом 2-го типа, средний возраст участников групп 58 ± 7 лет. Точки термограммы разделялись на два класса: в первом классе динамика температуры обусловлена влиянием только микрогемодинамики, во втором – совокупным влиянием микрогемодинамики и активности потовых желез. Для классификации точек термограммы использовались значения модуля производной температурных колебаний с порогом более $0.03^{\circ}\text{C}/\text{с}$. Визуализация областей активных потовых желез проводилась посредством интегрирования информации, полученной за всё время эксперимента. **Результаты:** Использование полученных интегрированных карт позволило определить относительную площадь, занимаемую активными потовыми железами в группе пациентов с сахарным диабетом 2-го типа 5.25% и в группе здоровых испытуемых – 22.25%. Результаты свидетельствуют о статистически значимом уменьшении площади активных потовых желез в группе пациентов с сахарным диабетом по сравнению с группой нормы, что может являться признаком нарушения холинергической симпатической иннервации и наличия диабетической нейропатии верхних конечностей. Таким образом, интегрированная карта функционирующих потовых желез дает возможность клиническому специалисту определять площадь поверхности тела с нарушенной автономной функцией в области конечностей, в частности, оценивать степень выраженности периферической нейропатии у пациентов с сахарным диабетом 2-го типа.

Ключевые слова: термография, сахарный диабет, гемодинамика, потовые железы, нейропатия, автономная функция, визуализация, производная, температура

Для цитирования: Сагайдачный А. А., Антонов А. В., Залетов И. С., Майсков Д. И., Фомин А. В., Потахин С. Н., Скрипаль Ан. В. Термовизуализация микрогемодинамики и интегрированное картирование активности потовых желез как метод диагностики автономной нейропатии // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 460–473. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-460-473>, EDN: WUGGKY

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



Article

Thermal imaging of microhemodynamics and integrated mapping of sweat gland activity as a method for diagnosing autonomic neuropathy

A. A. Sagaidachnyi¹✉, A. V. Antonov¹, I. S. Zaletov¹, D. I. Mayskov¹, A. V. Fomin¹, S. N. Potakhin², An. V. Skripal¹

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

²V. I. Razumovsky Saratov State Medical University, 112 Bolshaya Kazachya St., 410012 Saratov, Russia

Andrey A. Sagaidachnyi, andsag@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5296-1968>, AuthorID: 612410

Andrey V. Antonov, antonovav29012003@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-7710-1577>

Ivan S. Zaletov, izaletov25@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-1419-7372>, AuthorID: 1035350

Dmitriy I. Mayskov, dmayskov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3487-2590>, AuthorID: 1035884

Andrey V. Fomin, 89050344175@bk.ru, <https://orcid.org/0000-0002-1568-8317>, AuthorID: 683997

Sergey N. Potakhin, potakhin_sn@rambler.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4159-3047>

Anatoliy V. Skripal, skripalav@info.sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9080-0057>, AuthorID: 33340

Abstract. Background and Objectives: Dynamic infrared thermography is a promising method for imaging physiological processes, including not only microhemodynamics but also the activity of eccrine sweat glands. Impaired sweat gland activity in the examined areas may primarily indicate damage to cholinergic nerve fibers. This study aims to develop and apply a novel approach for analysing dynamic thermograms, which is based on the separation of the original temperature signal into two independent components—vasomotor (microhemodynamics) and sudomotor (sweat gland activity)—for the detection of neuropathy in patients with type 2 diabetes mellitus. **Materials and Methods:** Dynamic thermograms were recorded using a cooled camera with a temperature sensitivity of 0.02°C during a breathing test, which involved three sharp inhalations performed at 2-minute intervals. Thermograms were obtained from 11 healthy subjects and 11 patients with type 2 diabetes mellitus; the mean age of the participants was 58 ± 7 years. Thermogram pixels were classified into two categories: in the first category, temperature dynamics were influenced solely by microhemodynamics, while in the second category, they were influenced by the combined effect of microhemodynamics and sweat gland activity. To classify thermogram points, the values of the modulus of the derivative of temperature fluctuations with a threshold above 0.03°C/s were used. Visualization of regions with active sweat glands was achieved by integrating the information obtained over the entire duration of the experiment. **Results:** The use of the obtained integrated maps has made it possible to determine the relative area occupied by active sweat glands in the group of patients with type 2 diabetes mellitus (5.25%) and in the group of healthy subjects (22.25%). The results indicate a statistically significant decrease in the area of active sweat glands in the group of patients with diabetes mellitus compared to the control group. This finding may be a sign of impaired cholinergic sympathetic innervation and the presence of diabetic neuropathy in the upper limbs. **Conclusions:** The integrated map of functioning sweat glands enables a clinician to identify the body surface area with impaired autonomic function in the limbs, particularly for assessing the severity of peripheral neuropathy in patients with type 2 diabetes mellitus.

Keywords: thermography, diabetes mellitus, hemodynamic, sweat glands, neuropathy, autonomic function, imaging, derivative, temperature

For citation: Sagaidachnyi A. A., Antonov A. V., Zaletov I. S., Mayskov D. I., Fomin A. V., Potakhin S. N., Skripal An. V. Thermal imaging of microhemodynamics and integrated mapping of sweat gland activity as a method for diagnosing autonomic neuropathy. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 460–473 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-460-473>, EDN: WUGGKY

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

Введение

Динамическую инфракрасную термографию можно рассматривать в качестве перспективного инструмента для визуализации анатомических структур и физиологических процессов на поверхности живых объектов наряду с методами лазерной доплеровской, спекл-контрастной и фотоплетизмографической визуализации [1, 2].

Повышение пространственного разрешения динамических термограмм в сочетании с высокой скоростью записи создало предпосылки для разработки методов, позволяющих визуализировать и изучать активность единичных эккриновых потовых желез [3–5]. Практическая важность изучения эккриновых потовых желез состоит в том, что они активируются посредством малых симпатических нервных волокон

холинергического типа. Повреждение нервных волокон, например при развитии периферической нейропатии у пациентов с сахарным диабетом, может приводить к нарушению секреторной функции потовых желез в соответствующих анатомических зонах. Достоверно установлено снижение плотности нервных волокон при сахарном диабете, приводящее к различным anomalies пототделения [6–8]. Высокий уровень сахара в крови при сахарном диабете приводит постепенно к повреждению нервных волокон в результате прямого токсического действия гипергликемии на нервные волокна, нарушению микроциркуляции в сосудах, питающих нервы (vasa nervorum), ишемии и повреждению аксонов, накоплению сорбитола и окислительному стрессу внутри нервного волокна [9, 10]. Секреторная функция самих потовых желез может



нарушаться вторично лишь на поздних стадиях диабета, например, вследствие длительного течения микроангиопатии кожи [11].

Как было показано в работе [12], пульсирующее потоотделение может характеризовать судомоторную активность, которая часто сопровождается активацией стенки кровеносных сосудов [13]. Поэтому при выполнении температурных измерений требуется развитие подходов к раздельному анализу симпатической активации потовых желез и кровеносных сосудов.

В настоящее время известно применение инфракрасной термографии для диагностики нейропатии нижних конечностей и синдрома диабетической стопы лишь непосредственно по температурным параметрам кожи без анализа активности потовых желез [14]. Отсутствие раздельной оценки вазомоторного и судомоторного компонентов температурного сигнала существенно снижает диагностическую ценность метода, так как не позволяет дифференцировать нарушение нервной регуляции потовых желез от изменений микроциркуляции. Актуальным для биомедицинской диагностики является развитие новых модельных физических и математических подходов к тепловизионному анализу одновременно активности потовых желез и гемодинамики в микрососудах как в области неврологии, эндокринологии, так и ряде других клинических направлений.

Однородность пространственного распределения активных потовых желез и интенсивность потоотделения определяются анатомическими, функциональными и рядом физиологических особенностей организма человека [15]. При проведении физических измерений, таких как динамический тепловизионный анализ, интерпретация результатов обычным медицинским работником затруднена вследствие большого объема получаемых пространственно-временных данных. Наиболее информативным для биомедицины представляется результат в виде карты, отражающей пространственное распределение свойств объекта исследования за всё время проведения эксперимента.

Целью настоящей работы является разработка и валидация нового подхода к анализу динамических термограмм, основанного на алгоритмическом разделении исходного температурного сигнала на две независимые компоненты – вазомоторный (микрогемодинамика) и судомоторный (активность потовых желез). Исследуются перспективы применения подхода для

комплексной оценки состояния периферической микроциркуляции и автономной иннервации. На примере анализа активности потовых желез демонстрируются возможности количественной диагностики автономной нейропатии как осложнения сахарного диабета 2-го типа.

1. Методы исследования

1.1. Разделение и анализ двух независимых компонент температурного сигнала

Как нами было показано ранее [8, 16, 17], колебания температуры можно рассматривать как двухкомпонентный сигнал, одна из составляющих которого обусловлена колебаниями кровотока в микрососудах (вазомоторный компонент), вторая – колебаниями активности потовых желез (судомоторный компонент). При этом две компоненты определялись либо с использованием независимого сигнала кровотока, либо с помощью отделения высокочастотных компонент колебаний активности потовых желез от низкочастотных компонент колебаний кровотока в микрососудах. В настоящей работе использовано не частотное, а *пространственное разделение точек термограммы объекта* также на два класса точек (вазомоторный и судомоторный) с целью анализа компонент, специфика которого зависит от диагностической задачи. Это разделение реализовано с использованием значений модуля производной колебаний температуры по времени в каждой точке термограммы (п. 1.2).

Основная проблема анализа состоит в том, что определив точки, соответствующие областям влияния активности потовых желез на температуру кожи, необходимо дополнительно учитывать влияние колебаний кровотока в данных точках (здесь и далее считается, что количество активных потовых желез и количество пор на поверхности кожи соответствуют друг другу, поскольку каждая видимая на термограмме потовая пора связана только с одной активной потовой железой). Таким образом, колебание средней температуры T_{Avg} зоны интереса на поверхности кожи с активными потовыми железами можно представить в виде линейной комбинации компоненты, зависящей от колебаний температуры кровотока в микрососудах – $\tilde{T}_{BF}(t)$, и компоненты, зависящей от колебаний температуры, обусловленных одновременным влиянием как кровотока в микрососудах, так и потоотделе-

ния – $\tilde{T}_{SwBF}$:

$$T_{Avg}(t) = N_{BF} \cdot \tilde{T}_{BF}(t) + N_{Sw} \cdot \tilde{T}_{SwBF}(t). \quad (1)$$

Здесь коэффициенты N_{BF} и N_{Sw} , задаваемые соотношениями

$$N_{BF} = \frac{C_{BF}}{C_{\Sigma}}, \quad N_{Sw} = \frac{C_{Sw}}{C_{\Sigma}}, \quad (2)$$

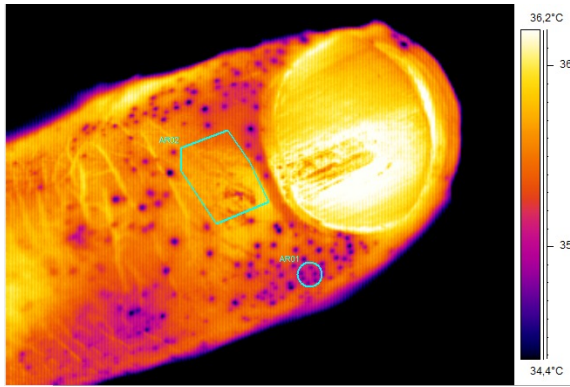
$$N_{BF} + N_{Sw} = 1, \quad C_{\Sigma} = C_{BF} + C_{Sw},$$

имеют следующий смысл: N_{BF} – доля точек кожи без активных потовых желез (АПЖ); N_{Sw} – доля точек кожи с активными потовыми железами (C_{BF} и C_{Sw} – количество точек без АПЖ и количество точек с наличием таковых соответственно, дающих в сумме общее число C_{Σ}). Обозначая через $\tilde{T}_{Sw}(t)$ компоненту колебаний температуры, обусловленную исключительно влиянием потового отделения, найдем что

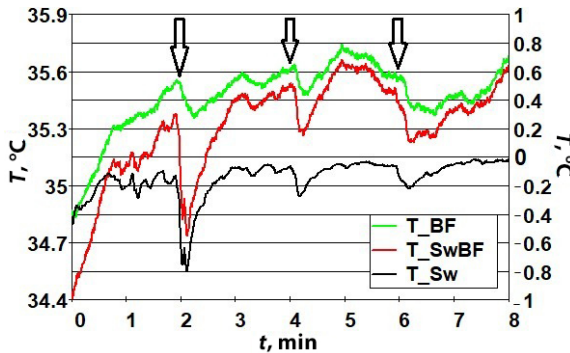
$$\tilde{T}_{SwBF} = \tilde{T}_{Sw}(t) + \tilde{T}_{BF}(t). \quad (3)$$

С учетом (2) в результате подстановки (3) в (1) получим:

$$T_{Avg}(t) = \tilde{T}_{BF}(t) + N_{Sw} \cdot \tilde{T}_{Sw}(t), \quad (4)$$



a/a



б/б

Подставляя выражение для $\tilde{T}_{Sw}$ из формулы (3), найдем из (4) выражение для N_{Sw} :

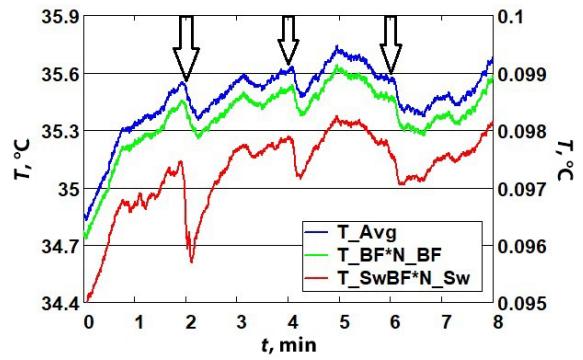
$$N_{Sw} = \frac{T_{Avg}(t) - \tilde{T}_{BF}(t)}{T_{SwBF}(t) - \tilde{T}_{BF}(t)}, \quad (5)$$

$$C_{Sw} = \frac{T_{Avg}(t) - \tilde{T}_{BF}(t)}{T_{SwBF}(t) - \tilde{T}_{BF}(t)} \cdot C_{\Sigma}.$$

Из (5) следует, что объемную долю (количество) точек с АПЖ N_{Sw} можно определить, зная среднюю температуру в полной зоне интереса, среднюю температуру в точках вне АПЖ и среднюю температуру в точках АПЖ.

1.2. Пространственное разделение точек термограммы

На рис. 1 приведен пример разложения температурных колебаний на компоненты в соответствии с выражениями (1) (рис. 1, б) и (3) (рис. 1, в) при проведении пробы, состоящей из трех глубоких вдохов. Сигнал $\tilde{T}_{BF}$ представляет собой среднее значение температуры в точках без наличия АПЖ, $\tilde{T}_{Sw}$ – среднее значение температуры в точках с наличием АПЖ. Выделение компонент проведено с использованием описываемого ниже алгоритма.



в/в

Рис. 1. Разделение температурного сигнала на компоненты: кадр термограммы с областями интереса, содержащими активные потовые железы и без них (а); компоненты выражения (1) (б); компоненты выражения (3) (в). Для компонент $N_{Sw} \cdot \tilde{T}_{SwBF}$, $\tilde{T}_{Sw}$ и $\tilde{T}_{BF}$ справа приведена шкала, стрелки над кривыми указывают моменты глубокого вдоха (цвет онлайн)

Fig. 1. Separation of the temperature signal into components: a – thermogram frame with areas of interest with and without active sweat glands (a); components of expression (1) (b); components of expression (3) (c). For components $N_{Sw} \cdot \tilde{T}_{SwBF}$, $\tilde{T}_{Sw}$ and $\tilde{T}_{BF}$ the scale is on the right, the arrows above the curves indicate the moments of deep inhalation (color online)



На рис. 1 видно, что форма сигналов компонент отличается. Каждый глубокий вдох сопровождается резким снижением температуры в области АПЖ и более плавным снижением температуры в области без АПЖ. Рис. 1, б демонстрирует, что компонента $\tilde{T}_{Sw}$ вносит значимый вклад в динамику средней температуры зоны интереса, но не связана непосредственно с динамикой кровотока. Поэтому проведение температурного анализа микрогемодинамики без учета влияния компоненты $\tilde{T}_{Sw}$, обусловленной активностью потовых желез, может приводить к искажению результатов и некорректной их интерпретации. Для определения компоненты $\tilde{T}_{Sw}$, обусловленной исключительно АПЖ, необходимо определить точки термограммы без наличия АПЖ и точки с наличием таковых, то есть пространственно разделить два класса точек.

Пространственное разделение термограммы на класс точек, обусловленных преимущественным влиянием микрогемодинамики, и класс точек, обусловленных совокупным влиянием как микрогемодинамики, так и активности потовых

желез реализовано с использованием модуля производной колебаний температуры по времени, вычисленной в каждой точке термограммы.

На рис. 2 приведены средние значения колебаний температуры T_{BF} в области без АПЖ и температуры в области с наличием АПЖ (компонент T_{SwBF}), а также модули временных производных этих компонент (см. соответствующие области интереса на рис. 1, а).

Графики на рис. 2 демонстрируют, что значения модуля производных в областях без АПЖ значительно ниже модуля производной в областях с наличием АПЖ. Это позволяет ввести пороговое значение производной для выделения точек термограммы, подверженных влиянию АПЖ. Проведенные вычисления на группе здоровых испытуемых показали, что для этого можно использовать пороговое значение в диапазоне 0.03–0.09°C/c (диаграмма показана на рис. 3). Для данных, представленных на рис. 2, максимальные значения модуля производной в точках термограммы без АПЖ не превышают медианы параметра в точках с наличием АПЖ, поэтому

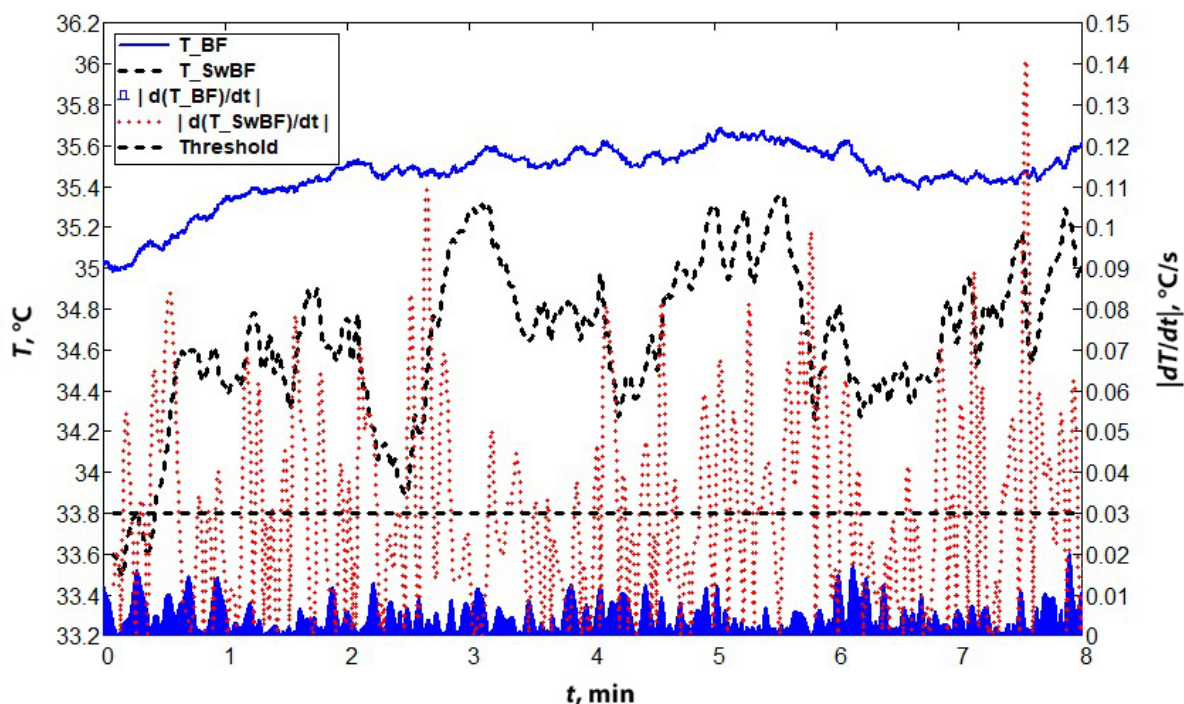


Рис. 2. Колебания температуры (шкала слева) в области без АПЖ (сплошная линия) и в области АПЖ (штриховая линия). Колебания модуля производной температуры (шкала справа) в области без АПЖ (сплошная заливка) и в области с наличием АПЖ (точечная линия). Штриховая прямая линия отмечает порог значения производной на уровне 0.03°C/c (цвет онлайн)

Fig. 2. Temperature fluctuations (left scale) in the region without APJ (solid line) and in the region with APJ (dashed line). Fluctuations in the absolute value of the temperature derivative (right scale) in the region without APJ (solid fill) and in the region with APJ (dotted line). The dashed straight line marks the threshold of the derivative value at 0.03°C/s (color online)



задание порога $0.03\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{с}$ достаточно для разделения двух классов точек. При этом к точкам пор будут относиться области, в которых модуль производной выше порога.

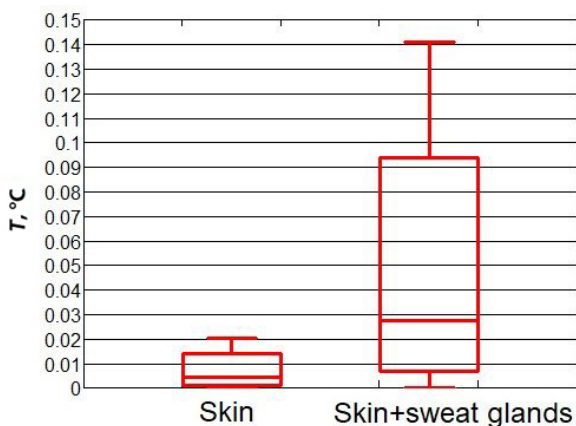
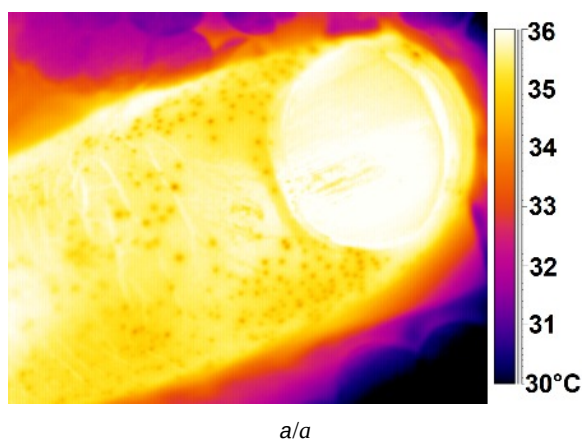


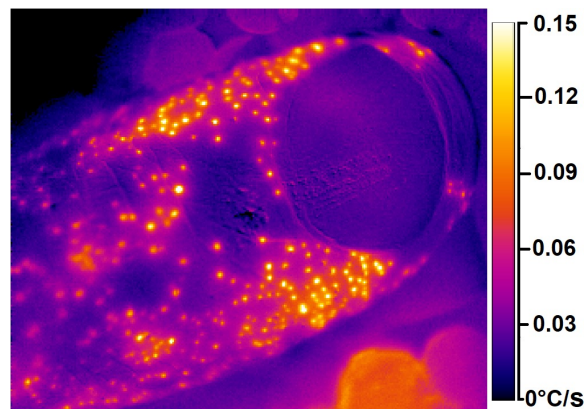
Рис. 3. Статистическое распределение значений модуля временных производных колебаний температуры в области кожи без АПЖ (слева) и с наличием АПЖ (справа)

Fig. 3. Statistical distribution of the values of the module of the derivatives of temperature fluctuations in the skin area without active sweat glands (left) and with active sweat glands (right)

На рис. 4 приведен пример пространственного разделения точек термограммы на два класса с порогом модуля производной $0.03^{\circ}\text{C}/\text{с}$. Видно, что пороговая обработка исходной динамической термограммы (рис. 4, а) позволила отделить области с активными потовыми железами (светлые пятна на рис. 4, б) от областей без активных потовых желез (темные области на рис. 4, б)



а/а



б/б

Рис. 4. Пример определения точек термограммы, отражающих проявление активности эккриновых потовых желез на основе использования модуля производных температуры по времени: исходная термограмма до обработки (шкала в градусах) (а); термограмма после обработки (шкала в значениях производных температуры по времени) (б) (цвет онлайн)

Fig. 4. Example of determining thermogram points reflecting the manifestation of the activity of eccrine sweat glands based on the use of the temperature derivative module over time: the initial thermogram before processing (scale in degrees) (a); the thermogram after processing (scale in values of temperature derivatives over time) (b) (color online)

Таким образом, вычисление модуля производной в каждой точке динамической термограммы и установление порога в диапазоне $0.03\text{--}0.09^{\circ}\text{C}/\text{с}$, дает возможность определить два различных класса точек с наличием и отсутствием активных потовых желез.

1.3. Нагрузочная проба с глубоким вдохом и термографическая регистрация

Для стимуляции одновременной работы потовых желез применялась дыхательная проба (ДП) – тест, основанный на выполнении резкого глубокого вдоха. У большинства людей такая проба вызывает синхронное сужение артериол кожи, опосредованное симпатической нервной системой [18]. В ходе исследования серия из трёх таких глубоких вдохов производилась на 2, 4 и 6 мин эксперимента с двухминутными интервалами. В промежутках между вдохами участники дышали ровно и произвольно. На протяжении всех 8 минут процедуры выполнялась непрерывная термографическая запись фаланг пальцев.

В исследовании приняли участие две группы испытуемых: контрольная группа из 11 здоровых добровольцев (5 женщин и 6 мужчин в возрасте 50–65 лет без сердечно-сосудистых, респираторных и неврологических заболеваний) и группа пациентов того же возраста и численности (6 женщин и 5 мужчин) с диагнозом сахарный диабет 2-го типа, осложнённый диабетической периферической нейропатией нижних конечностей. Для расчета статистической значимости



различий между группами использовался непараметрический критерий Манна – Уитни, так как при небольшом объеме выборки сложно оценить, являются ли полученные данные распределенными по нормальному закону.

Критерии включения для пациентов с сахарным диабетом 2-го типа: продолжительность заболевания 3–5 лет, компенсированное или субкомпенсированное состояние углеводного обмена с уровнем гликированного гемоглобина (HbA1c) от 6.5 до 8.5%, стабильная схема лечения на протяжении последних 3 месяцев, выявленная полинейропатия нижних конечностей на основе соответствующих симптомов и признаков, а также инструментально подтвержденная с использованием метода электронейромиографии. Критерии включения для здоровых испытуемых: отсутствие диагноза «сахарный диабет» любого типа, отсутствие сердечно-сосудистых, неврологических и эндокринных хронических заболеваний.

Критерии исключения для пациентов с сахарным диабетом 2-го типа: заболевания щитовидной железы, неврологические расстройства, не связанные с сахарным диабетом, хроническая сердечная недостаточность. Критерии исключения для группы здоровых испытуемых: наличие нарушений толерантности к глюкозе, наличие заболеваний, влияющих на потоотделение, наличие кожных заболеваний в областях измерения.

Исследование было одобрено Этическим комитетом Саратовского государственного медицинского университета им. В. И. Разумовского и проводилось в условиях клинической лаборатории под медицинским контролем. Все участники предоставили информированное добровольное согласие на исследование до начала измерений.

Регистрация сигнала температуры кожи проводилась с использованием длинноволновой тепловизионной камеры ThermoCam SC 3000 (FLIR Systems, Швеция) с макролинзой 34/100, работающей в спектральном диапазоне 8–9 мкм. Температурная чувствительность системы составляла 0.02°C , разрешение – 320×240 пикселей. Анализируемый участок поверхности пальцев (площадью около 4 см^2) оставался неизменным. Кисть и пальцы фиксировались на пенопластовой подложке с помощью двустороннего скотча. Это позволяло обеспечить неподвижность руки во время записи термограмм и минимизировать влияние теплопроводности поверхности стола на процессы терморегуляции. Измерения проводились в помещении при температуре $23 \pm 1^{\circ}\text{C}$,

влажности воздуха $50 \pm 5\%$, при отсутствии форсированной конвекции и прямых источников инфракрасного излучения с температурой выше комнатной.

1.4. Интегрированное картирование активности потовых желез

Идея интегрированного функционального картирования состоит в накоплении признаков активности потовых желез в каждой точке анализируемой поверхности кожи за полное время проведения экспериментальной записи и построение результирующей карты активности потовых желез. Для построения интегрированной карты активности потовых желез строятся два изображения: карта интенсивности потоотделения (КИП) и карта времени активности потовых желез (КВП). Отношение КИП/КВП дает интегрированную карту активности потовых желез (ИКАП).

В качестве признака, характеризующего интенсивность потоотделения, выбрана сумма модулей производной колебаний температуры в точках с активными потовыми железами на основе которого строилась карта интенсивности (КИП) работы потовых желез. При этом выбирались значения модуля производной только в те моменты времени, в которые производная превышала заданный порог.

Время активности потовых желез определялось как среднее значение времени, в течение которого модуль производной колебаний температуры в точках активных потовых желез превышал порог. На основе этих значений строилась КВП. Затем с использованием двух полученных карт строилась интегрированная карта ИКАП=КИП/КВП.

Алгоритм обработки термограмм и процесс построения интегрированной карты можно проиллюстрировать схемой на рис. 5.

На шаге I проводится термографическая регистрация волярной поверхности дистальных фаланг пальцев в состоянии покоя и при проведении дыхательной пробы (см. п. 1.3). С помощью вычисления модуля временной производной колебаний температуры в каждой точке термограммы и порога выделяются два класса точек объекта (см. п. 1.2). Динамика температуры в первом классе точек обусловлена преимущественно колебанием кровотока в микрососудах кожи, во втором – совокупностью колебаний кровотока и активностью потовых желез (шаг II) (см. п. 1.1). На шаге III строятся два типа ин-

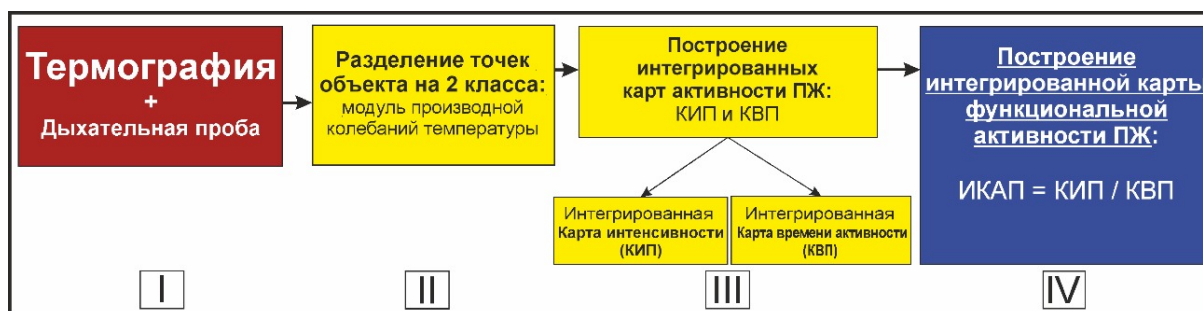


Рис. 5. Схема построения интегрированной карты активности потовых желез

Fig. 5. Scheme of plotting of an integrated map of sweat gland activity

тегрированных карт, характеризующих среднюю интенсивность потоотделения и среднее время активности. На завершающем шаге IV строится интегрированная карта активности потовых желез (ИКАП).

2. Результаты исследования

На рис. 6 приведен пример интегрированных карт, построенных для здорового испытуемого. Видно, что активные потовые железы пространственно распределены в виде нескольких агломератов и занимают значительную площадь поверхности пальца. Вид карты интенсивности

потоотделения (рис. 6, а) незначительно отличается от вида карты времени активности потовых желез (рис. 6, б), поэтому на интегральной карте активность потовых желез однородно распределена по пространству (рис. 6, в).

На рис. 7 приведены примеры типичных термограмм и интегрированных функциональных карт активности потовых желез за всё время эксперимента для здоровых испытуемых (а, б) и пациентов (в, г).

Интегрированные функциональные карты показывают уменьшение площади активных потовых желез в группе пациентов с сахарным

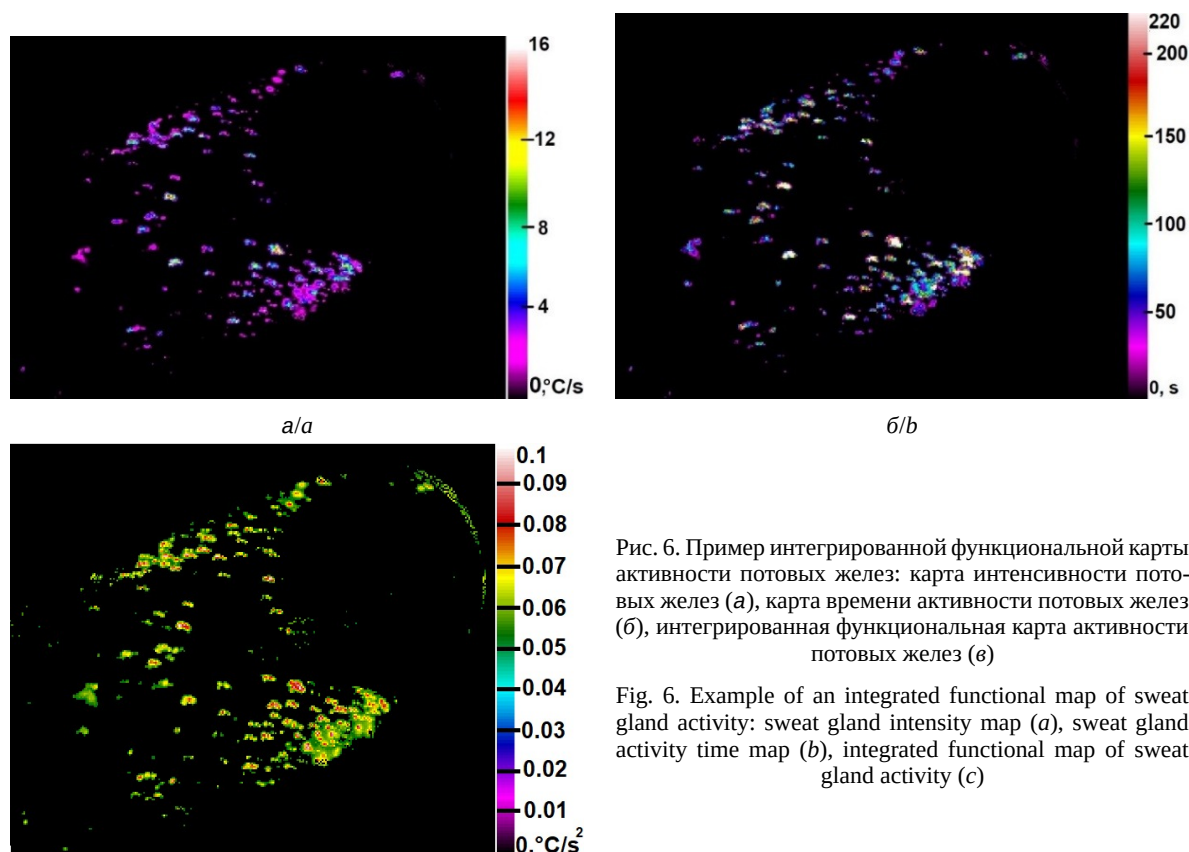


Рис. 6. Пример интегрированной функциональной карты активности потовых желез: карта интенсивности потовых желез (а), карта времени активности потовых желез (б), интегрированная функциональная карта активности потовых желез (в)

Fig. 6. Example of an integrated functional map of sweat gland activity: sweat gland intensity map (а), sweat gland activity time map (б), integrated functional map of sweat gland activity (в)

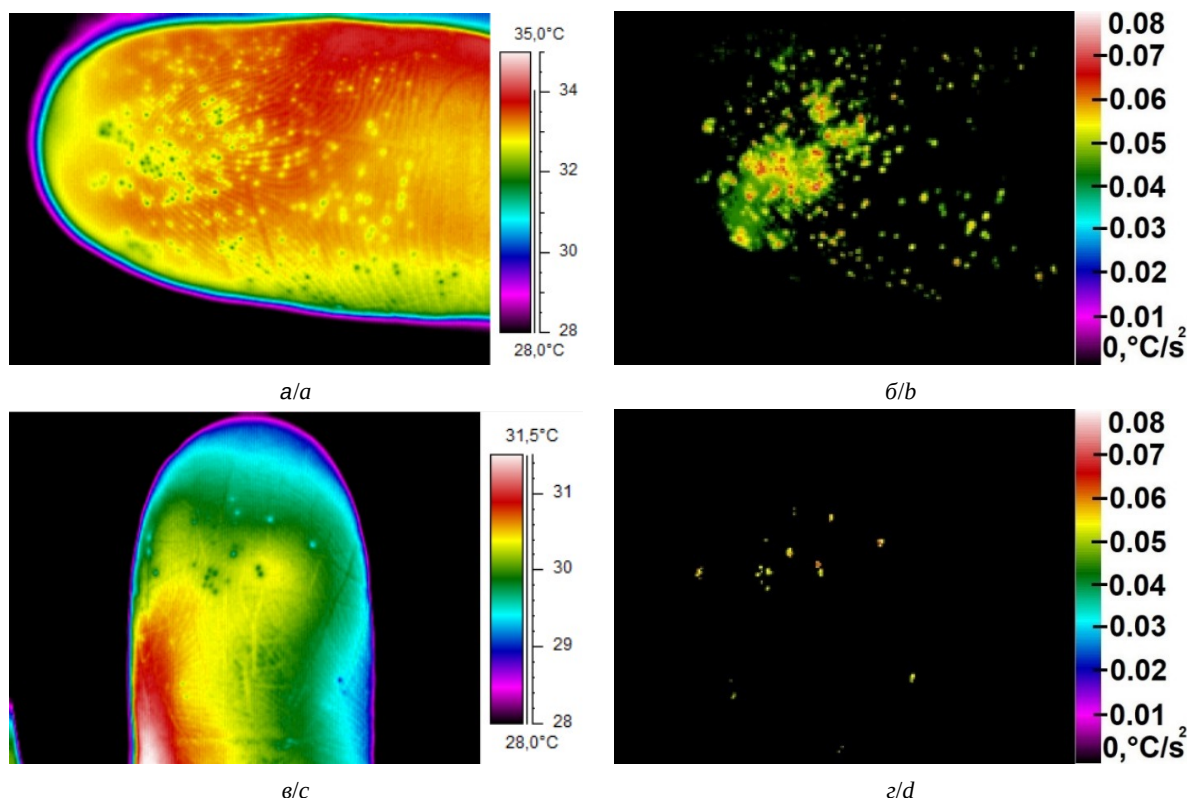


Рис. 7 Пример интегрированных функциональных карт активности потовых желез и соответствующих термограмм (слева – термограммы (а, в), справа – интегрированные функциональные карты) б, г): здоровый испытуемый (а, б); пациент с сахарным диабетом, осложненным периферической нейропатией нижних конечностей (в, г)

Fig. 7. Example of integrated functional maps of sweat gland activity: healthy subject (a, b); patient with diabetes mellitus complicated by peripheral neuropathy of the lower extremities (c, d) (left – thermograms, right – integrated functional maps): healthy subject (a, b); patient with diabetes mellitus complicated by peripheral neuropathy of lower extremities (c, d)

диабетом, осложненным диабетической периферической нейропатией нижних конечностей. В этой группе активные потовые железы расположены изолированными островками. Карта здорового человека характеризуется более равномерным пространственным распределением активных потовых желез (рис. 7, б) и большей их площадью по сравнению с диабетической группой (рис. 7, г).

В таблице представлены средние значения площади, занимаемой активными потовыми железами для группы здоровых испытуемых

и группы пациентов. Данные указаны в формате среднее значение $\pm$ среднеквадратичное отклонение.

3. Обсуждение результатов

3.1. Раздельный анализ микрогемодинамики и активности потовых желез с помощью термовизуализации

Как было показано в п. 1.1, колебания температуры, регистрируемые тепловизором на поверхности тела человека, не описывают непосредственную динамику потоотделения. Температурный

Сравнение средних значений относительной площади кожи с активными потовыми железами в группе здоровых испытуемых и группе пациентов при площади зоны интереса 4 см²

Comparison of the average values of the relative area of skin with active sweat glands in the group of healthy subjects and the group of patients with the area of the zone of interest 4 cm²

Параметр / Parameter	Здоровые испытуемые / Healthy subjects	Пациенты / Patients
Площадь потовых желез, см ² / Sweat gland area, cm ²	0.89 $\pm$ 0.43	0.21 $\pm$ 0.11
Относительная площадь потовых желез, % / Relative area of sweat glands, %	22.25 $\pm$ 10.75	5.25 $\pm$ 2.75



сигнал в областях с активными потовыми железами представляет собой совокупность двух компонент: первая из которых обусловлена преимущественным влиянием колебаний кровотока в микрососудах кожи ($\tilde{T}_{BF}(t)$), вторая компонента $\tilde{T}_{SwBF}$ – суммой вкладов как колебаний кровотока, так и процессов потоотделения (см. выражения (1)–(3)). Как следует из (4), средняя температура зоны T_{Avg} , включающей точки кожи с активными потовыми железами и точки без них, зависит от суммы компоненты $\tilde{T}_{BF}(t)$ и взвешенной компоненты $\tilde{T}_{Sw}(t)$, представляющей собой колебания температуры, обусловленные исключительно влиянием активности потовых желез. Поэтому изучение активности потовых желез методом термографии без учета температурных колебаний, обусловленных колебанием кровотока, будет не вполне корректным. Некорректным будет и термографический анализ колебаний кровотока в тех областях, где присутствуют активные потовые железы. Как показано на рис. 1, в, учет компоненты $\tilde{T}_{BF}(t)$ позволяет выровнять сигнал $\tilde{T}_{Sw}(t)$, демонстрирующий значительные изменения только в момент глубокого вдоха при проведении дыхательной пробы и синхронной активации комплекса потовых желез.

Использование модуля производной колебаний температуры и задание порога производной позволило провести разделение точек термограммы на класс, содержащий точки кожи без активных потовых желез и класс с их наличием (см. п. 1.2). Такой подход демонстрирует эффективность, поскольку выделение и испарение пота является более быстрым процессом, чем температурные колебания кожи, обусловленные микрогемодинамикой. После определения двух классов точек становится возможным исследование колебаний температуры $\tilde{T}_{BF}(t)$ и $\tilde{T}_{Sw}(t)$, что открывает возможность раздельного анализа работы двух физиологических систем – системы регуляции микрогемодинамики и системы регуляции потоотделения. Вследствие иннервации потовых желез симпатическими холинергическими нервными волокнами, локальное нарушение потоотделения может рассматриваться в качестве признака автономной нейропатии, например при сахарном диабете (см. раздел 2). Таким образом, разделение влияния микрогемодинамики и влияния активности потовых желез на температуру совместно с использованием выражений (1)–(3) обеспечивает возможность корректного и независимого анализа как микрогемодинамики, так

и автономной функции на одной динамической термограмме.

В настоящей работе основное внимание уделено исследованию информации о функционировании потовых желез, отделенной от данных о микрогемодинамике. При этом следует отметить, что изучение параметров сигнала $\tilde{T}_{BF}(t)$, обусловленного микрогемодинамикой и приведенного на рис. 1, в, представляет самостоятельный интерес. Сигнал $\tilde{T}_{BF}(t)$ в группе пациентов с сахарным диабетом может характеризовать регуляцию микрогемодинамики в эндотелиальном, нейрогенном и миогенном спектральных диапазонах, что может являться предметом отдельного исследования.

3.2. Интерпретация интегрированной карты активности потовых желез

Чем больше интенсивность потоотделения, т. е. объем отделяемого пота, тем больше выражено испарение и скорость охлаждения локальной точки кожи. Поэтому карта интенсивности потоотделения КИП была определена как сумма модулей производной колебаний температуры. Карта времени активности потовых желез КВП характеризует среднее время, в течение которого происходило интенсивное потоотделение. Тогда отношение КИП/КВП, определяющее интегрированную карту активности потоотделения – ИКАП, характеризует интенсивность потоотделения, усредненную за время активного потоотделения. Таким образом, интегрированная карта позволяет оценить площадь поверхности, занимаемую активными потовыми железами, и одновременно получить представление о пространственном распределении интенсивности потоотделения. По данным таблицы относительная площадь кожи, на которой проявляется активность потовых желез, в группе здоровых испытуемых составила 22.25%, что значительно выше по сравнению с группой пациентов с сахарным диабетом – всего 5.25%. Для оценки статистической значимости различий между группами использовали критерий Манна – Уитни. Различия были статистически значимы на уровне $p < 0.001$. В группе здоровых не только большая площадь активности потовых желез, но и большая интенсивность потоотделения по сравнению с группой пациентов с диабетом (см. рис. 7). Снижение количества функционирующих потовых желез в группе пациентов говорит в первую очередь о повреждении симпатических нервных волокон, иннервирующих потовую железу, т. е.



о проявлении автономной нейропатии. Секреторная функция самой потовой железы будет снижаться лишь в тяжелых случаях длительной нейропатии, как было отмечено во введении.

3.3. Термовизуализация и интегрированное картирование как метод диагностики автономной нейропатии

Применение метода интегрированного картирования в группе пациентов с сахарным диабетом показало значительное снижение плотности и пространственной однородности активных потовых желез по сравнению с результатами для здоровых испытуемых (см. рис. 7 и таблицу). Снижение потоотделения на верхних конечностях в ответ на дыхательную пробу может свидетельствовать о поражении немиелинизированных холинергических симпатических нервных волокон, иннервирующих потовые железы [19, 20]. До проведения измерений для всех пациентов была диагностирована диабетическая периферическая нейропатия нижних конечностей. Полученные результаты позволяют предположить наличие недиагностированной диабетической периферической нейропатии также верхних конечностей. Результаты, приведенные на рис. 7, на качественном уровне иллюстрируют отличие интегрированных изображений для пациентов от изображений для здоровых испытуемых. Проведенные исследования на группе испытуемых носят пилотный характер, характеризующийся небольшим объемом выборки. Для количественного подтверждения полученных результатов необходимо проведение отдельного исследования с большей численностью как группы здоровых добровольцев, так и группы пациентов с сахарным диабетом различного возрастного и полового состава, причем с учетом возможного влияния медикаментозной терапии на группу пациентов.

Преимущество использования термографии для анализа активности работы потовых желез состоит в том, что тепловой образ капель пота превосходит их физический размер и размер выводных протоков потовых желез. Это дает возможность при регистрации потоотделения использовать более низкое пространственное разрешение тепловизионной съемки по сравнению с требуемым разрешением съемки в видимом диапазоне. Последнее в случае использования одинакового разрешения съемки способствует расширению поля зрения тепловизионной реги-

страции перспирации с охватом большей анализируемой площади кожи.

3.4. Интегрированная карта как разновидность функционального изображения

Как показано в разделе 1.4, каждая точка интегрированной карты активности потовых желез представляет собой значение модуля производной температуры, усредненное по времени активности. То есть каждая точка интегрированной карты является параметром временной кривой температуры. В такой формулировке интегрированная карта соответствует определению одного из видов функционального изображения в рамках методологии функционального картирования динамических биомедицинских изображений, развитой в серии работ Тараторина, Годика и Гуляева [21–23]. В работах Мерла описана техника визуализации, в которой на одном термографическом изображении визуализируется характеристическое время τ за которое поверхность кожи восстановит первоначальную температуру после внешнего температурного или иного воздействия [24–26]. Данную технику также можно отнести к разновидности функциональных изображений. В отличие от τ метода визуализации и других функциональных изображений, интегрированное изображение активности потовых желез учитывает тот факт, что динамика температуры кожи является не только следствием гемодинамических процессов, но также и локализованным в пространстве влиянием потоотделения. Последнее явление не учитывается в τ методе визуализации вследствие использования термограмм более низкого пространственного разрешения, что приводит к отсутствию учета влияния активности потовых желез на динамическую термограмму.

Выводы

Предложенный подход к анализу динамических термограмм продемонстрировал повышение информативности диагностического исследования за счет того, что в температурном сигнале выделяются две независимые компоненты, характеризующие регуляцию тонуса микрососудов и работу потовых желез. Как было показано, тепловизионный анализ гемодинамики в микрососудах без учета температурного влияния активности потовых желез будет не вполне корректным. Также верно и обратное. Вычисление модуля производной колебаний температуры



в каждой точке термограммы позволяет реализовать отдельный анализ динамики температуры, обусловленный активностью этих двух физиологических регуляторных подсистем.

Использование дыхательной нагрузочной пробы, стимулирующей активность потовых желез, в сочетании с интегрированием карт позволило определить зоны нормальной и нарушенной функции потоотделения на пальцах рук в группе здоровых испытуемых и группе пациентов. Представленное здесь пилотное исследование возможностей использования термовизуализации в сочетании с интегрированным картированием и проведением дыхательной пробы в группе пациентов с сахарным диабетом 2-го типа показало снижение площади активных потовых желез на верхних конечностях на 17% по сравнению с площадью активных потовых желез в группе здоровых испытуемых. Этот факт, с наибольшей вероятностью, можно интерпретировать как нарушение автономной функции (симпатической холинергической иннервации) в группе пациентов с диабетом 2-го типа. Нейропатия при диабете проявляется в первую очередь на нижних конечностях. Поэтому обнаружение нейропатии с помощью термовизуализации и интегрированного картирования также на верхних конечностях может свидетельствовать о возможности раннего выявления данной патологии на доклинической стадии.

Список литературы

1. Cutolo M., Smith V. Detection of microvascular changes in systemic sclerosis and other rheumatic diseases // *Nature Reviews Rheumatology*. 2021. Vol. 17. P. 665–677. <https://doi.org/10.1038/s41584-021-00685-0>
2. Campbell J. S., Mead M. N. Human Medical Thermography. Boca Raton : CRC Press, 2022. 250 p. <https://doi.org/10.1201/9781003281764>
3. Vainer B. G., Morozov V. V. Infrared thermography-based biophotonics: Integrated diagnostic technique for systemic reaction monitoring // *Physics Procedia*. 2017. Vol. 86. P. 81–85. <https://doi.org/10.1016/j.phpro.2017.01.025>
4. Koroteeva E. Y., Bashkatov A. A. Thermal signatures of liquid droplets on a skin induced by emotional sweating // *Quantitative InfraRed Thermography Journal*. 2022. Vol. 19, № 2. P. 115–125. <https://doi.org/10.1080/17686733.2020.1846113>
5. Vainer B. G. FPA-based infrared thermography as applied to the study of cutaneous perspiration and stimulated vascular response in humans // *Physics in Medicine & Biology*. 2005. Vol. 50, № 23. P. R63–R94. <https://doi.org/10.1088/0031-9155/50/23/R01>
6. Lademann J., Sora J. Correlation between blood flow and various physiological parameters in human skin // *Journal of Biomedical Photonics & Engineering*. 2022. Vol. 8, № 4. Art. 040508. <https://doi.org/10.18287/JBPE22.08.040508>
7. Krzywicki A. T., Berntson G. G., O’Kane B. L. A non-contact technique for measuring eccrine sweat gland activity using passive thermal imaging // *International Journal of Psychophysiology*. 2014. Vol. 94. P. 25–34. <https://doi.org/10.1016/j.ijpsycho.2014.06.011>
8. Sagaidachnyi A. A., Mayskov D. I., Fomin A. V., Zaletov I. S., Skripal A. V. Separate extraction of human eccrine sweat gland activity and peripheral hemodynamics from high-and low-quality thermal imaging data // *Journal of Thermal Biology*. 2022. Vol. 110. Art. 103351. <https://doi.org/10.1016/j.jtherbio.2022.103351>
9. Баринов А. Н., Новосадова М. В. Вегетативная невропатия при сахарном диабете: клинические проявления, диагностика и лечение // *Неврология, нейропсихиатрия, психосоматика*. 2011. № 2. С. 25–33. <https://doi.org/10.14412/2074-2711-2011-143>
10. Купцова Е. Н., Ботвинцева Л. А. Современные представления о патогенезе диабетической нейропатии у пациентов с сахарным диабетом 2 типа. Патогенетическое обоснование применения природных лечебных факторов при сахарном диабете // *Курортная медицина*. 2020. № 3. С. 57–68. EDN: MECMYK
11. Singaram S., Ramakrishnan K., Selvam J., Senthil M., Narayanamurthy V. Sweat gland morphology and physiology in diabetes, neuropathy, and nephropathy: A review // *Archives of Physiology and Biochemistry*. 2024. Vol.130, iss. 4. P. 437–451. <https://doi.org/10.1080/13813455.2022.2114499>
12. Soliz P., Agurto C., Edwards A., Jarry Z., Simon J., Calder C., Burge M. Detection of diabetic peripheral neuropathy using spatial-temporal analysis in infrared videos // 2016 50th Asilomar Conference on Signals, Systems and Computers (ASILOMAR 2016). November 6–9, 2016. Pacific Grove, CA, USA. IEEE, 2016. P. 263–267. <https://doi.org/10.1109/ACSSC.2016.7869038>
13. Estañol B., Corona M. V., Elías Y., Téllez-Zenteno J. F., Infante O., García-Ramos G. Sympathetic co-activation of skin blood vessels and sweat glands // *Clinical Autonomic Research*. 2004. Vol. 14, iss. 2. P. 107–112. <https://doi.org/10.1007/s10286-004-0170-6>
14. Wohlfart S., Meiller R., Hammersen J., Park J., Menzel-Severing J., Melichar V. O., Schneider H. Natural history of X-linked hypohidrotic ectodermal dysplasia: A 5-year follow-up study // *Orphanet Journal of Rare Diseases*. 2020. Vol. 15. Art. 7. <https://doi.org/10.1186/s13023-019-1288-x>
15. Mayskov D. I., Fomin A. V., Volkov I. U., Zaletov I. S., Skripal, A. V., Sagaidachnyi A. A. Statistical and spectral properties of spatio-temporal skin temperature oscillations derived by sweat gland activity: Thermal imaging exploration // *Proceedings SPIE*. 2022. Vol. 12192. Art. 121920Y. <https://doi.org/10.1117/12.2626927>
16. Майсков Д. И., Сагайдачный А. А., Залетов И. С., Фомин А. В., Скрипаль А. В. Интегральное картирование активности потовых желез методом дифференциальной термографии // *Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия : Физика*, 2021. Т. 21, вып. 3.



- C. 222–232. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2021-21-3-222-232>
17. Сагайдачный А. А., Майсков Д. И., Залетов И. С., Фомин А. В., Скрипаль А. В. Детектирование активности единичных потовых желез методом макротермографии и ее взаимосвязь с температурой кожи и периферической гемодинамикой // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия : Физика 2020. Т. 20, вып. 2. С. 103–115. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2020-20-2-103-115>
18. Allen J., Howell K. Microvascular imaging: Techniques and opportunities for clinical physiological measurements // *Physiological Measurement*. 2014. Vol. 35, № 7. P. R91 – R141. <https://doi.org/10.1088/0967-3334/35/7/R91>
19. Sato K., Kang W. H., Saga K., Sato K. T. Biology of sweat glands and their disorders. I. Normal sweat gland function // *Journal of the American Academy of Dermatology*. 1989. Vol. 20, iss. 4. P. 537–563. [https://doi.org/10.1016/S0190-9622\(89\)70063-3](https://doi.org/10.1016/S0190-9622(89)70063-3)
20. Malik R. A. Diabetic neuropathy: A focus on small fibres // *Diabetes/Metabolism Research and Reviews*. 2020. Vol. 36. Suppl. 1. Art. e3255. <https://doi.org/10.1002/dmrr.3255>
21. Taratorin A. M., Godik E. E., Guljaev Y. V. Functional mapping of dynamic biomedical images // *Measurement*. 1990. Vol. 8, iss. 3. P. 137–140. [https://doi.org/10.1016/0263-2241\(90\)90055-B](https://doi.org/10.1016/0263-2241(90)90055-B)
22. Godik E. E., Guljaev Y. V., Markov A. G., Petrov A. V., Taratorin A. M. Infrared dynamical thermovision of the biological objects // *International Journal of Infrared and Millimeter Waves*. 1987. Vol. 8. P. 517–533. <https://doi.org/10.1007/BF01013262>
23. Godik E. E., Gulyaev Y. V. Functional imaging of the human body // *IEEE Engineering in Medicine and Biology Magazine*. 1991. Vol. 10, iss. 4. P. 21–29. <https://doi.org/10.1109/51.107165>
24. Cardone D., Merla A. New frontiers for applications of thermal infrared imaging devices: Computational psychophysiology in the neurosciences // *Sensors*. 2017. Vol. 17, iss. 5. Art. 1042. <https://doi.org/10.3390/s17051042>
25. Ioannou S. Functional infrared thermal imaging: A contemporary tool in soft tissue screening // *Scientific Reports*. 2020. Vol. 10. Art. 9303. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-66397-9>
26. Сагайдачный А. А., Скрипаль А. В., Усанов Д. А. Тепловизионная биомедицинская диагностика. Саратов : Издательство «Саратовский источник», 2019. 156 с.
- systemic reaction monitoring. *Physics Procedia*, 2017, vol. 86, pp. 81–85. <https://doi.org/10.1016/j.phpro.2017.01.025>
4. Koroteeva E. Y., Bashkatov A. A. Thermal signatures of liquid droplets on a skin induced by emotional sweating. *Quantitative InfraRed Thermography Journal*, 2022, vol. 19, no. 2, pp. 115–125. <https://doi.org/10.1080/17686733.2020.1846113>
5. Vainer B. G. FPA-based infrared thermography as applied to the study of cutaneous perspiration and stimulated vascular response in humans. *Physics in Medicine & Biology*, 2005, vol. 50, no. 23, pp. R63– R94. <https://doi.org/10.1088/0031-9155/50/23/R01>
6. Lademann J., Sora J. Correlation between blood flow and various physiological parameters in human skin. *Journal of Biomedical Photonics & Engineering*, 2022, vol. 8, no. 4, art. 040508. <https://doi.org/10.18287/JBPE22.08.040508>
7. Krzywicki A. T., Berntson G. G., O’Kane B. L. A non-contact technique for measuring eccrine sweat gland activity using passive thermal imaging. *International Journal of Psychophysiology*, 2014, vol. 94, pp. 25–34. <https://doi.org/10.1016/j.ijpsycho.2014.06.011>
8. Sagaidachnyi A. A., Mayskov D. I., Fomin A. V., Zaleto I. S., Skripal A. V. Separate extraction of human eccrine sweat gland activity and peripheral hemodynamics from high-and low-quality thermal imaging data. *Journal of Thermal Biology*, 2022, vol. 110, art. 103351. <https://doi.org/10.1016/j.jtherbio.2022.103351>
9. Barinov A. N., Novosadova M. V. Autonomic neuropathy in diabetes mellitus: Clinical manifestations, diagnosis and treatment. *Neurology, Neuropsychiatry, Psychosomatics*, 2011, no. 2, pp. 25–33 (in Russian). <https://doi.org/10.14412/2074-2711-2011-143>
10. Kuptsova E. N., Botvineva L. A. Current ideas of pathogenesis of diabetic neuropathy with patients suffering from type 2 diabetes mellitus. Pathogenetic justification of application of natural therapeutic factors at diabetes mellitus. *Kurortnaya meditsina* [Spa Medicine], 2020, no. 3, pp. 57–68 (in Russian). EDN: MECMYK
11. Singaram S., Ramakrishnan K., Selvam J., Senthil M., Narayanamurthy V. Sweat gland morphology and physiology in diabetes, neuropathy and nephropathy: A review. *Archives of physiology and biochemistry*, 2024, vol. 130, iss. 4, pp. 437–451. <https://doi.org/10.1080/13813455.2022.2114499>
12. Soliz P., Agurto C., Edwards A., Jarry Z., Simon J., Calder C., Burge M. Detection of diabetic peripheral neuropathy using spatial-temporal analysis in infrared videos. *2016 50th Asilomar Conference on Signals, Systems and Computers (ASILOMAR 2016)*. November 6–9, 2016. Pacific Grove, CA, USA. IEEE, 2016. Pp. 263–267. <https://doi.org/10.1109/ACSSC.2016.7869038>
13. Estañol B., Corona M. V., Elías Y., Téllez-Zenteno J. F., Infante O., García-Ramos G. Sympathetic co-activation of skin blood vessels and sweat glands. *Clinical Autonomic Research*, 2004, vol. 14, iss. 2, pp. 107–112. <https://doi.org/10.1007/s10286-004-0170-6>
14. Wohlfart S., Meiller R., Hammersen J., Park J., Menzel-Severing J., Melichar V. O., Schneider H. Natural history of X-linked hypohidrotic ectodermal dysplasia: A 5-year

References



- follow-up study. *Orphanet Journal of Rare Diseases*, 2020, vol. 15, art. 7. <https://doi.org/10.1186/s13023-019-1288-x>
15. Mayskov D. I., Fomin A. V., Volkov I. U., Zaletov I. S., Skripal A. V., Sagaidachnyi A. A. Statistical and spectral properties of spatio-temporal skin temperature oscillations derived by sweat gland activity: Thermal imaging exploration. *Proceedings SPIE*, 2022, vol. 12192, art. 121920Y. <https://doi.org/10.1117/12.2626927>
16. Mayskov D. I., Sagaidachnyi A. A., Zaletov I. S., Fomin A. V., Skripal A. V. Integral mapping of the sweat-gland activity using differential thermography technique. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2021, vol. 21, iss. 3, pp. 222–232. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2021-21-3-222-232>
17. Sagaidachnyi A. A., Mayskov D. I., Zaletov I. S., Fomin A. V., Skripal A. V. Detection of the single sweat glands activity via the macro thermography techniques and its relation with skin temperature and peripheral hemodynamics. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2020, vol. 20, iss. 2, pp. 103–115. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2020-20-2-103-115>
18. Allen J., Howell K. Microvascular imaging: Techniques and opportunities for clinical physiological measurements. *Physiological Measurement*, 2014, vol. 35, no. 7, pp. R91 – R141. <https://doi.org/10.1088/0967-3334/35/7/R91>
19. Sato K., Kang W. H., Saga K., Sato K. T. Biology of sweat glands and their disorders. I. Normal sweat gland function. *Journal of the American Academy of Dermatology*, 1989, vol. 20, iss. 4, pp. 537–563. [https://doi.org/10.1016/S0190-9622\(89\)70063-3](https://doi.org/10.1016/S0190-9622(89)70063-3)
20. Malik R. A. Diabetic neuropathy: A focus on small fibres. *Diabetes/Metabolism Research and Reviews*, 2020, vol. 36, suppl. 1, art. e3255. <https://doi.org/10.1002/dmrr.3255>
21. Taratorin A. M., Godik E. E., Guljaev Y. V. Functional mapping of dynamic biomedical images. *Measurement*, 1990, vol. 8, iss. 3, pp. 137–140. [https://doi.org/10.1016/0263-2241\(90\)90055-B](https://doi.org/10.1016/0263-2241(90)90055-B)
22. Godik E. E., Guljaev Y. V., Markov A. G., Petrov A. V., Taratorin A. M. Infrared dynamical thermovision of the biological objects. *International Journal of Infrared and Millimeter Waves*, 1987, vol. 8, pp. 517–533. <https://doi.org/10.1007/BF01013262>
23. Godik E. E., Gulyaev Y. V. Functional imaging of the human body. *IEEE Engineering in Medicine and Biology Magazine*, 1991, vol. 10, iss. 4, pp. 21–29. <https://doi.org/10.1109/51.107165>
24. Cardone D., Merla A. New frontiers for applications of thermal infrared imaging devices: Computational psychophysiology in the neurosciences. *Sensors*, 2017, vol. 17, iss. 5, art. 1042. <https://doi.org/10.3390/s17051042>
25. Ioannou S. Functional infrared thermal imaging: A contemporary tool in soft tissue screening. *Scientific Reports*, 2020, vol. 10, art. 9303. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-66397-9>
26. Sagaidachnyi A. A., Skripal A. V., Usanov D. A. *Teplovizionnaya biomeditsinskaya diagnostika* [Thermal imaging biomedical diagnostics]. Saratov, Izdatelstvo “Saratovskii Istokhnik”, 2019. 156 p. (in Russian).

Поступила в редакцию 26.08.2025; одобрена после рецензирования 05.10.2025;
принята к публикации 10.10.2025; опубликована 28.11.2025

The article was submitted 26.08.2025; approved after reviewing 05.10.2025;
accepted for publication 10.10.2025; published 28.11.2025



Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 474–484

Izvestiya of Saratov University. Physics, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 474–484

<https://fizika.sgu.ru>

<https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-474-484>, EDN: WXXHKE

Научная статья

УДК 530.182

Оценка времени стационарности сверхмедленных колебаний потенциалов головного мозга по сигналам электроэнцефалограмм



Е. И. Боровкова^{1,2}, Д. В. Васильева², А. С. Караваев¹✉, Ю. М. Ишбулатов¹, В. И. Пономаренко¹, Б. П. Безручко¹, М. Д. Прохоров¹

¹Саратовский филиал Института радиотехники и электроники имени В. А. Котельникова РАН, Россия, 410019, г. Саратов, ул. Зеленая, д. 38

²Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Россия, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83

Боровкова Екатерина Игоревна, кандидат физико-математических наук, ¹научный сотрудник, ²доцент кафедры динамического моделирования и биомедицинской инженерии, rubane@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9621-039X>, AuthorID: 682183

Васильева Дарья Владимировна, студент 2-го курса магистратуры Института физики, darenka.www@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0006-4784-187X>

Караваев Анатолий Сергеевич, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории моделирования в нелинейной динамике, karavaevas@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-4678-3648>, AuthorID: 128455

Ишбулатов Юрий Михайлович, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории моделирования в нелинейной динамике, ishbulatov95@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2871-5465>, AuthorID: 829775

Пономаренко Владимир Иванович, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории моделирования в нелинейной динамике, ponomarenkovi@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-1579-6465>, AuthorID: 39986

Безручко Борис Петрович, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории моделирования в нелинейной динамике, bezruchkobp@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6691-8653>, AuthorID: 484

Прохоров Михаил Дмитриевич, доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией моделирования в нелинейной динамике, mdprokhorov@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4069-9410>, AuthorID: 39985

Аннотация. Сверхмедленные колебания потенциалов головного мозга, имеющие частоту менее 0.5 Гц, отражают активность центров вегетативной регуляции и являются маркерами психофизиологического состояния человека. Для таких колебаний характерна нестационарная динамика, которая затрудняет их экспериментальное исследование. Нами предложен метод оценки характерного времени стационарности сверхмедленных колебаний головного мозга, основанный на анализе экспериментальных временных рядов электроэнцефалограмм. Метод включает этапы разбиения временного ряда на сегменты, построение аппроксимирующих полиномов для каждого сегмента, расчет матрицы евклидовых расстояний между коэффициентами полиномов, кластеризацию сегментов для определения участков квазистационарной динамики и анализ длительностей объединенных сегментов для получения статистических характеристик. Предложенный метод может быть применен для оценки времени стационарности других ритмов электроэнцефалограмм, а также частотных составляющих последовательности RR-интервалов. С его помощью проведен анализ сигналов электроэнцефалограмм и RR-интервалов 50 здоровых добровольцев, находящихся в состоянии покоя. Показано, что колебания в различных частотных диапазонах исследуемых сигналов имеют разную длительность квазистационарного поведения. В диапазонах частот 0.05–0.15 Гц и 0.15–0.50 Гц, отражающих активность симпатической и парасимпатической ветвей регуляции соответственно, время стационарности сверхмедленных колебаний в сигналах электроэнцефалограмм составило 30 и 36 с соответственно. Показано, что длительности квазистационарных участков сверхмедленных колебаний в электроэнцефалограммах хорошо соответствуют длительностям участков квазистационарной динамики последовательности RR-интервалов в частотных диапазонах, ассоциируемых с процессами симпатической и парасимпатической регуляции ритма сердца.

Ключевые слова: временные ряды, нестационарность, электроэнцефалограммы, RR-интервалы, вегетативная регуляция, сверхмедленные колебания потенциалов головного мозга

Благодарности: Работа выполнена в рамках государственного задания Саратовского филиала Института радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН (проект FFWZ-2025-0016).

Для цитирования: Боровкова Е. И., Васильева Д. В., Караваев А. С., Ишбулатов Ю. М., Пономаренко В. И., Безручко Б. П., Прохоров М. Д. Оценка времени стационарности сверхмедленных колебаний потенциалов головного мозга по сигналам электроэнцефалограмм // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 474–484. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-474-484>, EDN: WXXHKE

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



Article

Estimation of the stationarity time of infra-slow oscillations of brain potentials using electroencephalogram signals

E. I. Borovkova^{1,2}, D. V. Vasilieva², A. S. Karavaev¹ , Yu. M. Ishbulatov¹, V. I. Ponomarenko¹, B. P. Bezruchko¹, M. D. Prokhorov¹

¹Saratov Branch of Kotelnikov Institute of Radioengineering and Electronics of Russian Academy of Sciences, 38 Zelyonaya St., Saratov 410019, Russia

²Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia

Ekaterina I. Borovkova, rubanei@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9621-039X>, AuthorID: 682183

Dariya V. Vasilieva, darenka.www@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0006-4784-187X>

Anatoly S. Karavaev, karavaevas@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-4678-3648>, AuthorID: 128455

Yuri M. Ishbulatov, ishbulatov95@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2871-5465>, AuthorID: 829775

Vladimir I. Ponomarenko, ponomarenkovi@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-1579-6465>, AuthorID: 39986

Boris P. Bezruchko, bezruchkobp@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6691-8653>, AuthorID: 484

Mikhail D. Prokhorov, mdprokhorov@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-4069-9410>, AuthorID: 39985

Abstract. Background and Objectives: Infra-slow oscillations of brain potentials with a frequency of less than 0.5 Hz, reflect the activity of the autonomic regulation centers and are markers of the psychophysiological state of a person. Such oscillations are characterized by non-stationary dynamics, which complicates their experimental study. **Materials and Methods:** We have proposed a method for estimating the characteristic time of stationarity of infra-slow oscillations of brain potentials based on the analysis of experimental time series of electroencephalograms. The method includes the stages of dividing the time series into segments, constructing approximating polynomials for each segment, calculating the matrix of Euclidean distances between the coefficients of the polynomials, clustering the segments to determine areas of quasi-stationary dynamics, and analyzing the durations of the combined segments to obtain statistical characteristics. The proposed method can be used to estimate the stationarity time of other electroencephalograms rhythms, as well as the frequency components of the sequence of RR-interval. The method was used to analyze electroencephalograms signals and RR-intervals of 50 healthy volunteers at rest. **Results:** It has been shown that oscillations in different frequency ranges of the studied signals have different durations of quasi-stationary behavior. In the frequency ranges of 0.05–0.15 Hz and 0.15–0.50 Hz, reflecting the activity of the sympathetic and parasympathetic branches of regulation, respectively, the stationarity time of infra-slow oscillations in electroencephalograms signals was 30 s and 36 s, respectively. **Conclusion:** The durations of quasi-stationary sections of infra-slow oscillations in electroencephalograms correspond well to the durations of sections of quasi-stationary dynamics of the sequence of RR-interval in the frequency ranges associated with the processes of sympathetic and parasympathetic regulation of the heart rhythm.

Keywords: time series, non-stationarity, electroencephalograms, RR-intervals, autonomic regulation, infra-slow oscillations of brain potentials

Acknowledgments: The work was carried out within the framework of the State assignment of the Saratov Branch of Kotelnikov Institute of Radioengineering and Electronics of Russian Academy of Sciences (project No. FFWZ-2025-0016).

For citation: Borovkova E. I., Vasilieva D. V., Karavaev A. S., Ishbulatov Yu. M., Ponomarenko V. I., Bezruchko B. P., Prokhorov M. D. Estimation of the stationarity time of infra-slow oscillations of brain potentials using electroencephalogram signals. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 474–484 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-474-484>, EDN: WXXHKE

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

Введение

Анализ электроэнцефалограмм (ЭЭГ) нашел широкое применение в медицине [1–3], нейробиологии [4, 5], психологии [6–9], биофизических [10, 11], физиологических [12, 13] и инженерных [14, 15] исследованиях. Традиционно ЭЭГ анализируют в нескольких полосах частот, которые ассоциируются с проявлением активности различных физиологических процессов. Обычно наиболее активно исследуются составляющие ЭЭГ с частотами 4–100 Гц: тета-, альфа-, бета-, мю- и гамма-ритмы. Более низкочастотный дельта-ритм (0.5–4 Гц), связываемый в норме с процессами сна, остается менее изученным. Отчасти это обусловлено объективными техническими сложностями, связанными с необходимостью регистрировать при анализе дельта-ритма более длительные за-

писи ЭЭГ в связи с относительно длительным характерным периодом этого ритма.

Долгое время считалось, что составляющие ЭЭГ с частотами ниже дельта-диапазона не имеют физиологической интерпретации и имеют стохастическую природу. Однако Аладжалова в экспериментах на животных показала, что составляющие ЭЭГ с частотами менее 0.5 Гц отражают активность центров вегетативной регуляции [16], что было подтверждено в более поздних исследованиях [17, 18]. Для обозначения таких низкочастотных составляющих Аладжаловой был предложен и позже закрепился в научном сообществе термин «сверхмедленные колебания потенциалов» (СМКП) головного мозга [16].

В наших исследованиях было показано, что эти составляющие сигнала ЭЭГ представляют значительный интерес для понимания биофизи-



ческих механизмов регуляции органов и систем организма [19] и являются маркерами, в частности, психофизиологического состояния человека [20–24].

Существенной проблемой при анализе биосигналов является их нестационарность, характеризующаяся изменением свойств сигналов в связи с изменением во времени параметров систем, порождающих их [25–28]. Это явление существенно затрудняет обработку и интерпретацию результатов анализа временных рядов таких сигналов. Для учета и уменьшения влияния этого явления на результаты исследования необходимо оценивать характерное время стационарности – время, на котором изменениями параметров системы, вызывающей сигналы, можно пренебречь. Подобные исследования проводились, в частности, в работе [29], в которой был предложен метод оценки времени стационарности сигналов внутричерепных ЭЭГ пациентов, страдающих эпилепсией. Однако, в силу специфики рассматриваемых в указанной работе патологий, оценки времени стационарности осуществлялись лишь в полосе частот 1–70 Гц.

Информация об изменении свойств динамики сигналов во времени, количестве и длительности квазистационарных сегментов в сигналах ЭЭГ и сигналах системы кровообращения являются важными аспектами анализа этих сигналов. Так, оценка времени квазистационарного поведения дает дополнительную информацию о свойствах сигналов ЭЭГ и последовательности RR-интервалов, что может способствовать более точной настройке методов их анализа и интерпретации полученных результатов. При математическом моделировании систем вегетативной регуляции информация об их времени стационарности позволяет создавать более точные модели, учитывающие, в частности, временные задержки и переходные процессы. В экспериментальных исследованиях наличие оценок характерной длительности квазистационарных сегментов сигналов ЭЭГ и последовательности RR-интервалов помогает выбрать длительность временных окон, в которых анализируются сигналы. Это, в свою очередь, может повысить точность анализа, зафиксировать важные изменения в динамике исследуемых систем, упростить интерпретацию результатов.

Целью данного исследования является анализ времени стационарности СМКП головного мозга по ЭЭГ здоровых добровольцев в состоянии

покоя, а также его сопоставление со свойствами колебаний, наблюдаемых в той же частотной области в последовательности RR-интервалов и интерпретируемых в литературе [16–18, 30, 31], как проявление активности контуров вегетативной регуляции.

1. Методы анализа

1.1. Дизайн исследования и экспериментальные данные

Мы проанализировали записи ЭЭГ и электрокардиограмм (ЭКГ) 50 здоровых мужчин в возрасте 21 ± 3 года (среднее значение $\pm$ стандартное отклонение), имеющих средний уровень физической активности. Для каждого добровольца проводился эксперимент длительностью 6 мин. Во время эксперимента добровольцы находились в состоянии покоя, сидели с открытыми глазами в комфортном кресле, при этом их просили расслабиться. Дыхание добровольцев было произвольным. Регистрация сигналов проводилась в утренние часы через 2 ч после еды.

В процессе эксперимента регистрировались сигналы отведения F3 ЭЭГ по системе наложения электродов 8–3 и сигнал ЭКГ в I стандартном отведении по Эйнтховену методом трехэлектродной регистрации. Все сигналы регистрировались стандартным сертифицированным цифровым полиграфическим устройством – электрокардиографом-анализатором Encefalan_EEGP-19/26 (Медиком МТД, Таганрог, Россия) [32] с частотой дискретизации 250 Гц. Полоса пропускания по всем каналам составляла 0.016–70 Гц.

1.2. Предварительная обработка и анализ данных

Фильтрация. Из ЭКГ мы выделяли последовательность RR-интервалов. Затем последовательность RR-интервалов была линейно интерполирована и перевыбрана до частоты дискретизации 250 Гц для получения эквидистантной последовательности, в соответствии с рекомендациями [30, 31]. Сигнал эквидистантной последовательности RR-интервалов анализировался нами в частотных диапазонах: LF (0.05–0.15 Гц), который связывают с процессами симпатической регуляции ритма сердца, и HF (0.15–0.50 Гц), который ассоциируют с процессами парасимпатической регуляции ритма сердца и респираторными влияниями [33, 34].

Сигналы отведений ЭЭГ анализировались в δ_1 (0.05–0.15 Гц) и δ_2 (0.15–0.50 Гц) частотных диапазонах, которые связывают преимущественно с активностью центров автономной



регуляции [16–18]. Дополнительно анализ ЭЭГ проводился в традиционно используемых диапазонах: δ (0.5–4.0 Гц), θ (4.0–8.0 Гц), α (8.0–13.0 Гц). Частотные составляющие в исследуемых диапазонах выделялись прямоугольным полосовым фильтром. В табл. 1 представлены исследуемые диапазоны частот, их границы и длительности характерных периодов в секундах.

Расчет матрицы расстояний. Для анализа времени стационарности исследуемых колебаний в сигналах ЭЭГ и последовательности RR-интервалов, а также для оценки количества и длительности квазистационарных сегментов нами предложен следующий метод. Наблюдаемый временной ряд $X = \{x_n\}_{n=0}^{N-1}$ переменной $x(t)$, где n – номер точки ряда, а N – длина временного ряда, разбивался на M неперекрывающихся сегментов $X_m = \{x_n\}_{n=mT}^{mT+T-1}$ длиной T ; m – номер сегмента, который изменялся от 0 до $M = \lfloor N/T \rfloor$ (квадратные скобки обозначают округление в меньшую сторону до ближайшего целого числа). Значение T было выбрано равным трем характерным периодам колебаний, указанным в табл. 1 для анализируемых диапазонов частот.

На каждом сегменте X_m фрагмент временного ряда переменной $x(t)$ аппроксимировался полиномом 5-й степени: $f_m(t) = \sum_{p=0}^5 a_{pm}t^p$, где a_{pm} – коэффициенты полинома, которые находились с помощью метода наименьших квадратов. Для каждой пары сегментов X_m с номерами $m = i$ и $m = j$ вычислялось евклидово расстояние $d_{ij} = \sum_{p=0}^5 (a_{pi} - a_{pj})^2$ между коэффициентами аппроксимирующих полиномов $f_i(t)$ и $f_j(t)$. Величина d_{ij} служит количественной мерой отличия исследуемых колебаний на двух сегментах временного ряда. Чем сильнее различаются коэффициенты двух полиномов, тем выше значение d_{ij} . Рассчитанные между всеми парами сегментов временного ряда значения d_{ij} формируют матрицу расстояний.

Кластеризация квазистационарных сегментов. Границы квазистационарных сегментов временного ряда определялись через поэтапное объединение в кластеры соседних по времени сегментов. Сначала мы задавали число кластеров k , равное количеству сегментов M , то есть первоначально каждый кластер соответствовал одному набору коэффициентов полинома $f_m(t)$. Затем число кластеров последовательно уменьшалось на единицу за счет объединения двух соседних сегментов, имеющих минимальное значение d_{ij} ,

где $j = i - 1$ или $j = i + 1$. В предельном случае все сегменты оказываются объединены в один кластер.

Для определения оптимального числа кластеров k^* использовался метод силуэта [35]. На каждой итерации объединения сегментов временного ряда (то есть для разных k) мы рассчитывали среднее расстояние b между сегментом X_m и всеми остальными сегментами, входящими в тот же кластер, что и X_m , а также среднее расстояние c между сегментом X_m и сегментами ближайшего соседнего кластера. После этого вычислялись коэффициент силуэта $S_m = (c - b) / \max(b, c)$ для сегмента X_m и средний для всех сегментов коэффициент силуэта $\bar{S}$. Оптимальное число кластеров соответствует $k = k^*$, при котором наблюдается максимум зависимости $\bar{S}(k)$.

Сегменты, оказавшиеся в одном кластере, считаются далее одним квазистационарным участком временного ряда, то есть коэффициенты полиномов, аппроксимирующих временной ряд на этих сегментах, наиболее близки друг другу в смысле используемого метода кластеризации. Расчет матриц расстояний d_{ij} между сегментами и процедура кластеризации проводились для всех рассматриваемых диапазонов частот сигналов ЭЭГ и RR-интервалов. Для каждого частотного диапазона проводился статистический анализ длительностей τ полученных квазистационарных участков.

Модель для тестирования метода. Для проверки работоспособности метода мы провели численный эксперимент на синтетическом сигнале. Для генерации δ_2 -компоненты ЭЭГ с собственной частотой 0.25 Гц использован генератор Ван дер Поля со стохастическим воздействием. Модель описывается следующей системой уравнений:

$$\ddot{x}(t) - \mu(t)(1 - x^2(t))\dot{x}(t) + \omega_0^2 x(t) + D_\xi \xi(t) = 0, \quad (1)$$

$$y(t) = A(t)x(t) + D_\zeta \zeta(t). \quad (2)$$

Здесь $x(t)$ – динамическая переменная, описывающая автоколебательные составляющие в δ_2 -диапазоне; $y(t)$ – сигнал, моделирующий составляющие ЭЭГ в δ_2 -диапазоне; $\mu(t)$ – управляющий параметр, значение которого перестраивалось для моделирования нестационарности; $\omega_0 = 2\pi f$ где f – собственная частота колебаний, равная 0.25 Гц; $\xi(t)$ – динамический розовый шум ($1/f$); $D_\xi = 0.5$ – дисперсия динамического шума; $A(t)$ – параметр нормировки для учета модуляции амплитуды экспериментального сигнала физиологическими процессами; $\zeta(t)$ – измерительный

**Границы исследуемых диапазонов частот сигналов ЭЭГ и RR-интервалов и соответствующие им длительности характерных периодов колебаний****Boundaries of the studied frequency ranges of EEG signals and RR intervals and the corresponding durations of characteristic oscillation periods**

Сигнал/Signal	Диапазон/ Range	Границы, Гц/Boundaries, Hz	Характерный период, с/Characteristic period, s
ЭЭГ/EEG	δ_1	0.05–0.15	10
	δ_2	0.15–0.50	4
	δ	0.5–4.0	0.5
	θ	4.0–8.0	0.2
	α	8.0–13.0	0.1
RR	LF	0.05–0.15	10
	HF	0.15–0.50	4

белый гауссовский шум с нулевым средним; $D_\zeta = 0.15A(t)$ – дисперсия измерительного шума.

Численное интегрирование проводилось методом Эйлера с шагом 0.004 с. В ходе численного интегрирования отбрасывался переходной процесс длительностью 30 с. Далее генерировался нестационарный временной ряд длительностью 1200 с. Для моделирования эффекта нестационарности параметры $\mu(t)$ и $A(t)$ скачкообразно изменялись каждые 120 с (30 характерных периодов) между двумя наборами параметров: $\mu = 0.05$, $A = 1.1$ и $\mu = 0.15$, $A = 1.0$.

2. Полученные результаты

2.1. Результаты тестирования метода на модели

Предложенный метод был применен к сигналу модели, описываемой уравнениями (1) и (2). Расчет матрицы расстояний и последующая кластеризация позволили идентифицировать все квазистационарные участки. Длительность диагностированных участков квазистационарности составила 114 (96;144) с (медиана (первый квартиль; третий квартиль)), что хорошо соответствует априори заданному времени стационарности, равному 120 с. Тем самым, был сделан вывод о работоспособности предложенного подхода.

2.2. Результаты анализа экспериментальных данных

На рис. 1, а приведен 6-минутный временной ряд колебаний в частотном диапазоне δ_2 сигнала ЭЭГ для добровольца #1. Временной ряд разделен на 30 сегментов длительностью по 12 с. Границы сегментов показаны вертикальными пунктирными линиями. На рис. 1, б представлена в графическом виде матрица расстояний d_{ij} между коэффициентами полиномов $f_i(t)$

и $f_j(t)$, аппроксимирующих временной ряд на сегментах X_i и X_j . Черный цвет соответствует малым значениям d_{ij} , а белый цвет – большим значениям d_{ij} .

Из рис. 1, б видно, что некоторые соседние по времени сегменты временного ряда имеют близкие значения d_{ij} , образуя участки квазистационарной динамики. Такие участки чередуются с участками, на которых значения d_{ij} существенно отличаются, что говорит о наличии нестационарной динамики исследуемых колебаний.

Рис. 2 иллюстрирует метод определения оптимального числа кластеров для описания квазистационарной динамики колебаний, показанных на рис. 1, а. На рис. 2, а построена зависимость $\tilde{S}(k)$, которая имеет максимум при $k = k^* = 10$ (показан стрелкой). На рис. 2, б представлена матрица расстояний d_{ij} , иллюстрирующая результат кластеризации. Сегменты временного ряда, имеющие близкие значения коэффициентов аппроксимирующих полиномов, объединены в кластеры. Границы квазистационарных участков показаны на рис. 2, в вертикальными пунктирными линиями. Длительность самого продолжительного участка квазистационарной динамики на рис. 2, в составляет 144 с.

Результаты анализа статистики длительностей участков квазистационарной динамики исследуемых колебаний представлены на рис. 3, а в секундах, а на рис. 3, б – в характерных периодах колебаний для соответствующего частотного диапазона. Наибольшую абсолютную длительность квазистационарных участков в сигналах ЭЭГ, как ожидалось, демонстрируют колебания в самых низкочастотных диапазонах δ_1 и δ_2 , рис. 3, а. Однако в единицах характерного периода колебаний наибольшую длительность квазистационарной динамики демонстрируют колебаний в δ -диапазоне ЭЭГ (см. рис. 3, б). Отме-

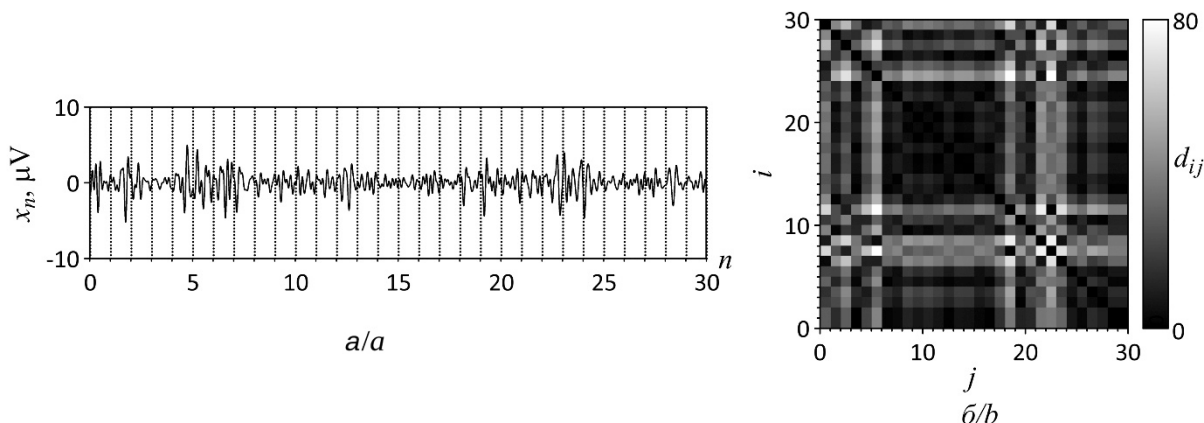


Рис. 1. Временной ряд δ_2 -ритма сигнала ЭЭГ (а); матрица расстояний d_{ij} между сегментами временного ряда (б)
Fig. 1. Time series of the δ_2 -rhythm of the EEG signal (a), matrix of distances d_{ij} between the segments of the time series (b)

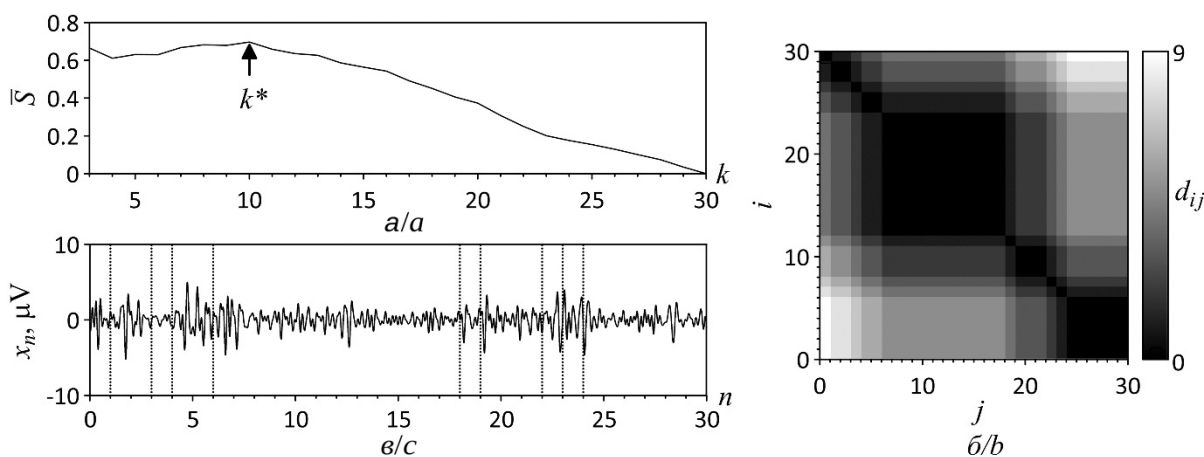


Рис. 2. Зависимость среднего коэффициента силуэта $\bar{S}$ от числа кластеров k (а); матрица расстояний d_{ij} , на которой сегменты с квазистационарной динамикой объединены в кластеры (б); временной ряд δ_2 -ритма сигнала ЭЭГ, на котором границы квазистационарных участков показаны вертикальными пунктирными линиями (в)

Fig. 2. Dependence of the average silhouette coefficient $\bar{S}$ on the number of clusters k (a), distance matrix d_{ij} , in which segments with quasi-stationary dynamics are combined into clusters (b), time series of the δ_2 -rhythm of the EEG signal, in which the boundaries of quasi-stationary sections are shown by vertical dotted lines (c)

тим, что колебания в δ_1 -диапазоне сигнала ЭЭГ и колебания в LF-диапазоне последовательно RR-интервалов имеют практически одинаковое время стационарности. Аналогично близкие значения длительности квазистационарной динамики демонстрируют колебания в δ_2 -диапазоне сигнала ЭЭГ и колебания в HF-диапазоне последовательности RR-интервалов.

3. Обсуждение результатов

В ходе нашего исследования были проведены оценки длительности квазистационарных участков в сигналах ЭЭГ и RR-интервалов. Для СМКП головного мозга и последовательности RR-интервалов такие исследования проведены впервые. Результаты оценки времени стационарности коле-

баний в более высокочастотных диапазонах ЭЭГ соответствуют по порядку величины результатам других работ [29, 36]. Показано, что характерные длительности квазистационарных участков в сигнале ЭЭГ отличаются для разных ритмов (см. рис. 3), что подтверждает существующие представления о различиях в физиологических механизмах, отвечающих за формирование колебаний в этих частотных диапазонах. При этом характерные времена стационарности СМКП головного мозга и соответствующих им частотных составляющих RR-интервалов оказываются близки друг к другу, что является аргументом в пользу проявления близких биофизических механизмов в различных сигналах (ЭЭГ и RR-интервалах) и косвенно служит подтверждением выводов, сделанных в работах [16–19]. Полученные резуль-

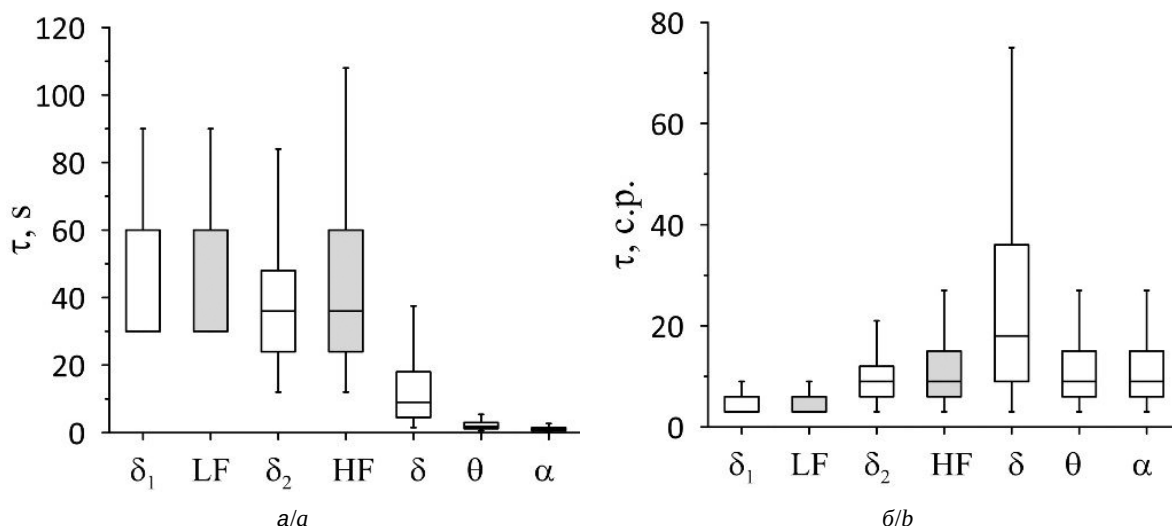


Рис. 3. Длительность участков квазистационарной динамики δ_1 , δ_2 , δ , θ и α -ритмов сигналов ЭЭГ и LF- и HF-составляющих последовательности RR-интервалов, выраженная в секундах (а) и в характерных периодах колебаний (с.р.) в соответствующем частотном диапазоне (б). Границы прямоугольников соответствуют первому и третьему квартилю распределений, а горизонтальная линия внутри прямоугольников – медиане их распределений. Вертикальными линиями отмечены минимальное и максимальное по выборке значения

Fig. 3. Duration of sections of quasi-stationary dynamics of δ_1 , δ_2 , δ , θ , and α -rhythms of EEG signals and LF and HF components of the sequence of RR-interval, expressed in seconds (a) and in characteristic periods of oscillations (c.p.) in the corresponding frequency range (b). The boundaries of the rectangles correspond to the first and third quartiles of the distributions, and the horizontal line inside the rectangles corresponds to the median of their distributions. The vertical lines mark the minimum and maximum values for the sample

таты вносят вклад в фундаментальные теоретические представления о биофизических закономерностях, лежащих в основе формирования СМКП головного мозга и их связи с составляющими последовательности RR-интервалов.

Найденные оценки абсолютных значений длительности квазистационарных участков в исследуемых сигналах относятся к прикладным результатам данной работы. Наличие таких данных, на наш взгляд, позволит настраивать некоторые параметры методов анализа рассматриваемых сигналов из априорных соображений, в частности, выбирать длительность окон для анализа во временной области. Это может повысить точность различных методов анализа и упростит интерпретацию результатов.

Данное исследование оставляет открытым вопрос о потенциальной возможности изменения характерных времен стационарности как при развитии некоторых патологий, так и при изменении психофизиологического состояния человека (например, при выполнении умственных заданий или физической нагрузке). Этот важный вопрос требует проведения отдельных исследований, которые планируются нами в перспективе в развитие данной работы.

К техническому ограничению использования метода можно также отнести зависимость результатов анализа от начальных фаз сегментов временного ряда. При анализе непериодических сигналов на интервалах одной и той же длительности укладывается неравное количество периодов колебаний. Это приводит к смещению начальных фаз сегментов друг относительно друга, что в свою очередь оказывает влияние на значения коэффициентов аппроксимирующих полиномов. Выбор целого числа характерных периодов колебаний в качестве длительности сегмента уменьшает влияние этого эффекта на результаты анализа, хотя и не компенсирует его полностью. Поэтому в общем случае, эффект влияния расстройки начальных фаз сегментов на квазистационарных участках может снижать чувствительность анализа. Решением может являться использование в качестве базиса тригонометрических полиномов (вместо степенных), для которых возможна компенсация начальной фазы. Этот нюанс является предметом отдельного исследования в будущем.

Заключение

В работе предложен метод оценки характерного времени стационарности колебаний раз-



личных частотных составляющих сигналов ЭЭГ и последовательности RR-интервалов, основанный на анализе временных рядов. Метод включает этапы разбиения временного ряда на сегменты, построение аппроксимирующих полиномов для каждого сегмента, расчет матрицы евклидовых расстояний между коэффициентами полиномов, кластеризацию сегментов для определения участков квазистационарной динамики и анализ длительностей объединенных сегментов для получения статистических характеристик.

Значительной новизной исследования является оценка характерных времен квазистационарной динамики сверхмедленных колебаний потенциала головного мозга с частотой ниже 0.5 Гц и соответствующих частотных составляющих последовательности RR-интервалов.

В ходе анализа временных реализаций сигналов ЭЭГ и последовательности RR-интервалов 50 здоровых добровольцев выявлено, что длительности квазистационарных участков варьируются в зависимости от частоты исследуемых колебаний. Наибольшие абсолютные значения времени стационарности (медиана, первый квартиль, третий квартиль) получены для сверхмедленных колебаний в сигналах ЭЭГ с частотами 0.05–0.15 Гц и 0.15–0.50 Гц: 45, 30, 60 с и 36, 24, 48 с соответственно. Более высокочастотные колебания в сигналах ЭЭГ показали значительно и. меньшие абсолютные времена стационарности: 9; 4.5; 18 с; 1.8; 1.2; 3.0 с и 0.9; 0.6; 1.5 с для диапазонов δ , θ и α соответственно. Обнаружено, что длительности квазистационарных участков сверхмедленных колебаний в ЭЭГ хорошо соответствуют длительностям участков квазистационарной динамики последовательности RR-интервалов в частотных диапазонах, ассоциируемых с процессами симпатической и парасимпатической регуляции ритма сердца.

Список литературы

1. Зенков Л. Р. Клиническая электроэнцефалография (с элементами эпилептологии). Руководство для врачей. М. : МЕДпресс-информ, 2023. 360 с.
2. Александров М. В., Иванов Л. Б., Лытаев С. А., Черный В. С., Александрова Т. В., Чухловин А. А., Костенко И. А., Повалюхина Е. С. Электроэнцефалография: руководство. СПб. : СпецЛит, 2020. 224 с.
3. Ситникова Е. Ю., Короновский А. А., Храмов А. Е. Анализ электрической активности головного мозга при абсанс-эпилепсии: прикладные аспекты нелинейной динамики // Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика. 2011. Т. 19, № 6. С. 173–182. <https://doi.org/10.18500/0869-6632-2011-19-6-173-182>
4. Zhang H., Zhou Q., Qi C., Chen H., Hu X., Li W., Bai Y., Han J., Wang Y., Liang Z., Chen D., Cong F., Yan J., Li X. The applied principles of EEG analysis methods in neuroscience and clinical neurology // Military Medical Research, 2023. Vol. 10. Art. 67. <https://doi.org/10.1186/s40779-023-00502-7>
5. Симонов А. Ю., Казанцев В. Б. Модель возникновения лавинообразных биоэлектрических разрядов в нейронных сетях мозга // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 93, вып. 8. С. 516–521. EDN: NTPSLN
6. Thornton J., D'Souza R., Tandon R. Artificial intelligence and psychiatry research and practice // Asian J. Psychiatr. 2023. Vol. 81. Art. 103509. <https://doi.org/10.1016/j.ajp.2023.103509>
7. Maksimenko V. A., Runnova A. E., Zhuravlev M. O., Protasov P., Kulanin R., Pisarchik A. N., Hramov A. E., Khramova M. V. Human personality reflects spatio-temporal and time-frequency EEG structure // PLoS ONE. 2018. Vol. 13, № 9. Art. e0197642. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0197642>
8. Гуляев С. А. Электроэнцефалография и исследования функциональной активности головного мозга // Русский журнал детской неврологии. 2021. Т. 16, № 4. С. 59–68. <https://doi.org/10.17650/2073-8803-2021-16-4-59-68>
9. Мельникова Т. С., Лапин И. А., Саркисян В. В. Обзор использования когерентного анализа ЭЭГ в психиатрии // Социальная и клиническая психиатрия. 2009. Т. 19, № 1. С. 90–94. EDN: KDYEXZ
10. Nunez P. L., Srinivasan R. Electric fields of the brain: The neurophysics of EEG. Oxford : Oxford University Press, 2006. 611 p. <https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780195050387.001.0001>
11. Kuc A., Korchagin S., Maksimenko V. A., Shusharina N., Hramov A. E. Combining statistical analysis and machine learning for EEG scalp topograms classification // Front. Syst. Neurosci. 2021. Vol. 15. Art. 716897. <https://doi.org/10.3389/fnsys.2021.716897>
12. Steriade M. Grouping of brain rhythms in corticothalamic systems // Neuroscience. 2006. Vol. 137, № 4. P. 1087–1106. <https://doi.org/10.1016/j.neuroscience.2005.10.029>
13. Павлов А. Н., Храмов А. Е., Короновский А. А., Ситникова Е. Ю., Макаров В. А., Овчинников А. А. Вейвлет-анализ в нейродинамике // Успехи физических наук. 2012. Т. 182, № 9. С. 905–939. <https://doi.org/10.3367/UFGN.0182.201209a.0905>
14. Гордлеева С. Ю., Лобов С. А., Миронов В. И., Ка-стальский И. А., Лукьянов М. В., Крылова Н. П., Мухина И. В., Каплан А. Я., Казанцев В. Б. Разработка аппаратно-программного комплекса по управлению роботизированными устройствами посредством био-электрических сигналов мозга и мышц // Наука и инновации в медицине. 2016. Т. 1, № 3. С. 77–82. <https://doi.org/10.35693/2500-1388-2016-0-3-77-82>
15. Gordleeva S. Y., Lobov S. A., Mironov V. I., Kastal'skiy I. A., Lukoyanov M. V., Krylova N. P., Mukhina I. V., Kaplan A. Ya., Kazantsev V. B. Real-time EEG–EMG human–machine interface-based control system for a lower-limb exoskeleton // IEEE Access. 2020. Vol. 8. P. 84070–84081. <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2020.2991812>



16. Aladjalova N. A. Infra-slow rhythmic oscillations of the steady potential of the cerebral cortex // *Nature*. 1957. Vol. 179, iss. 4567. P. 957–959. <https://doi.org/10.1038/179957a0>
17. Knyazev G. G. EEG delta oscillations as a correlate of basic homeostatic and motivational processes // *Neuroscience & Biobehavioral Reviews*. 2012. Vol. 36, iss. 1. P. 677–695. <https://doi.org/10.1016/j.neubiorev.2011.10.002>
18. Lőrincz M. L., Geall F., Bao Y., Crunelli V., Hughes S. W. ATP-dependent infra-slow (<0.1 Hz) oscillations in thalamic networks // *PLoS ONE*. 2009. Vol. 4, iss. 2. Art. e4447. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0004447>
19. Karavaev A. S., Kiselev A. R., Runnova A. E., Zhuravlev M. O., Borovkova E. I., Prokhorov M. D., Hramov A. E. Synchronization of infra-slow oscillations of brain potentials with respiration // *Chaos*. 2018. Vol. 28, iss. 8. Art. 081102. <https://doi.org/10.1063/1.5046758>
20. Borovkova E. I., Prokhorov M. D., Kiselev A. R., Hramkov A. N., Mironov S. A., Penzel T. Directional couplings between the respiration and parasympathetic control of the heart rate during sleep and wakefulness in healthy subjects at different ages // *Frontiers in Network Physiology*. 2022. Vol. 2. Art. 942700. <https://doi.org/10.3389/fnetp.2022.942700>
21. Ponomarenko V. I., Karavaev A. S., Borovkova E. I., Hramkov A. N., Penzel T. Decrease of coherence between the respiration and parasympathetic control of the heart rate with aging // *Chaos*. 2021. Vol. 31, iss. 7. Art. 073105. <https://doi.org/10.1063/5.0056624>
22. Karavaev A. S., Skazkina V. V., Borovkova E. I., Prokhorov M. D., Penzel T. Synchronization of the processes of autonomic control of blood circulation in humans is different in the awake state and in sleep stages // *Frontiers in Neuroscience*. 2022. Vol. 15. Art. 791510. <https://doi.org/10.3389/fnins.2021.791510>
23. Prokhorov M. D., Borovkova E. I., Hramkov A. N., Karavaev A. S. Changes in the power and coupling of infra-slow oscillations in the signals of EEG leads during stress-inducing cognitive tasks // *Applied Sciences*. 2023. Vol. 13, iss. 14. Art. 8390. <https://doi.org/10.3390/app13148390>
24. Borovkova E. I., Hramkov A. N., Dubinkina E. S., Prokhorov M. D. Biomarkers of the psychophysiological state during cognitive tasks estimated from the signals of the brain, cardiovascular and respiratory systems // *Eur. Phys. J. Spec. Top.* 2023. Vol. 232, № 5. P. 625–633. <https://doi.org/10.1140/epjs/s11734-022-00734-z>
25. Paluš M. Nonlinearity in normal human EEG: Cycles, temporal asymmetry, nonstationarity and randomness, not chaos // *Biological Cybernetics*. 1996. Vol. 75, № 5. P. 389–396. <https://doi.org/10.1007/s004220050304>
26. Gribkov D., Gribkova V. Learning dynamics from nonstationary time series: Analysis of electroencephalograms // *Phys. Rev. E*. 2000. Vol. 61, № 6. P. 6538–6545. <https://doi.org/10.1103/physreve.61.6538>
27. Каплан А. Я. Нестационарность ЭЭГ: методологический и экспериментальный анализ // *Успехи физиологических наук*. 1998. Т. 29, № 3. С. 50–55. PMID: 9749456
28. Kohlmorgen J., Müller K.-R., Pawelzik K., Rittweger J. Identification of nonstationary dynamics in physiological recordings // *Biological Cybernetics*. 2000. Vol. 83, № 1. P. 73–84. <https://doi.org/10.1007/s004220000144>
29. Dikanov T., Smirnov D., Wennberg R., Velazquez J. L. P., Bezruchko B. EEG nonstationarity during intracranially recorded seizures: Statistical and dynamical analysis // *Clinical Neurophysiology*. 2005. Vol. 116, iss. 8. P. 1796–1807. <https://doi.org/10.1016/j.clinph.2005.04.013>
30. Task Force of the European Society of Cardiology and the North American Society of Pacing and Electrophysiology. Heart rate variability: Standards of measurement, physiological interpretation, and clinical use // *Circulation*. 1996. Vol. 93, iss. 5. P. 1043–1065. <https://doi.org/10.1161/01.CIR.93.5.1043>
31. Баевский Р. М., Иванов Г. Г., Чирейкин Л. В., Гаврилушкин А. П., Довгалецкий П. Я., Кукушкин Ю. А., Миронова Т. Ф., Прилуцкий Д. А., Семенов А. В., Федоров В. Ф., Флейшман А. Н., Медведев М. М., Чирейкин Л. В. Анализ вариабельности сердечного ритма при использовании различных электрокардиографических систем (часть 1) // *Вестник аритмологии*. 2002. № 24. С. 65–86.
32. Медимком МТД. Электроэнцефалограф-регистратор. URL: <http://medicom-mtd.com/htm/Products/eegr-main.html> (дата обращения: 14.10.2025).
33. Ishbulatov Y. M., Karavaev A. S., Kiselev A. R., Simonyan M. A., Prokhorov M. D., Ponomarenko V. I., Mironov S. A., Gridnev V. I., Bezruchko B. P., Shvartz V. A. Mathematical modeling of cardiovascular autonomic control in healthy subjects during a passive head-up tilt test // *Scientific Reports*. 2020. Vol. 10, iss. 1. Art. 16550. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-71532-7>
34. Prokhorov M. D., Karavaev A. S., Ishbulatov Y. M., Ponomarenko V. I., Kiselev A. R., Kurths J. Interbeat interval variability versus frequency modulation of heart rate // *Phys. Rev. E*. 2021. Vol. 103, № 4. Art. 042404. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.103.042404>
35. Rousseeuw P. J. Silhouettes: A graphical aid to the interpretation and validation of cluster analysis // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 1987. Vol. 20. P. 53–65. [https://doi.org/10.1016/0377-0427\(87\)90125-7](https://doi.org/10.1016/0377-0427(87)90125-7)
36. Blanco S., Garcia H., Quiroga R. Q., Romanelli L., Rosso O. A. Stationarity of the EEG series // *IEEE Engineering in Medicine and Biology Magazine*. 1995. Vol. 14, iss. 4. P. 395–399. <https://doi.org/10.1109/51.395321>

References

1. Zenkov L. R. *Klinicheskaya elektroencefalografiya (s elementami epileptologii). Rukovodstvo dlya vrachey [Clinical Electroencephalography (with Elements of Epileptology). Guide for Physicians]*. Moscow, MEDpress-inform Publ., 2023. 360 p. (in Russian).
2. Aleksandrov M. V., Ivanov L. B., Lytayev S. A., Cherny V. S., Aleksandrova T. V., Chukhlovina A. A., Kostenko I. A., Povalukhina E. S. *Elektroencefalografiya: rukovodstvo [Electroencephalography: A guide]*. Saint Petersburg, SpetsLit Publ., 2020. 224 p. (in Russian).



3. Sitnikova E. Yu., Koronovskii A. A., Hramov A. E. Analysis of epileptic activity of brain in case of absence epilepsy: Applied aspects of nonlinear dynamics. *Izvestiya VUZ. Applied Nonlinear Dynamics*, 2011, vol. 19, no. 6, pp. 173–182. <https://doi.org/10.18500/0869-6632-2011-19-6-173-182> (in Russian).
4. Zhang H., Zhou Q., Qi C., Chen H., Hu X., Li W., Bai Y., Han J., Wang Y., Liang Z., Chen D., Cong F., Yan J., Li X. The applied principles of EEG analysis methods in neuroscience and clinical neurology. *Military Medical Research*, 2023, vol. 10, art. 67. <https://doi.org/10.1186/s40779-023-00502-7>
5. Simonov A. Y., Kazantsev V. B. Model of the appearance of avalanche bioelectric discharges in neural networks of the brain. *JETP Lett.*, 2011, vol. 93, pp. 470–475. <https://doi.org/10.1134/S0021364011080133>
6. Thornton J., D'Souza R., Tandon R. Artificial intelligence and psychiatry research and practice. *Asian J. Psychiatr.*, 2023, vol. 81, art. 103509. <https://doi.org/10.1016/j.ajp.2023.103509>
7. Maksimenko V. A., Runnova A. E., Zhuravlev M. O., Protasov P., Kulanin R., Pisarchik A. N., Hramov A. E., Khramova M. V. Human personality reflects spatio-temporal and time-frequency EEG structure. *PLoS ONE*, 2018, vol. 13, iss. 9, art. e0197642. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0197642>
8. Gulyaev S. A. Electroencephalography and analysis of functional brain activity. *Russ. J. Child Neurol.*, 2021, vol. 16, no. 4, pp. 59–68 (in Russian). <https://doi.org/10.17650/2073-8803-2021-16-4-59-68>
9. Melnikova T. S., Lapin I. A., Sarkisyan V. V. Use of coherent EEG analysis in psychiatry. *Soc. Clin. Psychiatry*, 2009, vol. 19, no. 1, pp. 90–94 (in Russian). EDN: KDYEXZ
10. Nunez P. L., Srinivasan R. *Electric Fields of the Brain: The Neurophysics of EEG*. Oxford, Oxford University Press, 2006. 611 p. <https://doi.org/10.1093/acprof:oso/9780195050387.001.0001>
11. Kuc A., Korchagin S., Maksimenko V. A., Shusharina N., Hramov A. E. Combining statistical analysis and machine learning for EEG scalp topograms classification. *Front. Syst. Neurosci.*, 2021, vol. 15, art. 716897. <https://doi.org/10.3389/fnsys.2021.716897>
12. Steriade M. Grouping of brain rhythms in corticothalamic systems. *Neuroscience*, 2006, vol. 137, iss. 4, pp. 1087–1106. <https://doi.org/10.1016/j.neuroscience.2005.10.029>
13. Pavlov A. N., Hramov A. E., Koronovskii A. A., Sitnikova E. Yu., Makarov V. A., Ovchinnikov A. A. Wavelet analysis in neurodynamics. *Phys. Usp.*, 2012, vol. 55, pp. 845–875. <https://doi.org/10.3367/UFNe.0182.201209a.0905>
14. Gordleeva S. Y., Lobov S. A., Mironov V. I., Kastalskiy I. A., Lukoyanov M. V., Krilova N. P., Mukhina I. V., Kaplan A. Y., Kazantsev V. B. Development of the hardware and software complex controlling robotic devices by means of bioelectric signals of the brain and muscles. *Nauka i Innovatsii v Meditsine [Science and Innovations in Medicine]*, 2016, vol. 1, no. 3, pp. 77–82 (in Russian). <https://doi.org/10.35693/2500-1388-2016-0-3-77-82>
15. Gordleeva S. Y., Lobov S. A., Mironov V. I., Kastalskiy I. A., Lukoyanov M. V., Krylova N. P., Mukhina I. V., Kaplan A. Ya., Kazantsev V. B. Real-time EEG–EMG human–machine interface-based control system for a lower-limb exoskeleton. *IEEE Access*, 2020, vol. 8, pp. 84070–84081. <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2020.2991812>
16. Aladjalova N. A. Infra-slow rhythmic oscillations of the steady potential of the cerebral cortex. *Nature*, 1957, vol. 179, iss. 4567, pp. 957–959. <https://doi.org/10.1038/179957a0>
17. Knyazev G. G. EEG delta oscillations as a correlate of basic homeostatic and motivational processes. *Neuroscience & Biobehavioral Reviews*, 2012, vol. 36, iss. 1, pp. 677–695. <https://doi.org/10.1016/j.neubiorev.2011.10.002>
18. Lörincz M. L., Geall F., Bao Y., Crunelli V., Hughes S. W. ATP-dependent infra-slow (<0.1 Hz) oscillations in thalamic networks. *PLoS ONE*, 2009, vol. 4, iss. 2, art. e4447. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0004447>
19. Karavaev A. S., Kiselev A. R., Runnova A. E., Zhuravlev M. O., Borovkova E. I., Prokhorov M. D., Hramov A. E. Synchronization of infra-slow oscillations of brain potentials with respiration. *Chaos*, 2018, vol. 28, iss. 8, art. 081102. <https://doi.org/10.1063/1.5046758>
20. Borovkova E. I., Prokhorov M. D., Kiselev A. R., Hramkov A. N., Mironov S. A., Penzel T. Directional couplings between the respiration and parasympathetic control of the heart rate during sleep and wakefulness in healthy subjects at different ages. *Frontiers in Network Physiology*, 2022, vol. 2, art. 942700. <https://doi.org/10.3389/fnetp.2022.942700>
21. Ponomarenko V. I., Karavaev A. S., Borovkova E. I., Hramkov A. N., Penzel T. Decrease of coherence between the respiration and parasympathetic control of the heart rate with aging. *Chaos*, 2021, vol. 31, iss. 7, art. 073105. <https://doi.org/10.1063/5.0056624>
22. Karavaev A. S., Skazkina V. V., Borovkova E. I., Prokhorov M. D., Penzel T. Synchronization of the processes of autonomic control of blood circulation in humans is different in the awake state and in sleep stages. *Frontiers in Neuroscience*, 2022, vol. 15, art. 791510. <https://doi.org/10.3389/fnins.2021.791510>
23. Prokhorov M. D., Borovkova E. I., Hramkov A. N., Karavaev A. S. Changes in the power and coupling of infra-slow oscillations in the signals of EEG leads during stress-inducing cognitive tasks. *Applied Sciences*, 2023, vol. 13, iss. 14, art. 8390. <https://doi.org/10.3390/app13148390>
24. Borovkova E. I., Hramkov A. N., Dubinkina E. S., Prokhorov M. D. Biomarkers of the psychophysiological state during cognitive tasks estimated from the signals of the brain, cardiovascular and respiratory systems. *Eur. Phys. J. Spec. Top.*, 2023, vol. 232, iss. 5, pp. 625–633. <https://doi.org/10.1140/epjs/s11734-022-00734-z>
25. Paluš M. Nonlinearity in normal human EEG: Cycles, temporal asymmetry, nonstationarity and randomness, not chaos. *Biological Cybernetics*, 1996, vol. 75, no. 5, pp. 389–396. <https://doi.org/10.1007/s004220050304>
26. Gribkov D., Gribkova V. Learning dynamics from nonstationary time series: Analysis of electroencephalograms.



- Phys. Rev. E*, 2000, vol. 61, no. 6, pp. 6538–6545. <https://doi.org/10.1103/physreve.61.6538>
27. Kaplan A. Ya. The nonstationary EEG: Methodological and experimental analysis // *Usp. Fiziol. Nauk*, 1998, vol. 29, no. 3, pp. 35–55 (in Russian). PMID: 9749456
28. Kohlmorgen J., Müller K.-R., Pawelzik K., Rittweger J. Identification of nonstationary dynamics in physiological recordings. *Biological Cybernetics*, 2000, vol. 83, no. 1, pp. 73–84. <https://doi.org/10.1007/s004220000144>
29. Dikanov T., Smirnov D., Wennberg R., Velazquez J. L. P., Bezruchko B. EEG nonstationarity during intracranially recorded seizures: Statistical and dynamical analysis. *Clinical Neurophysiology*, 2005, vol. 116, iss. 8, pp. 1796–1807. <https://doi.org/10.1016/j.clinph.2005.04.013>
30. Task Force of the European Society of Cardiology and the North American Society of Pacing and Electrophysiology. Heart rate variability: Standards of measurement, physiological interpretation, and clinical use. *Circulation*, 1996, vol. 93, iss. 5, pp. 1043–1065. <https://doi.org/10.1161/01.CIR.93.5.1043>
31. Baevskiy R. M., Ivanov G. G., Chireykin L. V., Gavrilushkin A. P., Dovgalevsky P. Ya., Kukushkin Yu. A., Mironova T. F., Prilutsky D. A., Semenov A. V., Fedorov V. F., Fleishman A. N., Medvedev M. M., Chireikin L. V. Analysis of heart rate variability under using various electrocardiographic systems (Part 1). *Vestnik Aritmologii*, 2002, no. 24, pp. 65–86.
32. *Medicom MTD. Electroencephalograph-recorder*. Available at: <http://medicom-mtd.com/htm/Products/eeg-main.html> (accessed October 14, 2025).
33. Ishbulatov Y. M., Karavaev A. S., Kiselev A. R., Simonyan M. A., Prokhorov M. D., Ponomarenko V. I., Mironov S. A., Gridnev V. I., Bezruchko B. P., Shvartz V. A. Mathematical modeling of cardiovascular autonomic control in healthy subjects during a passive head-up tilt test. *Scientific Reports*, 2020, vol. 10, iss. 1, art. 16550. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-71532-7>
34. Prokhorov M. D., Karavaev A. S., Ishbulatov Y. M., Ponomarenko V. I., Kiselev A. R., Kurths J. Interbeat interval variability versus frequency modulation of heart rate. *Phys. Rev. E*, 2021, vol. 103, no. 4, art. 042404. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.103.042404>
35. Rousseeuw P. J. Silhouettes: A graphical aid to the interpretation and validation of cluster analysis. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 1987, vol. 20, pp. 53–65. [https://doi.org/10.1016/0377-0427\(87\)90125-7](https://doi.org/10.1016/0377-0427(87)90125-7)
36. Blanco S., Garcia H., Quiroga R. Q., Romanelli L., Rosso O. A. Stationarity of the EEG series. *IEEE Engineering in Medicine and Biology Magazine*, 1995, vol. 14, iss. 4, pp. 395–399. <https://doi.org/10.1109/51.395321>

Поступила в редакцию 01.07.2025; одобрена после рецензирования 24.08.2025;
принята к публикации 10.09.2025; опубликована 28.11.2025

The article was submitted 01.07.2025; approved after reviewing 24.08.2025;
accepted for publication 10.09.2025; published 28.11.2025



НАНОТЕХНОЛОГИИ, НАНОМАТЕРИАЛЫ И МЕТАМАТЕРИАЛЫ

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 485–494
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 485–494
<https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-485-494>, EDN: XIORAE

Научная статья
УДК 538.915

Сенсорные свойства тонких пленок перфорированного графена, функционализированного СООН-группами: DFTB-исследование

П. В. Барков¹, М. М. Слепченков¹, О. Е. Глухова^{1,2✉}

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

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

Барков Павел Валерьевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиотехники и электродинамики, barkovssu@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2167-1615>, AuthorID: 932768

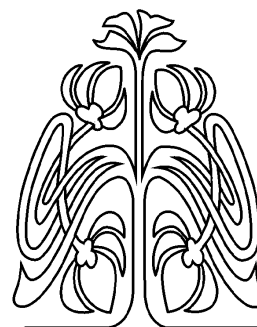
Слепченков Михаил Михайлович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиотехники и электродинамики, slepchenkovm@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4282-5620>, AuthorID: 712909

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

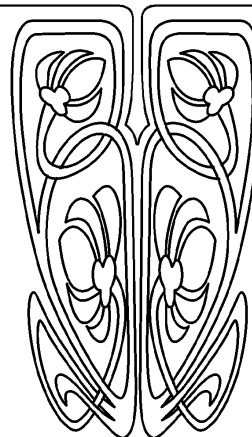
Аннотация. Перфорированный графен является одним из наиболее обсуждаемых представителей пористых 2D наноматериалов с позиции их многообещающих свойств и перспектив применения в наноэлектронике и наносенсорике. В рамках данной работы рассматриваются плёнки перфорированного графена с почти круглыми отверстиями диаметром 1.2 нм, функционализированного карбоксильными (СООН) группами. Цель работы заключалась в оценке хеморезистивного отклика подобных плёнок на молекулы газа NO₂, являющегося одним из загрязняющих воздух веществ. Для проведения исследования применялся квантовый метод функционала плотности в приближении сильной связи с самосогласованным вычислением заряда. Расчеты хеморезистивного отклика проводились в присутствии молекул воды на поверхности плёнки функционализированного перфорированного графена (ФПГ) при температуре 300 К. Установлено, что величина отклика плёнки составляет 87–93% в зависимости от числа адсорбируемых на поверхности перфорированного графена молекул NO₂ (от 1 до 6). Высокая хеморезистивная чувствительность исследуемых плёнок объясняется резким снижением их сопротивления (на порядок) при посадке молекул NO₂. Наблюдаемое снижение сопротивления объясняется с позиции изменения электронного строения плёнки и закономерностей квантового транспорта электронов в ней. Полученные результаты свидетельствуют о многообещающих перспективах применения плёнок функционализированного перфорированного графена в газовой сенсорике для обнаружения загрязняющих веществ в воздухе.

Ключевые слова: хеморезистивный отклик, кислород-содержащие группы, уровень Ферми, метод функционала плотности в приближении сильной связи

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-72-01122, <https://rscf.ru/project/23-72-01122/>).



**НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ**





Для цитирования: Барков П. В., Сlepченков М. М., Глухова О. Е. Сенсорные свойства тонких пленок перфорированного графена, функционализированного COOH-группами: DFTB-исследование // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 485–494. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-485-494>, EDN: XIORAE

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

Article

Sensor properties of thin films of perforated graphene functionalized with COOH groups: DFTB study

P. V. Barkov¹, M. M. Slepchenkov¹, O. E. Glukhova^{1,2}✉

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

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

Pavel V. Barkov, barkovssu@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2167-1615>, AuthorID: 932768

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

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

Abstract. Background and Objectives: Currently, perforated graphene is one of the most discussed representatives of porous 2D nanomaterials from the standpoint of their promising properties and prospects for application in nanoelectronics and nanosensors. In this paper, we consider perforated graphene films with almost round holes with a diameter of 1.2 nm, functionalized with carboxyl (COOH) groups. The aim of the work was to study the chemoresistive response of such films to NO₂ gas molecules, which is one of the air pollutants. **Materials and Methods:** To conduct the study, we used the quantum density functional method in the tight-binding approximation with self-consistent charge calculation. Calculations of the chemoresistive response were carried out in the presence of water molecules on the surface of the functionalized perforated graphene film at a temperature of 300 K. **Results:** It has been found that the film response value is 87–93% depending on the number of NO₂ molecules adsorbed on the surface of the perforated graphene (from 1 to 6). The high chemoresistive sensitivity of the studied films is explained by a sharp decrease in its resistance (by an order of magnitude) when NO₂ molecules are deposited. The observed decrease in resistance is explained from the standpoint of changes in the electronic structure of the film and the laws of quantum electron transport in it. **Conclusion:** The results obtained indicate promising prospects for the use of functionalized perforated graphene films in a gas sensor for detecting pollutants in the air.

Keywords: chemoresistive response, oxygen-containing groups, Fermi level, density-functional tight-binding method

Acknowledgments: The research was supported by the Russian Science Foundation (project No. 23-72-01122, <https://rscf.ru/project/23-72-01122/>).

For citation: Barkov P. V., Slepchenkov M. M., Glukhova O. E. Sensor properties of thin films of perforated graphene functionalized with COOH groups: DFTB study. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 485–494 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-485-494>, EDN: XIORAE

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

Введение

В настоящее время интенсивно развивающимся направлением материаловедения является изучение пористых 2D наноматериалов [1]. Одним из наиболее перспективных представителей этого класса материалов является перфорированный графен (ПГ), имеющий структуру с массивом отверстий различных форм и размеров [2]. Ключевыми геометрическими параметрами, характеризующими структурные особенности ПГ, являются периодичность (L), определяемая как расстояние между центрами двух соседних отверстий, и ширина шейки (W), определяемая как наименьшее расстояние между краями двух соседних отверстий [3, 4]. Благодаря возможностям современных технологий синтеза, таких как нанолитография, фотокаталитическая резка, прямое облучение электронным/ионным пучком и другим, можно получать структуры ПГ с геометрическими параметрами

L и W , варьируемыми в широких пределах [5]. Наличие электронной структуры с настраиваемой шириной запрещенной зоны, высокая удельная площадь поверхности с многочисленными реакционными и адсорбционными центрами, а также превосходные фотокаталитические свойства [6, 7] предопределили повышенный интерес исследователей и разработчиков к ПГ [8, 9]. Одним из возможных применений ПГ в электронике является его использование в качестве проводящего канала при создании полевых транзисторов [3, 10, 11]. В работе [3] представлен прототип полевого транзистора на основе структур ПГ, изготовленных с помощью технологии литографии блок-сополимеров. Опытным путем было доказано, что, варьируя ширину шейки ПГ, можно управлять отношением токов включения и выключения I_{on}/I_{off} транзисторного устройства. Другой прототип полевого транзистора на основе нанолент ПГ с шириной



менее 10 нм, изготовленных с использованием наномпринтной литографии, был предложен в работе [11]. В результате испытаний было обнаружено, что повысить показатель I_{on}/I_{off} можно за счет уменьшения ширины наноленты ПГ. Высокая скорость протекания поперечной диффузии ионов в структурах ПГ позволяет успешно использовать их в качестве электродов в системах накопления и хранения энергии с улучшенной производительностью [12, 13]. Путем легирования ПГ различными химическими элементами, в частности, азотом, фосфором и серой [14–16], можно повысить удельную емкость электрода на основе ПГ.

Еще одним многообещающим применением ПГ является наносенсорика. Высокая чувствительность электронно-энергетических и электропроводных характеристик ПГ к различного рода примесям открывает широкие возможности в области создания сенсорных устройств на его основе. В частности, на основе ПГ, функционализированного одноцепочечной ДНК, разработаны сенсорные устройства с быстрым откликом и восстановлением для обнаружения различных типов паров, в том числе карбоновых кислот, альдегидов, органофосфатов и взрывчатых веществ [17]. Функционализированный азотом ПГ успешно проявил себя в роли чувствительного элемента высокоэффективного электрохимического датчика для определения фосфорорганических пестицидов, в том числе метилпаратиона [18]. В настоящее время проводятся прогностические исследования методами *ab initio*, направленные на выявление закономерностей влияния различных газовых молекул на электронно-энергетические и сенсорные характеристики ПГ [19, 20]. В то же время, в этих работах моделирование процесса адсорбции молекул газа проводится на чистой поверхности ПГ. Однако, согласно известным экспериментальным данным, одним из конечных продуктов синтеза ПГ являются кислородсодержащие группы, как и в случае обычного графена [21–23]. Эти группы должны оказывать влияния на электронное строение и электронно-энергетические параметры ПГ в силу высокой электроотрицательности кислорода.

Целью данной работы является оценка хеморезистивного отклика ПГ, функционализированного карбоксильными (COOH) группами, на молекулы NO_2 с позиции оценки перспектив использования данного углеродного наноматериала в качестве чувствительного элемента газо-

вых сенсоров. Объектом исследования являются тонкие плёнки ПГ с отверстиями почти круглой формы диаметром 1.2 нм.

1. Методы и подходы

В процессе исследования использовался метод функционала плотности в приближении сильной связи с самосогласованным вычислением зарядов (SCC-DFTB) [24], реализованный в программном пакете открытого доступа DFTB+ [25, 26]. Выбор метода SCC-DFTB обусловлен многоатомностью суперъядеек рассчитываемых наноструктур, которые содержат сотни атомов. При оптимизации атомной структуры суперъядеек проводилось разбиение обратного пространства по схеме Монкхорста – Пака [27] с использованием сетки k -точек размером $4 \times 4 \times 1$. Оптимизация проводилась до тех пор, пока значения межатомных сил не становились менее 10^{-4} Н/а₀. Для описания вандер-ваальсового взаимодействия между COOH-группами, располагающими по краям отверстия ПГ, применялась схема коррекции дисперсии Леннарда–Джонса [28]. В рамках этой схемы дисперсия учитывается посредством потенциала Леннарда–Джонса между каждой парой атомов, а параметры потенциала взяты из модели Универсального силового поля (UFF).

Электропроводность исследуемых наноструктур рассчитывалась в рамках формализма Ландауэра–Буттикера [29] согласно формуле

$$G = 2e^2/h \int_{-\infty}^{\infty} T(E) F_T(E - E_F) dE, \quad (1)$$

где $T(E)$ – усреднённая функция пропускания электронов, E_F – уровень Ферми электродов, e^2/h – квант проводимости, F_T – функция теплового уширения энергетических уровней, определяемая как

$$F_T = \frac{1}{4k_B T} \text{sech}^2 \left(\frac{E - E_F}{2k_B T} \right). \quad (2)$$

Коэффициент 2 перед интегралом учитывает спин. Функция пропускания электронов $T(E, k)$ определяется выражением вида

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

где $G_C^A(E, k)$ и $G_C^R(E, k)$ – опережающая и запаздывающая матрицы Грина, описывающие взаимодействие моделируемой системы с электродами; $\Gamma_S(E, k)$ и $\Gamma_D(E, k)$ – матрицы расширения электронных состояний электродов истока



и стока. Расчёты электропроводных характеристик исследуемых плёнок выполнялись в базе *s*- и *p*-электронных орбиталей при температуре 300 К.

Хеморезистивный отклик S рассчитывался как относительное изменение электрического сопротивления

$$S = (R - R_0)/R_0 \cdot 100\%, \quad (4)$$

где R – сопротивление пленки ПГ при наличии молекул аналитов на ее поверхности, R_0 – сопротивление пленки ПГ без молекул аналитов на поверхности.

2. Атомистическая модель объекта исследования

Исходная суперъчейка плёнки ПГ из 186 атомов углерода представлена на рис. 1, а. Она имеет размеры 2.46 нм × 2.55 нм (по осям X и Y). Расширенный фрагмент плёнки ПГ, состоящий из четырех суперъчеек, изображен на рис. 1, б. Ширина шейки в направлении «zigzag» (вдоль оси X) гексагональной решетки составляет $W_x = 0.74$ нм, в направлении «armchair» (вдоль оси Y) – $W_y = 0.99$ нм. Диаметр отверстий почти круглой формы составляет ~1.2 нм. Все указанные геометрические параметры полностью отвечают известным экспериментальным данным по синтезу ПГ [30, 31].

Выбор отверстий почти круглой формы объясняется тем, что она является энергетически более выгодной по сравнению с прямоугольными и треугольными отверстиями [32].

Кислород-содержащие СООН-группы ковалентно присоединялись к атомам ПГ, расположенным по краям отверстия, поскольку в этой области присутствуют ненасыщенные углеродные связи, обладающие высокой реакционной способностью. Моделирование процесса пошаговой ковалентной функционализации ПГ проводилось с помощью оригинальной методики, подробно описанной в наших предыдущих работах [33, 34]. Согласно этой методике, СООН-группа должна присоединяться к атому углерода с наибольшей величиной избыточного отрицательного заряда, выбранному на основе рассчитанного по Малликену распределения частичного заряда по всем атомам суперъчейки. После добавления каждой новой СООН-группы это распределение пересчитывалось. Важным моментом при проведении пошаговой функционализации является обеспечение условия энергетически выгодного присоединения СООН-групп. Выполнение данного условия фиксировалось по величине энергии связи E_b , определяемой как разность полных энергий рассматриваемой системы и всех ее составных частей. Резуль-

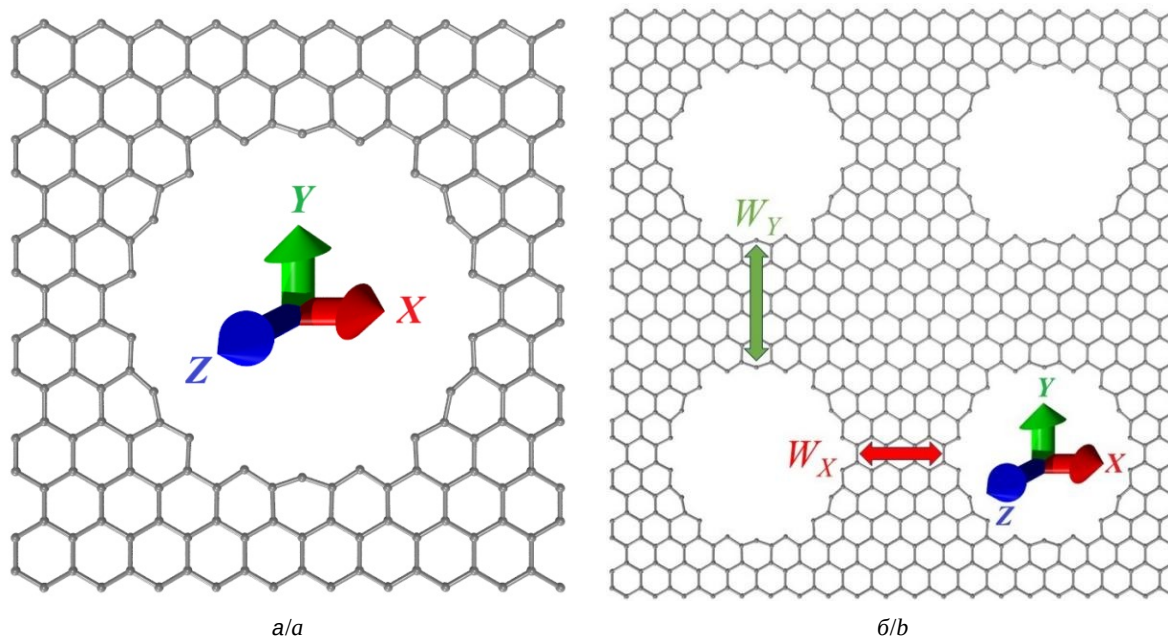


Рис. 1. Атомная структура перфорированного графена с почти круглыми отверстиями диаметром 1.2 нм: а – исходная суперъчейка; б – расширенный фрагмент, состоящий из четырех суперъчеек (цвет онлайн)

Fig. 1. Atomic structure of perforated graphene with almost round holes with a diameter of 1.2 nm: supercell (a), extended fragment of the four supercells (b) (color online)



таты расчетов показали, что на разных этапах функционализации E_b принимает отрицательные значения в диапазоне от -0.083 эВ/атом до -0.023 эВ/атом. Следовательно, процесс ковалентного присоединения COOH -групп является энергетически выгодным для ПГ. На рис. 2 показана равновесная конфигурация суперъчейки ПГ с девятью присоединенными COOH -группами (полное насыщение атомов по краям отверстия).

Как видно из рис. 2, ближайшие соседи атомов ПГ, к которым присоединялись COOH -группы, насыщены атомами водорода. Это было сделано, для того чтобы избежать образования ненужных ковалентных связей между COOH -группами и ближайшими соседними углеродными атомами. Также следует отметить, что присоединение COOH -групп привело к заметному искривлению атомной сетки ПГ. В результате атомы углерода, к которым присоединялись CO -

OH -группы, располагаются уже не в базальной плоскости, а либо над ней, либо под ней.

3. Определение хеморезистивного отклика функционализированного перфорированного графена

Для определения хеморезистивного отклика исследуемых плёнок ПГ в условиях, соответствующих особенностям проведения реального эксперимента, моделирование адсорбции аналитов на поверхности ПГ должно проводиться с учетом наличия молекул воды (H_2O), всегда присутствующих в воздухе и влияющих на работу сенсора. В связи с этим было проведено моделирование взаимодействия ФПГ с молекулами H_2O . Посадка молекул H_2O осуществлялась по одной. При этом с добавлением каждой новой молекулы H_2O проводилась реоптимизация суперъчейки ФПГ, которая включала оптимизацию координат молекул H_2O и их положение относительно поверхности ПГ. По результатам

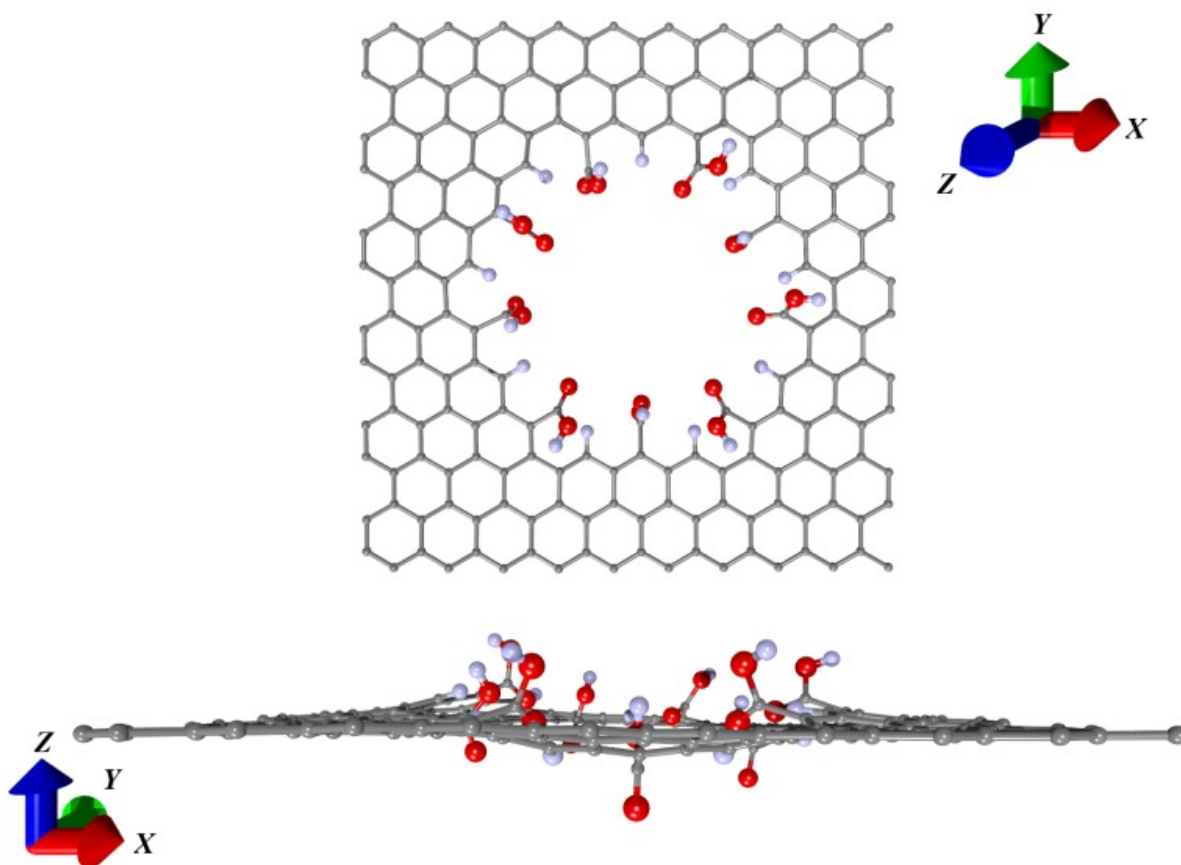


Рис. 2. Супер-ячейка перфорированного графена, функционализированного девятью COOH -группами (вид сбоку и вид сверху) (цвет онлайн)

Fig. 2. Supercell of perforated graphene functionalized with nine COOH groups (side view and top view) (color online)

проведенных расчетов было установлено, что в первую очередь молекулы H_2O присоединялись к COOH -группам и уже потом постепенно заполняли свободную поверхность ПГ вокруг отверстия, а также закрывали и само отверстие. На рис. 3, а показана суперъячейка ФПГ с 18 молекулами H_2O . Данная концентрация молекул H_2O соответствует известным экспериментальным данным [35]. Результаты расчета энергии связи показали, что добавление такого количества молекул H_2O является энергетически выгодным ($E_b = -0.003$ эВ/атом). Распределение парциального заряда по Малликену (рис. 3, б) показало, что молекулы H_2O отдают часть своего заряда ($0.17|e|$) поверхности ПГ, что делает её носителем избыточного электронного заряда.

Далее осуществлялось моделирование адсорбции аналитов на поверхности ФПГ в присутствии молекул H_2O . В качестве аналитов были выбраны молекулы диоксида азота NO_2 , являющиеся одним из основных газов, вызывающих загрязнение воздуха. Посадка молекул NO_2 производилась по одной с выполнением реоптимизации суперъячейки ФПГ для поиска наиболее энергетически выгодного расположения аналитов. Критерием выгодного по энергии расположения молекул NO_2 являлось, как и в случае молекул H_2O , значение энергии связи E_b . В рамках выполненных численных экспериментов был рассмотрен процесс поочередной посадки 6 молекул NO_2 . Величина E_b в ходе последовательного добавления молекул NO_2 менялась в диапазоне от -0.012 до -0.001 эВ/атом.

На рис. 4, а показана суперъячейка ФПГ с 18 молекулами H_2O и 6 молекулами NO_2 . Видно, что все аналиты находятся в окружении молекул H_2O , заполняя пустоты между ними. Взаимодействие между системой «ФПГ+18 H_2O » и аналитами сопровождалось трансфером заряда между ними, динамику которого можно проследить по рассчитанным распределениям парциального заряда, представленным на рис. 4, б–ж. Можно отметить, что при добавлении каждой молекулы NO_2 система «ФПГ+18 H_2O » отдает часть своего заряда аналитам. Суммарная величина переданного парциального заряда составила $0.35|e|$ для случая 6 молекул NO_2 .

В таблице представлены результаты расчета хеморезистивного отклика S системы «ФПГ + 18 H_2O » после добавления каждой из шести молекул NO_2 . Наряду со значениями отклика S таблица также содержит значения сопротивлений системы «ФПГ + 18 H_2O » до и после адсорбции молекул NO_2 . Из данных таблицы следует, что система «ФПГ + 18 H_2O » характеризуется высокой чувствительностью к рассматриваемым аналитам. Величина S составляет 87.1% уже после добавления одной молекулы NO_2 . Увеличение числа аналитов не сильно сказывается на величине отклика S , который изменяется в узком диапазоне 88–93%, что объясняется близкими значениями сопротивлений системы «ФПГ + 18 H_2O » с разным числом адсорбируемых аналитов. Как следует из таблицы, высокая хеморезистивная чувствительность системы «ФПГ + 18 H_2O » к молекулам NO_2 объ-

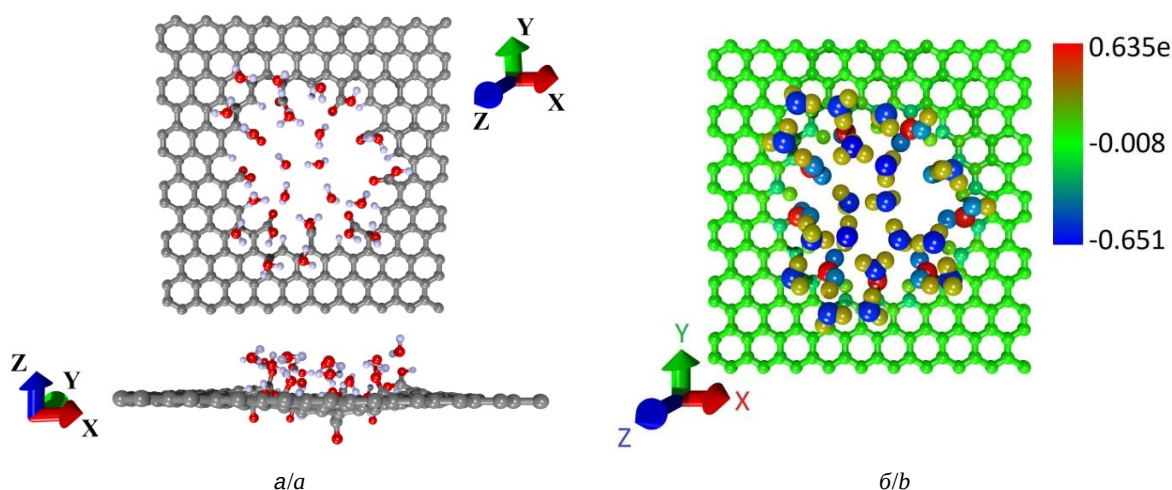


Рис. 3. Функционизированный COOH -группами перфорированный графен с 18 молекулами H_2O : суперъячейка (вид сверху и вид сбоку) (а); распределение парциального заряда по Малликену по атомам суперъячейки (б) (цвет онлайн)
Fig. 3. Perforated graphene functionalized with COOH groups with 18 H_2O molecules: super-cell (top view and side view) (a), distribution of partial charge according to Mulliken by atoms of the super-cell (b) (color online)

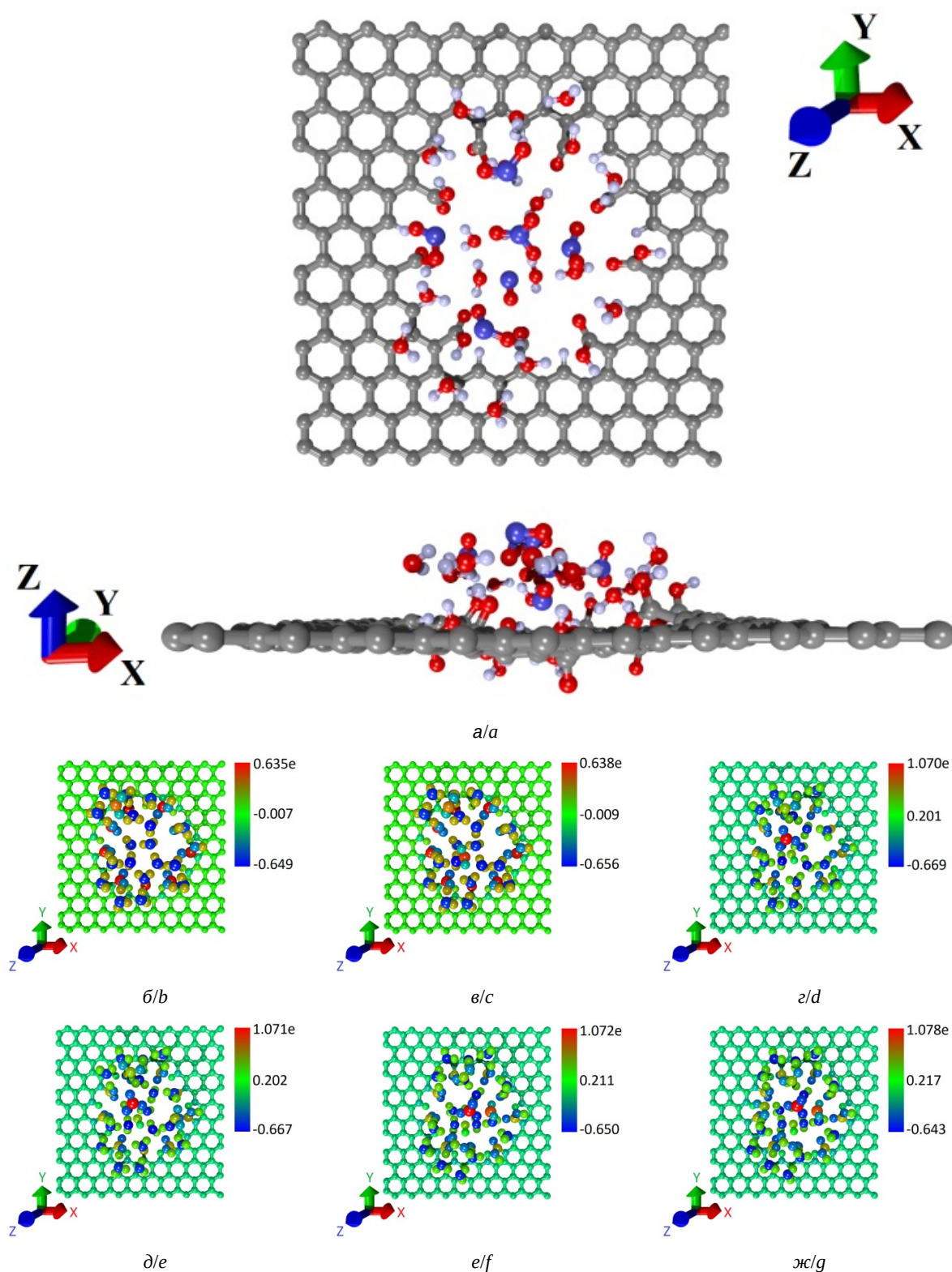


Рис. 4. Функционализированный COOH-группами перфорированный графен при наличии 18 молекул H_2O и аналитов: а – суперъчейка с 6 молекулами NO_2 (вид сверху и вид сбоку); б–ж – карты распределений парциальных зарядов по Малликену для атомов суперъчейки в ходе последовательного добавления молекул NO_2 от 1 до 6. Шкала показывает величину парциального заряда (цвет онлайн)

Fig. 4. COOH-functionalized perforated graphene in the presence of 18 H_2O molecules and analytes: supercell with 6 NO_2 molecules (top view and side view) (a), maps of Mulliken partial charge distributions for supercell atoms during sequential addition of NO_2 molecules from 1 to 6. The scale shows the magnitude of the partial charge (b–g) (color online)

**Электрофизические характеристики системы «Функционализированный перфорированный графен с 18 молекулами H_2O » при последовательном добавлении 6 молекул NO_2** **Electrophysical characteristics of the system “Functionalized perforated graphene by 18 H_2O molecules” with the sequential addition of 6 NO_2 molecules**

Структура / Structure	Электрическое сопротивление, кОм / Electrical resistance, kOhm	Хеморезистивный отклик S , % / Chemoresistive response S , %	Уровень Ферми E_F , эВ / Fermi Level E_F , eV
ПГ + COOH + $18\text{H}_2\text{O}$	198.6	–	–4.75
ПГ + COOH + $18\text{H}_2\text{O}$ + 1NO_2	24.2	87.8	–5.16
ПГ + COOH + $18\text{H}_2\text{O}$ + 2NO_2	13.3	93.2	–5.01
ПГ + COOH + $18\text{H}_2\text{O}$ + 3NO_2	21.5	89.1	–5.16
ПГ + COOH + $18\text{H}_2\text{O}$ + 4NO_2	21.5	89.1	–5.16
ПГ + COOH + $18\text{H}_2\text{O}$ + 5NO_2	21.6	89.1	–5.15
ПГ + COOH + $18\text{H}_2\text{O}$ + 6NO_2	23.3	88.2	–5.16

ясняется тем, что посадка даже одной молекулы аналита привела к снижению сопротивления системы на порядок. Для того чтобы понять, с чем связано такое изменение сопротивления, в таблице показано, как меняется значение уровня Ферми E_F системы «ФПГ + 18 H_2O » по мере добавления аналитов. Можно заметить, что посадка одной молекулы NO_2 привела к возрастанию по модулю значения уровня Ферми на 0.4 эВ, который смещается в направлении потолка валентной зоны, что свидетельствует о расширении зоны проводимости. Увеличение числа аналитов почти не приводит к изменениям в положении уровня Ферми за исключением случая с 2 молекулами NO_2 , когда уровень Ферми по модулю уменьшился на 0.1 эВ, что привело к увеличению отклика S с 87 до 93%.

Причины резкого изменения сопротивления системы «ФПГ + 18 H_2O » при добавлении одной молекулы NO_2 и последующего его постоянства при увеличении числа аналитов можно увидеть и на графиках функции пропускания электронов $T(E)$, показанных на рис. 5 для каждого из случаев посадки. Из графиков видно, что в отсутствии аналитов функция $T(E)$, определяющая число доступных каналов проводимости для транспорта электронов, обращается в нуль на уровне Ферми (–4.75 эВ), а при посадке одной молекулы NO_2 $T(E)$ на уровне Ферми (–5.16 эВ) достигает своего максимума, равного единице, который сохраняется и при посадке большого числа молекул NO_2 .

Таким образом, плёнка ПГ, функционализированного COOH -группами, при наличии молекул воды обладает высокой хеморезистивной чувствительностью к молекулам NO_2 , что объясняется смещением уровня Ферми в ее элек-

тронной структуре и, как следствие, увеличением значения функции $T(E)$ на уровне Ферми.

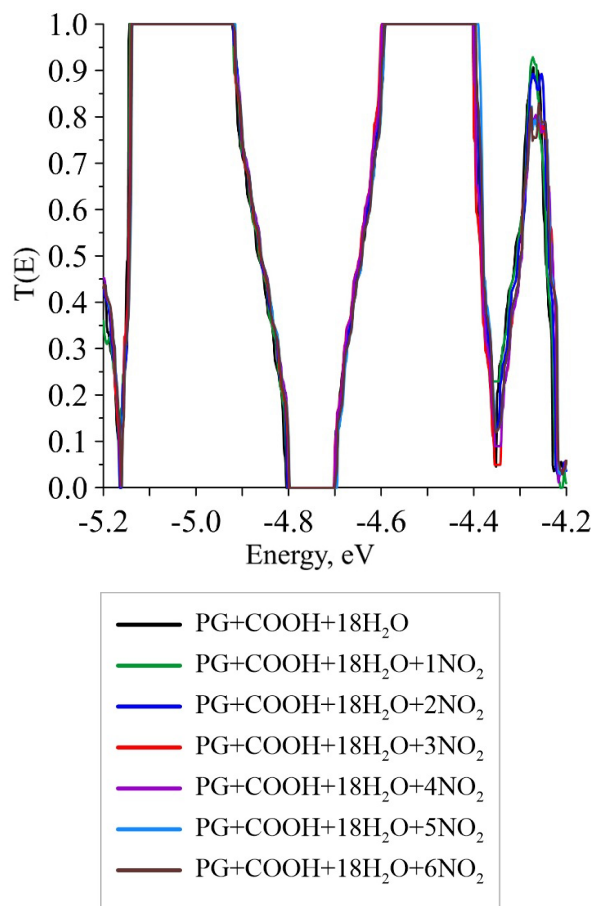


Рис. 5. Функция пропускания электронов системы «Функционализированный COOH -группами перфорированный графен с 18 молекулами H_2O » с разным числом молекул NO_2 (цвет онлайн)

Fig. 5 Electron transmission function of the system “Perforated graphene functionalized with COOH groups with 18 H_2O molecules” with different number of NO_2 molecules (color online)



Заключение

Проведённое исследование продемонстрировало высокую эффективность функционализированного карбоксильными группами перфорированного графена в качестве чувствительного элемента для детектирования диоксида азота (NO_2). Метод SCC DFTB позволил достоверно смоделировать поведение сложной системы, включающей гидратированную поверхность ПГ с контролируемыми геометрическими параметрами (диаметр пор, ширина шейки), что соответствует экспериментально синтезированным образцам. Ключевым результатом работы стало установление механизма хеморезистивного отклика: уже при адсорбции одной молекулы NO_2 наблюдается резкое снижение сопротивления, обусловленное смещением уровня Ферми на 0.4 эВ и достижению функции пропускания $T(E)$ электронов своего максимума на уровне Ферми.

Также важным фактором был учёт реалистичных условий эксплуатации сенсора – моделирование адсорбции NO_2 в присутствии 18 молекул воды показало энергетическую выгодность такого взаимодействия ($E_b = -0.003$ эВ/атом) и выявило перенос заряда 0.35 $|e|$ от ПГ к аналиту. Высокий показатель величины хеморезистивного отклика (87–93%) даже при малых концентрациях аналитов на поверхности плёнки ФПГ позволяет говорить о многообещающих перспективах использования данной структурной модификации графена в качестве чувствительного элемента высокоселективного сенсора диоксида азота.

Список литературы / References

1. Wang D., Dou Y., Zhang X., Bi K., Panneerselvam I. R., Sun H., Jiang X., Dai R., Song K., Zhuang H., Lu Y., Wang Y., Liao Y., Ding L., Nian Q. Manufacturing and applications of multi-functional holey two-dimensional nanomaterials – A Review. *Nano Today*, 2024, vol. 55, art. 102162. <https://doi.org/10.1016/j.nantod.2024.102162>
2. Nazarian-Samani M., Haghighat-Shishavan S., Nazarian-Samani M., Kashani-Bozorg S. F., Ramakrishna S., Kim K.-B. Perforated two-dimensional nanoarchitectures for next-generation batteries: Recent advances and extensible perspectives. *Progr. Mater. Sci.*, 2021, vol. 116, art. 100716. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2020.100716>
3. Bai J., Zhong X., Jiang S., Duan X. Graphene nanomesh. *Nature Nanotechnology*, 2010, vol. 5, pp. 190–194. <https://doi.org/10.1038/nnano.2010.8>
4. Yang J., Ma M., Li L., Zhang Y., Huang W., Dong X. Graphene nanomesh: New versatile materials. *Nanoscale*, 2014, vol. 6, pp. 13301–13313. <https://doi.org/10.1039/C4NR04584J>
5. Rajput N. S., Zadjali S. A., Gutierrez M., Esawi A. M. K., Teneiji M. A. Synthesis of holey graphene for advanced nanotechnological applications. *RSC Adv.*, 2021, vol. 11, pp. 27381–27405. <https://doi.org/10.1039/d1ra05157a>
6. Ma R., Zhou Y., Bi H., Yang M., Wang J., Liu Q., Huang F. Multidimensional graphene structures and beyond: Unique properties, syntheses and applications. *Progr. Mater. Sci.*, 2020, vol. 113, art. 100665. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2020.100665>
7. Lin Y., Liao Y., Chen Zh., Connell J. W. Holey graphene: a unique structural derivative of graphene. *Mater. Res. Lett.*, 2017, vol. 5, pp. 209–234. <https://doi.org/10.1080/21663831.2016.1271047>
8. Liu T., Zhang L., Cheng B., Hu X., Yu J. Holey Graphene for Electrochemical Energy Storage. *Cell Reports Phys. Sci.*, 2020, vol. 1, art. 100215. <https://doi.org/10.1016/j.xcrp.2020.100215>
9. Yang K., Li J., Zhou L., Zhang T., Fu L. Synthetic strategies of two-dimensional porous materials towards highly effective catalysts. *Flat Chem.*, 2019, vol. 15, art. 100109. <https://doi.org/10.1016/j.flatc.2019.100109>
10. Kim M., Safron N. S., Han E., Arnold M. S., Gopalan P. Fabrication and Characterization of Large-Area, Semiconducting Nanoperforated Graphene Materials. *Nano Lett.*, 2010, vol. 10, pp. 1125–1131. <https://doi.org/10.1021/nl9032318>
11. Liang X., Jung Y. S., Wu S., Ismach A., Olynick D. L., Cabrini S., Bokor J. Formation of Bandgap and Subbands in Graphene Nanomeshes with Sub-10 nm Ribbon Width Fabricated via Nanoimprint Lithography. *Nano Lett.*, 2010, vol. 10, pp. 2454–2460. <https://doi.org/10.1021/nl100750v>
12. Yang C.-H., Huang P.-L., Luo X.-F., Wang C.-H., Li C., Wu Y.-H., Chang J.-K. Holey Graphene Nanosheets with Surface Functional Groups as High-Performance Supercapacitors in Ionic-Liquid Electrolyte. *Chem. Sus. Chem.*, 2015, vol. 8, pp. 1779–1786. <https://doi.org/10.1002/cssc.201500030>
13. Sammed K. A., Pan L., Asif M., Usman M., Cong T., Amjad F., Imran M. A. Reduced holey graphene oxide film and carbon nanotubes sandwich structure as a binder-free electrode material for supercapacitor. *Sci. Rep.*, 2020, vol. 10, art. 2315. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-58162-9>
14. Su F., Zheng S., Liu F., Zhang X., Su F., Wu Z.-S. Nitrogen-doped holey graphene nanoscrolls for high-energy and high-power supercapacitors. *Chin. Chem. Lett.*, 2021, vol. 32, pp. 914–917. <https://doi.org/10.1016/j.cclet.2020.07.025>
15. Jeong J. H., Lee G.-W., Kim Y. H., Choi Y. J., Roh K. C., Kim K.-B. A holey graphene-based hybrid supercapacitor. *Chem. Eng. J.*, 2019, vol. 378, art. 122126. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.122126>
16. Yang D., Xu B., Zhao Q., Zhao X. S. Three-dimensional nitrogen-doped holey graphene and transition metal oxide composites for sodium-ion batteries. *J.*



- Mater. Chem. A*, 2019, vol. 7, pp. 363–371. <https://doi.org/10.1039/C8TA09188A>
17. Esfandiari A., Kybert N. J., Dattoli E. N., Han G. H., Lerner M. B., Akhavan O., Irajizad A., Johnson A. T. C. DNA-decorated graphene nanomesh for detection of chemical vapors. *Applied Physics Letters*, 2013, vol. 103, art. 183110. <https://doi.org/10.1063/1.4827811>
 18. Chen Z., Zhang Y., Yang Y., Shi X., Zhang L., Jia G. Hierarchical nitrogen-doped holey graphene as sensitive electrochemical sensor for methyl parathion detection. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2021, vol. 336, art. 129721. <https://doi.org/10.1002/cssc.201501169>
 19. Eldeeb M. S., Fadlallah M. M., Martyna G. J., Maarouf A. A. Doping of large-pore crown graphene nanomesh. *Carbon*, 2018, vol. 133, pp. 369–378. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2018.03.048>
 20. Huang L., Miao S., Wang X., Yang X. DFT study of gas adsorbing and electronic properties of unsaturated nanoporous graphene. *Molecular Simulation*, 2020, vol. 46, pp. 853–863. <https://doi.org/10.1080/08927022.2020.1778171>
 21. Rabchinskii M. K., Saveliev S. D., Stolyarova D. Yu., Brzhezinskaya M., Kirilenko D. A., Baidakova M. V., Ryzhkov S. A., Shnitov V. V., Sysoev V. V., Brunkov P. N. Modulating nitrogen species via N-doping and post annealing of graphene derivatives: XPS and XAS examination. *Carbon*, 2021, vol. 182, pp. 593–604. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2021.06.057>
 22. Shnitov V. V., Rabchinskii M. K., Brzhezinskaya M., Stolyarova D. Yu., Pavlov S. V., Baidakova M. V., Shvidchenko A. V., Kislenco V. A., Kislenco S. A., Brunkov P. N. Valence band structure engineering in graphene derivatives. *Small*, 2021, vol. 17, art. 2104316. <https://doi.org/10.1002/sml.202104316>
 23. Barkov P. V., Slepchenkov M. M., Glukhova O. E. Electrophysical properties of thin films of perforated graphene functionalized with carbonyl groups. *Technical Physics*, 2024, vol. 94, iss. 3, pp. 426–432 (in Russian).
 24. Elstner M., Porezag D., Jungnickel G., Elsner J., Haugk M., Frauenheim Th., Suhai S., Seifert G. Self-consistent-charge density-functional tight-binding method for simulations of complex materials properties. *Phys. Rev. B*, 1998, vol. 58, pp. 7260–7268. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.7260>
 25. Aradi B., Hourahine B., Frauenheim Th. DFTB+, a sparse matrix-based implementation of the DFTB method. *J. Phys. Chem. A*, 2007, vol. 111, iss. 26, pp. 5678–5684. <https://doi.org/10.1021/jp070186p>
 26. Hourahine B., Aradi B., Blum V., Bonafé F., Buccheri A., Camacho C., Cevallos C., Deshayé M. Y., Dumitrică T., Dominguez A., Ehlert S., Elstner M., van der Heide T., Hermann J., Irle S., Kranz J. J., Köhler C., Kowalczyk T., Kubař T., Lee I. S. et al. DFTB+, a software package for efficient approximate density functional theory based atomistic simulations. *J. Chem. Phys.*, 2020, vol. 152, iss. 12, art. 124101. <https://doi.org/10.1063/1.5143190>
 27. Elstner M., Seifert G. Density functional tight binding. *Philos. Trans. Royal Soc. A*, 2014, vol. 372, art. 20120483. <https://doi.org/10.1098/rsta.2012.0483>
 28. Monkhorst H. J., Pack J. D. Special Points for Brillouin-Zone Integrations. *Phys. Rev. B*, 1976, vol. 13, pp. 5188–5192. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
 29. Datta S. *Quantum Transport: Atom to Transistor*. Cambridge, Cambridge University Press, 2005. xiv + 404 p.
 30. Rabchinskii M. K., Shnitov V. V., Dideikin A. T., Aleksenskii A. E., Vul S. P., Baidakova M. V., Pronin I. I., Kirilenko D. A., Brunkov P. N., Weise J., Molodtsov S. L. Nanoscale Perforation of Graphene Oxide during Photoreduction Process in the Argon Atmosphere. *J. Phys. Chem. C*, 2016, vol. 12, pp. 28261–28269. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b08758>
 31. Sakkaki B., Saghai H. R., Darvish G., Khatir M. Electronic and optical properties of passivated graphene nanomeshes: An ab initio study. *Opt. Mater.*, 2021, vol. 122, art. 111707. <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2021.111707>
 32. Zhang J., Zhang W., Ragab T., Basaran C. Mechanical and electronic properties of graphene nanomesh heterojunctions. *Comp. Mater. Sci.*, 2018, vol. 153, pp. 64–72. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.06.026>
 33. Glukhova O. E., Barkov P. V. A new method for determining energetically favorable landing sites of carbonyl groups during the functionalization of graphene nanomesh. *Letters on Materials*, 2021, no. 4, pp. 392–396. <https://doi.org/10.22226/2410-3535-2021-4-392-396>
 34. Slepchenkov M. M., Barkov P. V., Glukhova O. E. Influence of functional groups on the electronic and energy characteristics of thin films of holey graphene: Results of DFTB simulation. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2024, vol. 24, iss. 2, pp. 114–125 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2024-24-2-114-125>
 35. Rabchinskii M. K., Sysoev V. V., Glukhova O. E., Brzhezinskaya M., Stolyarova D. Yu., Varezhenikov A. S., Solomatin M. A., Barkov P. V., Kirilenko D. A., Pavlov S. I., Baidakova M. V., Shnitov V. V., Struchkov N. S., Nefedov D. Yu., Antonenko A. O., Cai P., Liu Z., Brunkov P. N. Guiding graphene derivatization for the on-chip multisensor arrays: From the synthesis to the theoretical background. *Adv. Mater. Technol.*, 2022, vol. 7, art. 2101250. <https://doi.org/10.1002/admt.202101250>

Поступила в редакцию 14.04.2025; одобрена после рецензирования 19.06.2025; принята к публикации 10.07.2025; опубликована 28.11.2025

The article was submitted 14.04.2025; approved after reviewing 19.06.2025; accepted for publication 10.07.2025; published 28.11.2025



Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 495–504

Izvestiya of Saratov University. Physics, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 495–504

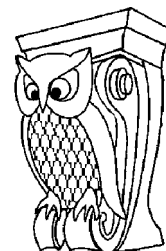
<https://fizika.sgu.ru>

<https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-495-504>, EDN: XKDYPG

Научная статья

УДК 538.9

Исследование проводящих свойств композитных полимерных материалов на основе поливинилпирролидона, допированных одно- и двухслойными нанотрубками



Л. С. Элбакян, И. В. Запороцкова[✉]

Волгоградский государственный университет, Россия, 400062, г. Волгоград, Университетский проспект, д. 100

Элбакян Лусине Самвеловна, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры судебной экспертизы и физического материаловедения, lusniak-e@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0006-1014-240X>, AuthorID: 675646

Запороцкова Ирина Владимировна, доктор физико-математических наук, директор Института приоритетных технологий, профессор кафедры судебной экспертизы физического материаловедения, irinazaporotskova@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0006-1014-240X>, AuthorID: 42151

Аннотация. На сегодняшний день проводящие полимеры являются одной из самых динамично развивающихся областей материаловедения, объединяя химию, физику и нанотехнологии. Проводящие полимеры особенно востребованы в области гибкой электроники, энергетики и биомедицины. В связи с этим резко возрос интерес к полимерным нанокомпозитам на основе углеродных нанотрубок благодаря их уникальному сочетанию свойств, недостижимому для традиционных полимеров. Новые материалы смогут сочетать в себе высокую проводимость с лёгкостью и биосовместимостью, открывая новые возможности к инновационным технологиям.

В данной работе в качестве основных объектов выбран известный полимер поливинилпирролидон и углеродные нанотрубки. Проведено теоретическое исследование возможности создания стабильного комплекса «Полимер-Углеродные нанотрубки» с использованием квантово-химического расчетного метода теории функционала плотности. Исследовано влияние слойности углеродных нанотрубок на адсорбционное взаимодействие комплекса, состоящего из фрагмента полимера поливинилпирролидон и молекулярного кластера углеродной нанотрубки. Для этого использованы одно- и двуслойные углеродные нанотрубки. Анализ карт электростатических потенциалов и зарядовых распределений в рассмотренных системах позволил объяснить механизм взаимодействия компонентов полимерных композитов для выбранного полимера и нанотрубок. Далее проведен анализ электронно-энергетического строения полученных полимерных нанокомпозитов. На основании полученных данных сделан вывод о проводящих свойствах полученного комплекса.

Ключевые слова: поливинилпирролидон, одно- и двуслойные углеродные нанотрубки, метод теории функционала плотности (DFT), адсорбционное взаимодействие, электронно-энергетическое строение, полимерные нанокомпозиты, проводящие свойства

Благодарности: Работа выполнена в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации («FZUU-2023-0001»).

Для цитирования: Элбакян Л. С., Запороцкова И. В. Исследование проводящих свойств композитных полимерных материалов на основе поливинилпирролидона, допированных одно- и двухслойными нанотрубками // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 495–504. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-495-504>, EDN: XKDYPG

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

Article

Investigation of the conductive properties of composite polymer materials based on polyvinylpyrrolidone doped with single and double-walled nanotubes

L. S. Elbakyan, I. V. Zaporotskova[✉]

Volgograd State University, 100 Universitetskiy Prospekt, Volgograd 400062, Russia

Lusine S. Elbakyan, lusniak-e@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0006-1014-240X>, AuthorID: 675646

Irina V. Zaporotskova, irinazaporotskova@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0006-1014-240X>, AuthorID: 42151

Abstract. Background and Objectives: Today, conductive polymers are one of the most dynamically developing fields of materials science, combining chemistry, physics and nanotechnology. Conductive polymers are particularly in demand in the fields of flexible electronics, energy, and biomedicine. In this regard, there has been a sharp increase in interest in polymer nanocomposites based on carbon nanotubes due to their unique combination of properties unattainable by traditional polymers. The new materials will be able to combine high conductivity with lightness and biocompatibility. This will create new opportunities for innovative technologies. In this work, the well-known polymer polyvinylpyrrolidone and carbon nanotubes are selected as the main objects. A theoretical study has been conducted on the possibility of creating the stable complex



"Polymer – Carbon nanotubes". **Materials and Methods:** In this paper, the quantum chemical method of density functional theory is used to study the structural features, interaction mechanisms, and electron-energy structure of a polyvinylpyrrolidone-based nanocomposite doped with carbon nanotubes. A hybrid approximation method, namely the B3LYP method, was chosen to study the system. The calculations were performed using a valence-split 3-21G type basic set. **Results:** The effect of CNT layering on the adsorption interaction of a complex consisting of a fragment of a polyvinylpyrrolidone polymer and a molecular cluster of a carbon nanotube has been studied. For this purpose, single- and double-walled carbon nanotubes were used. The analysis of maps of electrostatic potentials and charge distributions in the considered systems has made it possible to explain the mechanism of interaction between the components of polymer composites for the selected polymer and nanotubes. Next, the electron-energy structure of the obtained polymer nanocomposites has been analyzed. Based on the data obtained, a conclusion has been made about the conductive properties of the resulting complex. **Conclusion:** The results obtained demonstrate the prospects of using carbon nanotubes for targeted modification of the electrophysical properties of polymer matrices and the creation of functional nanocomposite materials with specified conductive characteristics.

Keywords: polyvinylpyrrolidone, single- and double-walled carbon nanotubes, method of Density Functional Theory (DFT), adsorption interaction, electron-energy structure, polymer nanocomposites, conductive properties

Acknowledgments: The work was carried out within the framework of the State assignment of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project No. "FZUU-2023-0001").

For citation: Elbakyan L. S., Zaporotskova I. V. Investigation of the conductive properties of composite polymer materials based on polyvinylpyrrolidone doped with single and double-walled nanotubes. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 495–504 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-495-504>, EDN: XKDYPG

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

Введение

Развитие нанотехнологий требует совершенствования методов компьютерного моделирования, так как экспериментальное изучение наночастиц и кластеров часто сопряжено с техническими сложностями и высокой стоимостью. Современные вычислительные подходы позволяют предсказывать их свойства, структуру и динамику с высокой точностью, что ускоряет разработку новых материалов и технологий. Совершенствование алгоритмов и рост вычислительных мощностей (включая квантовые вычисления) открывают новые возможности для точного предсказания поведения наночастиц, что критически важно для нанотехнологий будущего.

Полимеры с регулируемой электропроводностью и термочувствительностью очень востребованы в различных областях применения. Знание электрических свойств тонких полимерных пленок на низких частотах полезно при изучении материалов и определении характеристик для изготовления устройств [1, 2]. Например, тонкие изоляционные пленки широко используются в интегральных схемах.

Разработка полимерных систем, обладающих проводящими свойствами, является одной из основных задач в исследованиях полимеров [3–7]. Это объясняется их потенциальным применением в качестве электролитов в твердотельных батареях, топливных элементах, электрохимических дисплеях, «умных окнах», фотоэлектрохимических элементах и т. д., благодаря их высокой проводимости, плотности энергии, электрохимической стабильности и простоте обработки. В последние годы ученые всего мира

активно работают над созданием твердых полимерных электролитов. Это связано с их потенциальным применением в качестве электролитических материалов в аккумуляторах с высокой плотностью энергии, перезаряжаемых батареях и твердотельных аккумуляторах. Кроме того, гибкие носимые электронные устройства получили широкое внимание в областях мониторинга здоровья человека, биоэлектронных интерфейсов и взаимодействия человека с компьютером. Проводящие гидрогели постепенно стали лучшими материалами-кандидатами для гибких носимых электронных устройств из-за их хороших проводящих свойств, модуля упругости, аналогичного естественной кожной ткани, и регулируемых механических свойств. Приготовление гидрогеля может быть выполнено с использованием как натурального, так и синтетического полимера.

1. Материалы и методы

В данной работе для исследования особенностей структуры, механизмов взаимодействия, а также электронно-энергетического строения нанокompозита на основе поливинилпирролидона, допированного углеродными нанотрубками применен квантово-химический метод теории функционала плотности [8–13]. Суть данного метода заключается в использовании при описании атомно-молекулярных систем распределения электронной плотности.

Для исследования системы был выбран гибридный метод приближения, а именно метод B3LYP. Главным достоинством метода B3LYP является его высокая точность [14]. Данный функционал хорошо адаптирован под выбранные



системы. Расчеты велись с применением валентно-расщепленного базисного набора типа 3-21G. Оптимальный базис был выбран на основе серии тестовых расчетов с различными базисами и последующего анализа их воздействия на конечные результаты, что отражено в представленном исследовании.

Среди синтетических полимеров поливинилпирролидон (ПВП) является аморфным и существует в виде произвольно свернутой и очень гибкой цепочки в полярных растворителях. Эти водорастворимые полимеры имеют широкий спектр биологических, фармацевтических и технологических применений. ПВП является полярным полимером благодаря своей карбонильной группе с двойной связью в пирролидоновом кольце [15]. Сетчатая структура ПВП имеет разную длину π - и σ -связей между атомами азота, кислорода, углерода и водорода (рис. 1).

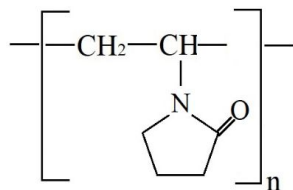
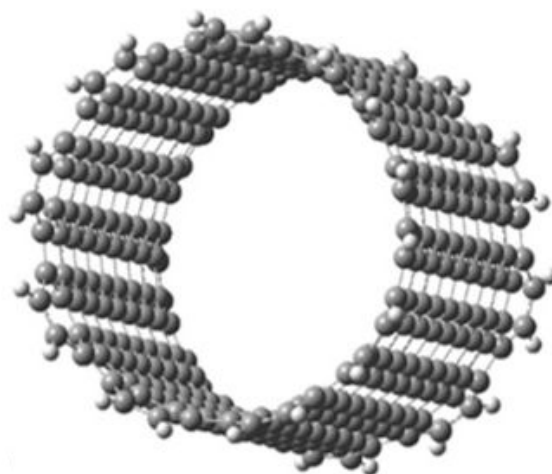


Рис. 1. Структурная формула полимера поливинилпирролидона

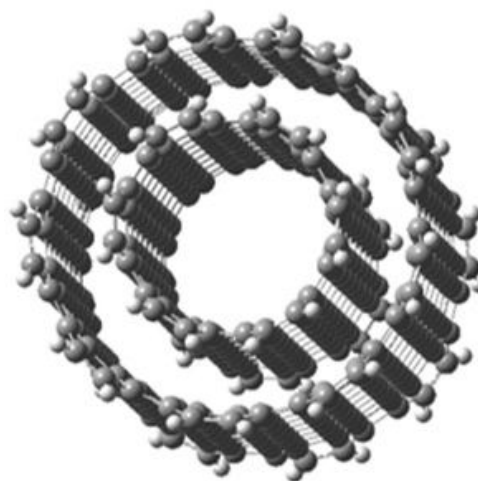
Fig. 1. Structural formula of polyvinylpyrrolidone polymer

Несмотря на широкое применение ПВП, у этого полимера есть ряд недостатков, которые ограничивают его использование в некоторых областях. Одним из основных недостатков поливинилпирролидона является низкая механическая прочность, что делает пленки на основе ПВП хрупкими и требует различные наполнители. Кроме того, данный полимер при высоких температурах (свыше 150°C) может разлагаться, что также ограничивает его применение в промышленных целях. Для минимизации негативных эффектов часто используют модифицированные формы ПВП или комбинируют его с другими наполнителями и полимерами [16–17]. В качестве нанодобавки предложено использование углеродных нанотрубок.

Нами проведены детальные теоретические исследования, а именно взаимодействие рассматриваемого полимерного материала с углеродными нанотрубками (УНТ) разной слойности. Рассмотрены однослойные углеродные нанотрубки типа (9,9) и двуслойные углеродные нанотрубки, состоящие из двух нанотрубуленов типа (6,6) и (9,9) (рис. 2) [18–20].



a/a



b/b

Рис. 2. Однослойные углеродные нанотрубки типа (9,9) (а); двуслойные углеродные нанотрубки, состоящие из нанотрубуленов типа (6,6) и (9,9) (б)

Fig. 2. Single-walled carbon nanotubes of type (9,9) (a); double-walled carbon nanotubes consisting of nanotubulenes of type (6,6) and (9,9) (b)

2. Результаты и их обсуждение

2.1. Выбор оптимального базисного набора

Подбор наиболее подходящего базисного набора в DFT-расчетах определяется несколькими ключевыми моментами, включая цели исследования, масштаб системы, природу химических взаимодействий, доступные вычислительные мощности и дополнительные условия. Для протяженных систем, обладающих большим числом молекул (например, белки и ДНК, наночастицы, кристаллические и аморфные материалы и т. д.) ключевой задачей становится поиск разумного компромисса между точностью моделирования и приемлемым временем расчетов.



Следовательно, оптимальный базисный набор выбирается с учетом баланса между допустимыми упрощениями и снижением вычислительной нагрузки [21, 22]¹.

Нами проведена серия тестовых расчетов с разными базисными наборами и проанализировали их влияние на итоговые результаты. Чтобы определить оптимальный базисный набор для квантово-химического моделирования адсорбционного взаимодействия в системах, включающих одно- и двухслойные углеродные нанотрубки и фрагмент поливинилпирролидона, а также для изучения их электронной структуры, были выполнены следующие этапы с использованием основных базисов:

- оптимизация геометрии мономера винилпирролидона (получены равновесные длины связей и проведено их сравнение с литературными данными [23, 24]);
- расчет средней энергии связи в исследуемой молекуле;
- расчет энергии, геометрии и ширины запрещенной зоны углеродных нанотрубок (сравнение с литературными данными);
- оценка вычислительных затрат (общего времени расчета для каждого базисного набора).

Результаты первого этапа вычислений – расчет длин межатомных связей в молекуле винилпирролидона приведены в табл. 1.

Полученные данные о длинах межатомных связей, рассчитанных в представленных базисах, достаточно близки к справочным данным. При этом наиболее точно межатомные расстоя-

ния описываются с помощью базисных наборов Попла, а именно 3-21G и 6-31G с добавлением поляризационных (либо и поляризационных, и диффузных) функций.

При различных базисных наборах Попла 3-21G, 6-31G, 6-31G(d,p), 6-31G++(d,p) была также рассчитана средняя энергия связи для рассматриваемых фрагментов, которая определялась как

$$E_{\text{св}} = \frac{E_{\text{полн}} - (a \cdot E(\text{O}) + b \cdot E(\text{H}) + c \cdot E(\text{O}) + d \cdot E(\text{N}))}{N_{\text{ат}}},$$

где $E_{\text{полн}}$ – энергия системы; $E(\text{C})$, $E(\text{H})$, $E(\text{O})$, $E(\text{N})$ – энергии изолированных атомов, содержащихся в комплексе; a , b , c , d – количество этих атомов; $N_{\text{ат}}$ – общее число атомов в комплексе. Значения энергии связи атомов ПВП в зависимости от используемого базисного набора представлены в табл. 2. Сравнение результатов вычисления показал их приемлемое согласие для выбранных базисов.

Далее нами были определены геометрические параметры и значения ширины запрещенной зоны углеродных нанотрубок при использовании базисов 3-21G, 6-31G, 6-311G, 6-31G(d,p), 6-31++ G(d,p) и cc-pVDZ. В качестве объекта исследования выбрана нанотрубка типа (6,6). Результаты показали, что применение различных базисных наборов не приводит к существенному различию в рассчитанной длине связей между углеродными атомами в гексагональной структуре УНТ и остается порядка 1.42 Å, что соответствует литературным данным. Кроме того,

Таблица 1 / Table 1

Длина межатомных связей в мономере винилпирролидон, Å
The length of interatomic bonds in the vinylpyrrolidone monomer, Å

Тип соединения / Type of connection	Длина связи / The bond length				
	C=C	C=O	C-N	C-H (R-CH2-R)	C-H (аромат. соедин.) / C-H (arom. conn.)
3-21G	1.333	1.245	1.466	1.083	1.084
6-31G	1.339	1.256	1.450	1.084	1.084
6-311G	1.335	1.255	1.450	1.080	1.076
6-31G(d,p)	1.340	1.225	1.451	1.084	1.080
6-31++ G	1.341	1.257	1.448	1.084	1.079
6-31++G (d,p)	1.338	1.230	1.443	1.084	1.080
cc-pVDZ	1.338	1.226	1.446	1.090	1.087
Справочные данные / Background information	1.335	1.215	1.479	1.083	1.084

¹См. также: Николаева Е. В., Храповский Г. М., Шаповалов А. Г. Способы задания геометрии химических соединений для программы Gaussian : учебное пособие. Казань : Издательство Казанского национального исследовательского технологического университета, 2013. 93 с. URL: <https://www.kstu.ru/servlet/contentblob?id=69677> (дата обращения: 24.09.2025).



Таблица 2 / Table 2

Значения энергии связи атомов в полимере ПВП в зависимости от используемого базисного набора
Values of the binding energy of atoms in the PVP polymer, depending on the basic set used

Базисный набор / Basic set	Средняя энергия связи атомов в ПВП, эВ / The average binding energy of atoms in PVP, eV
3-21G	-5.863
6-31G	-5.814
6-31G(d, p)	-5.999
6-31++G(d,p)	-5.880

расчет ширины запрещенной зоны для нанотрубок типа (6,6) при разных базисах не обнаружил существенных различий в получаемых значениях (табл. 3).

Таблица 3 / Table 3

Результаты расчета ширины запрещенной зоны УНТ (6,6) с помощью различных базисных наборов
Results of calculating the width of the CNT (6,6) band gap using various basic sets

Базисный набор / Basic set	Ширина запрещенной зоны УНТ (6,6) E_g , эВ / The CNT(6,6) band gap E_g , eV
3-21G	0.965
6-31G	0.952
6-31G(d,p)	0.969
6-31++G	0.969
6-31++G (d,p)	0.969
6-311G	0.954
сс-pVDZ	0.971

Проведенные DFT-расчеты с использованием базисов 3-21G, 6-31G, 6-31G(d,p)

или 6-31G++(d,p) дали результаты, близкие к экспериментальным данным. Однако при исследовании крупных молекулярных систем, включающих фрагменты полимеров и одно- или двухслойные углеродные нанотрубки, наименьшие вычислительные затраты обеспечивает базис 3-21G.

Таким образом, для масштабных расчетов рекомендуется использование базиса 3-21G как наиболее сбалансированного по соотношению точности и вычислительной эффективности.

2.2. Анализ карт электростатического потенциала

При создании комплекса «ПВП+УНТ» важно правильно определить наиболее реакционноспособный центр полимера, способный обеспечить прочное связывание с поверхностью нанотрубок. Как известно, электростатический потенциал играет ключевую роль в исследовании межмолекулярных взаимодействий, предсказании реакционных центров, оценке молекулярных свойств и т. д.

В ходе исследования нами были проанализированы карты электростатического потенциала и распределение зарядов в изучаемых системах. При молекулярном моделировании расчет электростатического потенциала на молекулярной поверхности обычно выполняется на основе распределения электронной плотности, выявленного в результате квантово-химических расчетов. Такой подход позволяет наглядно оценить электростатические характеристики молекулы, что

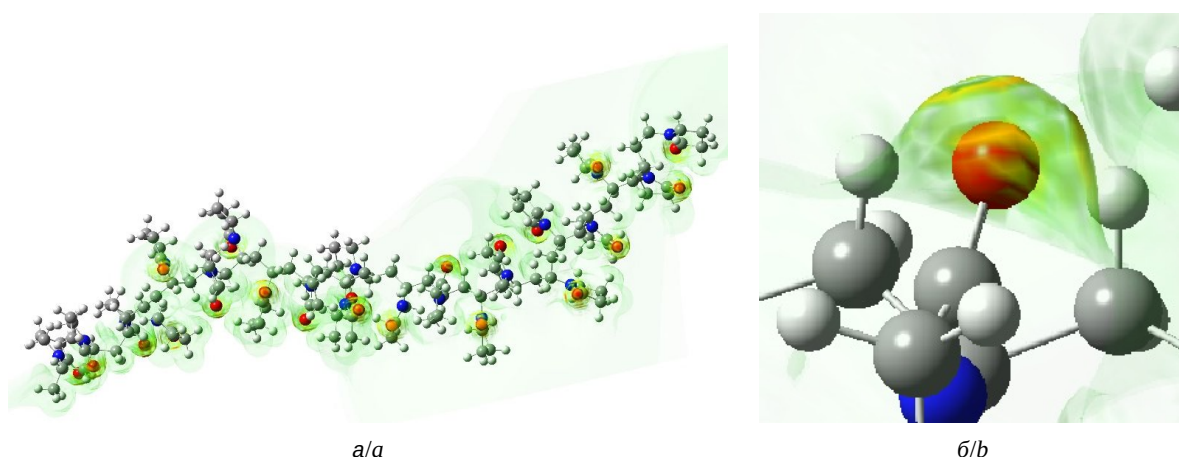


Рис. 3. Карта электростатического потенциала: фрагмент карты для поливинилпирролидона (а); фрагмент карты окрестности атома кислорода (положительный потенциал), вокруг атома – высокая электронная плотность (отрицательный потенциал) (б) (цвет онлайн)

Fig. 3. A color-coded map of the electrostatic potential: a fragment of polyvinylpyrrolidone (a); an enlarged image of an oxygen atom (red), around which a high electron density is concentrated (negative potential)) (b) (color online)



имеет решающее значение для прогнозирования ее взаимодействий с другими соединениями, растворимости и химической активности. На рис. 3 визуализировано электростатическое поле фрагмента $[C_6H_9ON]_{15}$ в виде цветовой кодировки. Видно, что вблизи атома кислорода (красный цвет) сосредоточена высокая электронная плотность (зеленый цвет). Это говорит о том, что данный атом является реакционным центром ПВП.

2. 3. Исследования взаимодействия поливинилпирролидона с углеродными нанотрубками

Для изучения влияния слойности УНТ на процесс адсорбционного взаимодействия системы «ПВП+УНТ» были выбраны однослойные углеродные нанотрубки типа (9,9) и двуслойные углеродные нанотрубки, состоящие из внутренней трубки типа (6,6) и внешней типа (9,9). Выбранные УНТ относятся к хиральным видам (arm-chair) нанотубуленов и выбраны с учетом частого их применения (типичных диаметров). Так, УНТ (6,6) с диаметром $\sim 0,81$ нм считается одной из самых узких стабильных нанотрубок типа arm-chair и подходит для изучения квантовых эффектов и наноэлектроники, а УНТ(9,9)

(с диаметром $\sim 1,22$ нм) представляет более широкие нанотрубки, но остаётся в диапазоне, где сохраняются уникальные механические и электронные свойства. Также известно, что диаметр УНТ $\sim 1-2$ нм – типичный диапазон для многих экспериментов. Таким образом, можно предположить, что УНТ (6,6) и (9,9) покрывают ключевые точки в диапазоне диаметров, важных для исследований.

При моделировании в качестве объекта исследования использовали фрагмент полимера ПВП, содержащего 15 мономерных звеньев винилпирролидона $[C_6H_9ON]_{15}$. На основании проведенного анализа карт электростатического потенциала был выбран наиболее реакционно-способный центр, который способен обеспечить стабильную связь исследуемого фрагмента с поверхностью нанотрубок – атом кислорода, находящийся преимущественно в центре выделенного фрагмента. Моделирование адсорбционного взаимодействия проводили путем последовательного приближения ПВП (с шагом 0.1 Å) к определенному атому углерода на поверхности УНТ, находящемуся в центральной части кластера (в перпендикулярном направлении). На рис. 4 представлены полученные энергетические кривые, описывающие процесс адсорбционного вза-

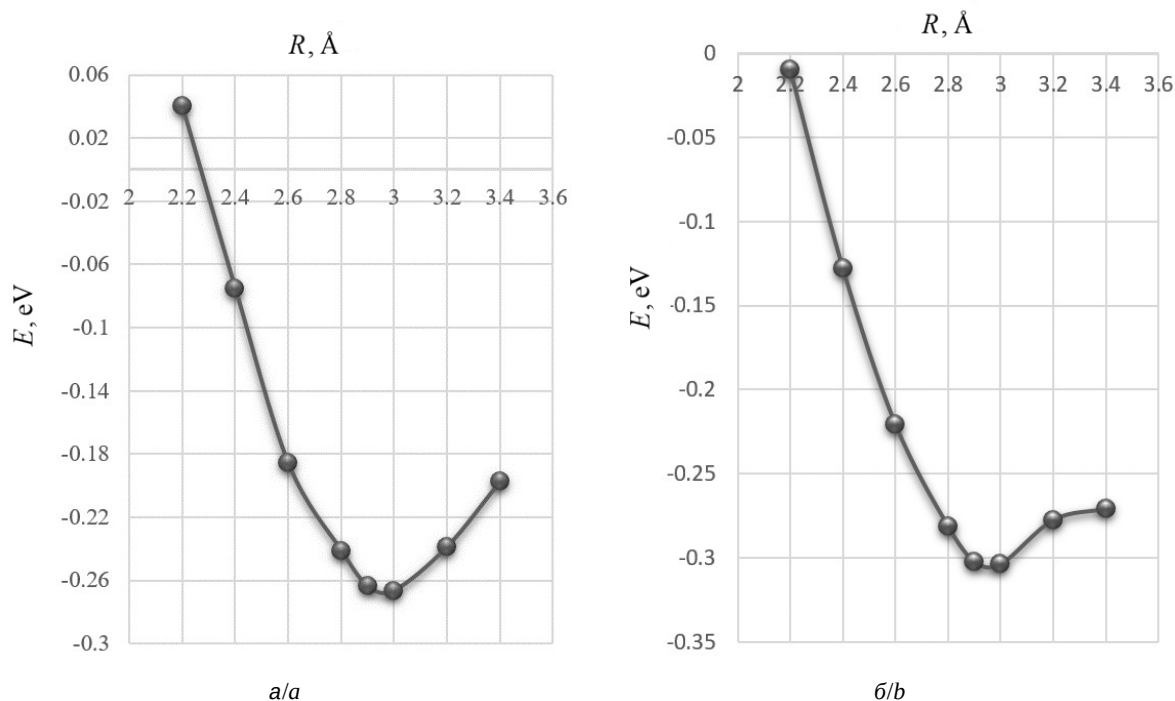


Рис. 4. Профили поверхности потенциальной энергии процесса взаимодействия фрагмента поливинилпирролидона в координатах расстояние R – энергия E : с однослойной УНТ (а), с двухслойной УНТ (б)

Fig. 4. Profiles of the potential energy surface of the polyvinylpyrrolidone fragment interaction process in distance R – energy E coordinates: with single-walled CNT (a), double-walled CNT (b)



имодействия фрагмента поливинилпирролидона $[C_6H_9NO]_{15}$ с однослойной УНТ типа (9,9) и двухслойной УНТ с внутренней трубкой (6,6) и внешней (9,9).

Проведенный анализ энергетических кривых показал, что адсорбционное взаимодействие фрагмента полимера ПВП с одно- и двухслойными УНТ с энергетической точки зрения не выявило предпочтений: значение энергии адсорбции фрагмента на поверхности однослойной УНТ составило 0.27 эВ, на поверхности двухслойной УНТ – 0.30 эВ, которые реализуются на расстоянии 3.0 Å. Этот результат позволяет сделать вывод о незначительном влиянии количества слоев в углеродной нанотрубке на формирование композитной системы «ПВП+УНТ». Теоретические расчеты позволяют говорить о физической природе адсорбционного процесса за счёт сил Ван-дер-Ваальса, являющегося обратимым. При этом, согласно литературным, требуемая энергия активации для физической адсорбции происходит на больших расстояниях за счёт слабых взаимодействий до 80 кДж/моль (~ 0.83 эВ) [25]².

Результаты квантово-химического анализа электростатических потенциалов и распределения атомных зарядов свидетельствуют о некой перестройке электронной структуры при формировании комплекса углеродной нанотрубки с фрагментом ПВП. Так, заряд атомов углеро-

да изолированной нанотрубки близок к нулевому значению (рис. 5, а), в то время как при взаимодействии с фрагментом ПВП *средний* заряд атомов углерода в области контакта составляет +0.043, а на атоме кислорода (реакционном центре) полимера достигает –0.517 (происходит перераспределение электронной плотности, рис. 5, б).

Полученные данные свидетельствуют о возникновении дополнительного кулоновского взаимодействия между углеродной нанотрубкой и полимерным фрагментом.

2.4. Анализ электронно-энергетического строения комплексов, образованных одно- / двухслойными УНТ и фрагментом ПВП

Исследование электронно-энергетического строения комплексов, образованных однослойными и двухслойными углеродными нанотрубками с фрагментом поливинилпирролидона, представляет значительный интерес для нанoeлектроники, управления проводимостью новых материалов. В работе рассмотрен фрагмент ПВП, состоящий из 15 структурных единиц – $[C_6H_9NO]_{15}$. Анализ ширины запрещенной щели ΔE_g комплексов, рассчитанной как разность энергий верхней заполненной $E_{ВЗМО}$ и нижней вакантной $E_{НВМО}$ молекулярных орбиталей, показало, что эти системы по типу

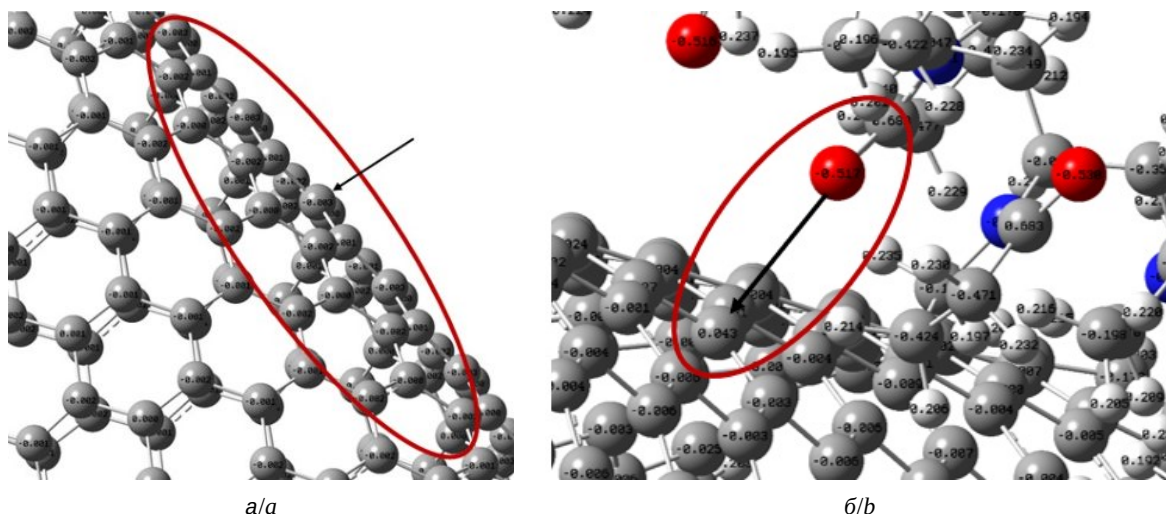


Рис. 5. Зарядовое распределение атомов: на поверхности изолированной УНТ (а); при взаимодействии УНТ с фрагментом ПВП (б)

Fig. 5. Charge distribution of atoms: on the surface of an isolated unit (a); during the interaction of the CNT with a PVP fragment (b)

²См. также: Лебедева М. В., Дулина О. А., Свитов В. И., Яштулов Н. А. Физико-химические особенности адсорбционных процессов в нанотехнологии : учебно-методическое пособие. М. : Мир науки, 2021. 46 с. URL: <https://izd-mn.com/PDF/46MNNPU21.pdf>



проводимости представляют собой полупроводники. При этом установлено, что величина ΔE_g для комплекса « $[C_6H_9NO]_{15}$ – УНТ» с однослойными УНТ составляет 0.42 эВ, а для системы с двухслойными УНТ – 0.36 эВ.

Полученные результаты демонстрируют, что включение углеродных нанотрубок в диэлектрическую матрицу ПВП приводит к формированию композитных материалов с полупроводниковыми характеристиками. На рис. 6 представлено схематическое отображение структуры одноэлектронных энергетических уровней для молекулярных орбиталей рассматриваемых систем – изолированных УНТ, ПВП и комплекса «ПВП+УНТ». Они отмечены синим, красным и зеленым цветами соответственно. Незаполненным молекулярным орбиталям отвечает черный цвет. Указаны энергетические характеристики для граничных орбиталей – высшей, занятой, молекулярной орбитали (ВЗМО) и низшей, свободной (вакантной), молекулярной орбитали (НСМО) для каждой структуры. В нижней части графического

изображения представлена разность ΔE_g между значениями ВЗМО и НСМО. Эти данные можно использовать для прогнозирования прочности и стабильности, а также проводящих свойств молекулярных комплексов.

Полученные теоретические результаты хорошо согласуются с результатами экспериментальных и теоретических работ, связанных с определением значений ширины запрещенной зоны углеродных нанотрубок [26]. Фундаментальная ширина запрещенной зоны в типичных полупроводниковых нанотрубках составляет от 0.4 эВ до 0.7 эВ³.

Таким образом, выполненные нами DFT-расчеты доказали, что взаимодействие нанотрубок с фрагментами полимера ПВП происходит как за счет ван-дер-ваальсовских сил, так и благодаря кулоновским взаимодействиям, обусловленным перераспределением электронной плотности при образовании комплекса. Эта информация важна для прогнозирования перспектив создания стабильного комплекса на основе поливинил-

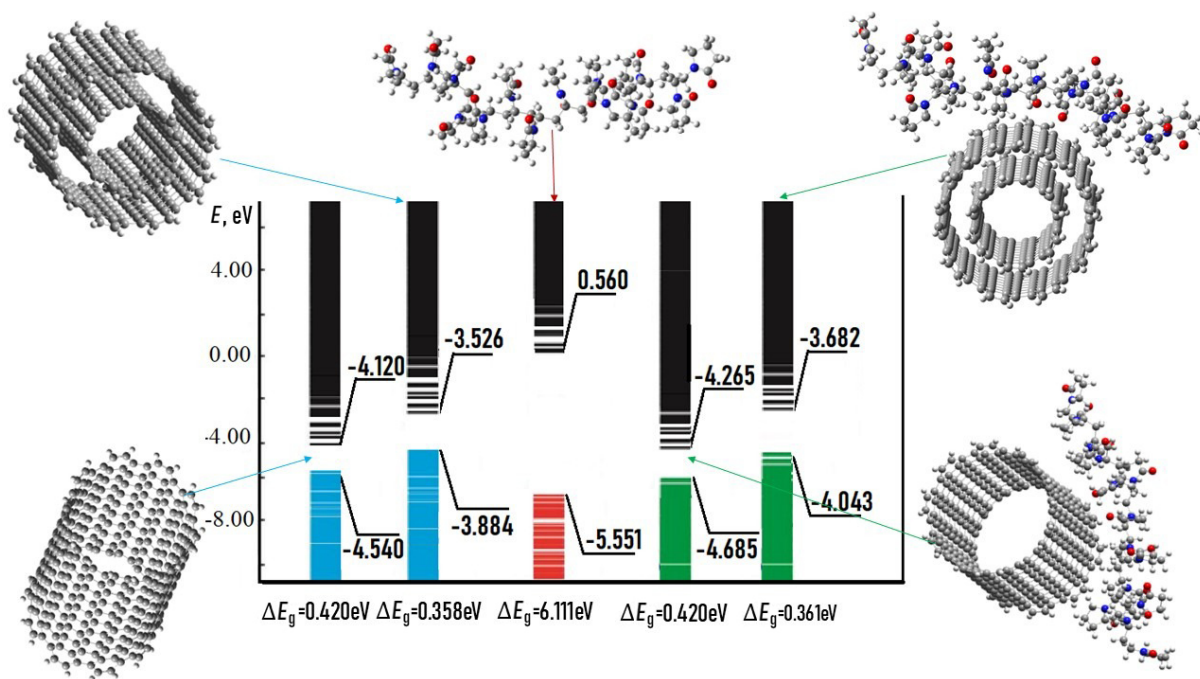


Рис. 6. Визуализация одноэлектронных энергетических спектров: одно- и двухслойных УНТ, кластеров изолированного фрагмента ПВП, систем «ПВП+УНТ». Приведены значения для ВЗМО и НСМО, ширина запрещенной зоны ΔE_g (цвет онлайн)

Fig. 6. Visualization of single-electron energy spectra of single- and double-walled CNTs, clusters of an isolated PVP fragment and CNT + PVP systems with indication of the values for the highest occupied molecular orbital (HOMO), the lowest unoccupied molecular orbital (LUMO) and also band gap (ΔE_g) (color online)

³См.: Рембеза С. И., Рембеза Е. С., Кошелева Н. Н. Низкоразмерные структуры для микро- и наноэлектроники : учебное пособие. Воронеж : Воронежский государственный технический университет, 2015. С. 64. URL: https://cchgeu.ru/upload/iblock/9e5/j1wjegia2han78uwonujrq4ep9bgor3w/04_UP_2015_Rembeza_Nizkorazmernye-struktury.pdf (дата обращения: 24.09.2025).



пирролидона, допированного углеродными нанотрубками различной слойности.

Выводы

Проведенное моделирование нанокомпозитных систем «ПВП+УНТ» позволило выявить существенное влияние углеродных нанотрубок на проводящие свойства исследуемых систем. Установлено, что углеродные нанотрубки, вводимые в диэлектрическую полимерную матрицу поливинилпирролидона, приводят к изменению электронно-энергетического строения создаваемых нанокомпозитных комплексов и появлению полупроводящего состояния полимерного композитного материала.

Полученные результаты демонстрируют перспективность использования углеродных нанотрубок для целенаправленного модифицирования электрофизических свойств полимерных матриц и создания функциональных нанокомпозитных материалов с заданными проводящими характеристиками.

Список литературы / References

1. Green M. J., Bhabtu N., Pasquali M., Adams W. W. Nanotubes as polymers. *Polymer*, 2009, vol. 50, iss. 21, pp. 4979–4997. <https://doi.org/10.1016/j.polymer.2009.07.044>
2. Ribeiro B., Botelho E. C., Costa M. L., Bandeira C. F. Carbon nanotube buckypaper reinforced polymer composites: A review. *Polímeros*, 2017, vol. 27, no. 3, pp. 247–255. <https://doi.org/10.1590/0104-1428.03916>
3. Jorio A., Dresselhaus G., Dresselhaus M. S. Carbon Nanotubes: Advanced topics in the synthesis, structure, properties and applications. Berlin, Springer, 2008. XXIV, 720 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-540-72865-8>
4. Liu Y., Kumar S. Polymer/carbon nanotube nano composite fibers – A review. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2014, vol. 6, iss. 9, pp. 6069–6087. <https://doi.org/10.1021/am405136s>
5. Alamry A., Rahimian S. S. K., Abdullah A. H., Arockiarajan A. Carbon nanotube characteristics and enhancement effects on the mechanical features of polymer-based materials and structures – A review. *Journal of Materials Research and Technology*, 2023, vol. 24, no. 5, pp. 6495–6521. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2023.04.072>
6. Elbakyan L. S., Zaporotskova I. V. Composite nanomaterials based on polymethylmethacrylate doped with carbon nanotubes and nanoparticles: A review. *Polymers*, 2024, vol. 16, no. 9, art. 1242. <https://doi.org/10.3390/polym16091242>
7. Elbakyan L. S., Zaporotskova I. V. Polypropylene modified with carbon nanomaterials: Structure, properties and application possibilities (A review). *Polymers*, 2025, vol. 17, no. 4, art. 517. <https://doi.org/10.3390/polym17040517>
8. Spitalsky Z., Tasis D., Papagelis K., Galiotis C. Carbon nanotube–polymer composites: Chemistry, processing, mechanical and electrical. *Progress in Polymer Science*, 2010, vol. 35, iss. 3, pp. 357–401. <https://doi.org/10.1016/j.progpolymsci.2009.09.003>
9. Fuchs M., Scheffler M. *Ab initio* pseudopotentials for electronic structure calculations of poly-atomic systems using density-functional theory. *Comp. Phys. Commun.*, 1999, vol. 119, pp. 67–98. [https://doi.org/10.1016/S0010-4655\(98\)00201-X](https://doi.org/10.1016/S0010-4655(98)00201-X)
10. Beckstedte M., Kley A., Neugebauer J., Scheffler M. Density functional theory calculations for poly-atomic systems: Electronic structure, static and elastic properties and *ab initio* molecular dynamics. *Comp. Phys. Commun.*, 1997, vol. 107, pp. 187–205. [https://doi.org/10.1016/S0010-4655\(97\)00117-3](https://doi.org/10.1016/S0010-4655(97)00117-3)
11. Perdew J. P., Zunger A. Self-interaction correction to density functional approximation for many-electron systems. *Phys. Rev. B*, 1981, vol. 23, no. 10, pp. 5048–5079. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.23.5048>
12. Becke A. D. Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior. *Phys. Rev. A*, 1988, vol. 38, no. 6, pp. 3098–3100. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.38.3098>
13. Reiher M., Salomon O., Hess B. A. Reparameterization of hybrid functionals based on energy differences of states of different multiplicity. *Theor. Chem. Acc.*, 2001, vol. 107, iss. 1, pp. 48–55. <https://doi.org/10.1007/s00214-001-0300-3>
14. Koch W., Holthausen M. C. *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*. 2nd ed. Weinheim, New York, Wiley-VCH, 2001. XIII, 300 p. <https://doi.org/10.1002/3527600043>
15. Elbakyan L. S., Hayrapetyan D. B., Mantashyan P. A. DFT study of GaAs quantum dot and 5CB liquid crystal molecule interaction. *J. of Molecular Graphics and Modelling*, 2025, vol. 136, art.108953. <https://doi.org/10.1016/j.jmgtm.2025.108953>
16. Ichkitidze L. P., Popovich K. D., Suchkova V. V., Ryabkin D. I., Petukhov V. A., Telyshev D. V., Selishchev S. V., Gerasimenko A. Yu. Flexible electrically conductive films based on biocompatible composite material. *Technical Physics*, 2025, vol. 95, iss. 3, pp. 643–652. <https://doi.org/10.61011/JTF.2025.03.59872.285-24> (in Russian).
17. Malka E., Margel S. Engineering of PVA/PVP hydrogels for agricultural applications. *Gels*, 2023, vol. 9, iss. 11, art. 895. <https://doi.org/10.3390/gels9110895>
18. Gökmeşe F., Uslu İ., Aytimur A. Preparation and characterization of PVA/PVP nanofibers as promising materials for wound dressing. *Polymer-Plastics Technology and Engineering*, 2013, vol. 52, iss. 12, pp. 1259–1265. <https://doi.org/10.1080/03602559.2013.814144>
19. Pople J. A. Nobel Lecture: Quantum chemical models. *Reviews of Modern Physics*, 1999, vol. 71, iss. 5, pp. 1267–1274. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.71.1267>



20. Electronic motion: Density functional theory (DFT). In: Piela L. *Ideas of quantum chemistry*. Amsterdam, Elsevier, 2007, ch. 11, pp. 567–614. <https://doi.org/10.1016/b978-044452227-6/50012-0>
21. Crisostomo S., Pederson R., Kozłowski J., Kalita B., Cancio A. C., Datchev K., Wasserman A., Song S., Burke K. Seven useful questions in density functional theory. *Letters in Mathematical Physics*, 2023, vol. 113, no. 2, art. 42. <https://doi.org/10.1007/s11005-023-01665-z>
22. Ghaffoori A. J., Abdul-Adheem W. R. A review of carbon nanotubes electrical properties for future nanotechnology applications. *J. of AL-Rafidain University College for Sciences*, 2019, vol. 45, iss. 2, pp. 207–222. <https://doi.org/10.55562/jrucs.v45i2.123>
23. David R. L. *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. Boca Raton, CRC Press, 2005, pp. 9-24–9-41.
24. Baron Ya. M., Ponomareva A. M., Ravdel A. A., Timofeeva Z. N. *Kratkii spravochnik fiziko-khimicheskikh velichin* [Ravdel A. A., Ponomareva A. M., eds. Brief reference book of physical and chemical quantities]. St. Petersburg, Ivan Fedorov Publ., 2003. 240 p. (in Russian).
25. Adamson A. W. *Physical Chemistry of Surfaces*. New York, John Wiley & Sons, Inc., 1976. 728 p. (Russ. ed.: Moscow, Mir, 1979. 568 p.).
26. Miao R., Liang Y., Zhou G., Deng Y., Wang L., Deng J., Shao Q. Single walled carbon nanotubes band gap width measurement and the influence of nitrogen doping research. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2024, vol. 26, iss. 3, pp. 1616–1624. <https://doi.org/10.1039/d3cp05332f>

Поступила в редакцию 25.06.2025; одобрена после рецензирования 10.07.2025;
принята к публикации 10.09.2025; опубликована 28.11.2025

The article was submitted 25.06.2025; approved after reviewing 10.07.2025;
accepted for publication 10.09.2025; published 28.11.2025

ИЗ ИСТОРИИ ФИЗИКИ

Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 505–518
Izvestiya of Saratov University. Physics, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 505–518
<https://fizika.sgu.ru> <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-505-518>, EDN: XLOSUU

Научная статья
УДК 929.52

Академик Лев Петрович Питаевский: саратовские годы жизни, семейная аура

С. В. Чурочкина, Д. В. Чурочкин, В. М. Аникин[✉]

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

Чурочкина Светлана Викторовна, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики твердого тела, klechshevskaya@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2028-195X>, AuthorID: 144520

Чурочкин Дмитрий Викторович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики твердого тела, churd2000@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9575-6729>, AuthorID: 41545

Аникин Валерий Михайлович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры радиотехники и электродинамики, AnikinVM@sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6506-6997>, AuthorID: 166229

Аннотация. В статье освещается саратовский период жизни академика РАН Льва Петровича Питаевского (1933–2022) в контексте генеалогической линии нескольких поколений Питаевских от начала XIX в., когда прапрадед Л. П. Питаевского Трофим Ефимович носил фамилию Питаев. Помещены развернутые биографические сведения о близких родственниках академика – П. И. Питаевском, отце, А. С. Фейгельсон, матери, Л. Л. Лукашинской, жене. Все они получили высшее образование в Саратовском государственном университете. С приведением оригинальных материалов рассказано о школьных годах Л. П. Питаевского и его учебе на физическом факультете Саратовского университета. При написании статьи использованы данные Государственного архива Российской Федерации, Российского государственного архива социально-политической истории, Государственного архива Саратовской области, Государственного архива новейшей истории Саратовской области, Архива Саратовского университета, а также воспоминания людей, близко знавших Л. П. Питаевского. Подчеркивается высокий интеллектуальный уровень семьи, в которой родился и рос будущий академик, его раннее ярко выраженное стремление к научному творчеству. В биографиях Питаевских нашли отражение политические и социальные особенности страны в XX столетии.

Ключевые слова: Лев Петрович Питаевский, Саратовский государственный университет, физический факультет

Для цитирования: Чурочкина С. В., Чурочкин Д. В., Аникин В. М. Академик Лев Петрович Питаевский: саратовские годы жизни, семейная аура // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2025. Т. 25, вып. 4. С. 505–518. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-505-518>, EDN: XLOSUU

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

Article

Academician Lev P. Pitaevskii: Saratov years of life, family aura

S. V. Churochkina, D. V. Churochkin, V. M. Anikin[✉]

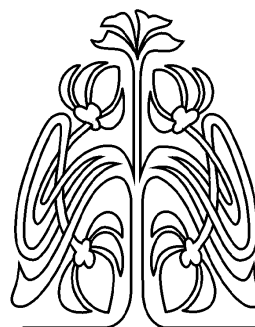
Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia

Svetlana V. Churochkina, klechshevskaya@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-2028-195X>, AuthorID: 144520

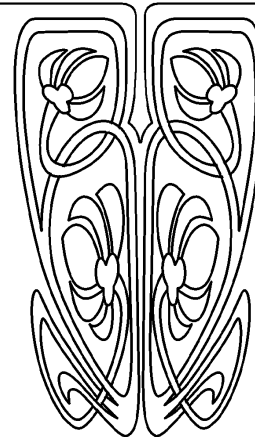
Dmitry V. Churochkin, churd2000@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9575-6729>, AuthorID: 41545

Valery M. Anikin, AnikinVM@sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6506-6997>, AuthorID: 166229

© Чурочкина С. В., Чурочкин Д. В., Аникин В. М., 2025



**УНИВЕРСИТЕТСКАЯ
ЛЕТОПИСЬ**





Abstract. Background and Objectives: The article covers the Saratov period in the life of Academician of the Russian Academy of Sciences Lev P. Pitaevskii (1933–2022) in the context of the genealogical line of several generations of Pitaevskii from the beginning of the 19th century, when L. P. Pitaevskii's great-great-grandfather Trofim Efimovich bore the surname Pitaev. Detailed biographical information is provided about the academician's close relatives: Petr I. Pitaevskii, father, Anna S. Feigelson, mother, Lubov' L. Lukashinskaya, wife. All of them received higher education at Saratov State University. The article provides original materials about L. P. Pitaevskii's school years and his studies at the Physics Department of Saratov University. **Materials and Methods:** When writing this article, data from the State Archive of the Russian Federation, the Russian State Archives of Socio-Political History, the State Archive of the Saratov Region, the State Archive of the Modern History of the Saratov Region, the Archive of the Saratov State University, as well as the recollections of people who knew L. P. Pitaevskii closely were used. **Conclusion:** The high intellectual level of the family in which the future academician was born and raised, his early, clearly expressed desire for scientific creativity have been observed. The political and social peculiarities of the country in the 20th century have been reflected in the biographies of the Pitaevskii's. **Keywords:** Lev P. Pitaevskii, Saratov State University, Department of Physics

For citation: Churochkina S. V., Churochkin D. V., Anikin V. M. Academician Lev P. Pitaevskii: Saratov years of life, family aura. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 505–518 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-505-518>, EDN: XLOSUU

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

Введение

Академик Лев Петрович Питаевский (18.01.1933, г. Саратов – 23.08.2022, г. Тренто, Италия) – общепризнанный классик-универсал мировой теоретической физической науки, где ему принадлежит ряд выдающихся научных результатов. Он принимал участие в создании, обновлении и переиздании грандиозного многотомного курса по теоретической физике, «не сравнимого ни с каким другим по широте охвата, глубине и единству точки зрения, краткости и красоте математического аппарата» [1, с. 227]. Около 40 лет Л. П. Питаевский, занимая пост заместителя главного редактора журнала «Успехи физических наук», играл важную роль в определении его публикационной политики.

В то же время представляет интерес общий исторический и интеллектуальный «подтекст» эпохи, особенности научной среды, в которой формируется и реализуется личность крупного исследователя. Представляемое исследование можно рассматривать как развитие изложенного в [2] плана по описанию жизни Л. П. Питаевского в «интерьере эпохи», в которой он жил и работал. Материалы статьи, в основу которых положены редкие архивные документы, восстанавливают семейную генеалогию Питаевских, начиная с XIX столетия. Естественно, больше сведений удалось собрать о ближайшем семейном круге Л. П. Питаевского, состоявшем из его родителей (Петр Иванович Питаевский, Анна Самойловна Фейгельсон) и жены (Любовь Лазаревна Лукашинская). Эти сведения сохранили Государственный архив Российской Федерации (ГАРФ), Российский государственный архив социально-политической истории (РГАСПИ), Госу-

дарственный архив Саратовской области (ГАСО) и Государственный архив новейшей истории Саратовской области (ГАНИСО). Описаны также годы его обучения в Саратовском государственном университете с использованием личного дела студента Льва Питаевского, газетных публикаций того периода. Черты личности ученого рисуются в воспоминаниях его друзей и коллег.

В тексте при сообщении данных о Льве Петровиче Питаевском он именуется как Л. П. в целях исключения повторов фамилии.

Семейная генеалогия: от современности к старине глубокой

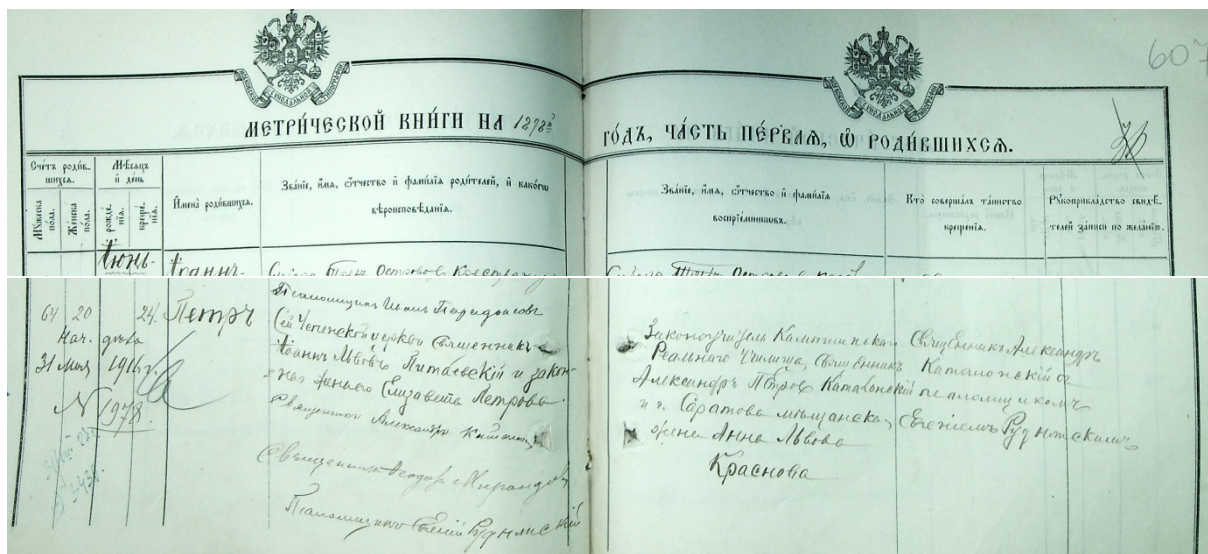
Генеалогическую (в основном – мужскую) линию Питаевских изложим в таком порядке – от Л. П. к его родителям, далее (в «цикле») от родителей к родителям родителей и т. п. В результате мы доберемся до некоторого «предела» «архивной видимости». В нашем случае этой «границей» окажется Трофим Ефимович Питаев, прапрадед Л. П.

Родителями Льва Петровича Питаевского были Петр Иванович Питаевский и Анна Самойловна Фейгельсон, заключившие официальный брак 15 октября 1925 г.¹ Будущий академик Л. П. Питаевский родился в Саратове 18 января 1933 г.

Отец Л. П. – Петр Иванович Питаевский. Он родился 20 июня (2 июля по новому стилю) 1898 г. в слободе Три Острова Балашовского уезда (ныне – районный центр Самойловка Саратовской области) в семье потомственного православного священника. Запись о рождении Петра Ивановича сделана в метрической книге за 1898 г. по приходу Успенской церкви слободы Три Острова².

¹ГАСО. Ф. Р-3755. Оп. 2. Д. 103. Л. 92, 121.

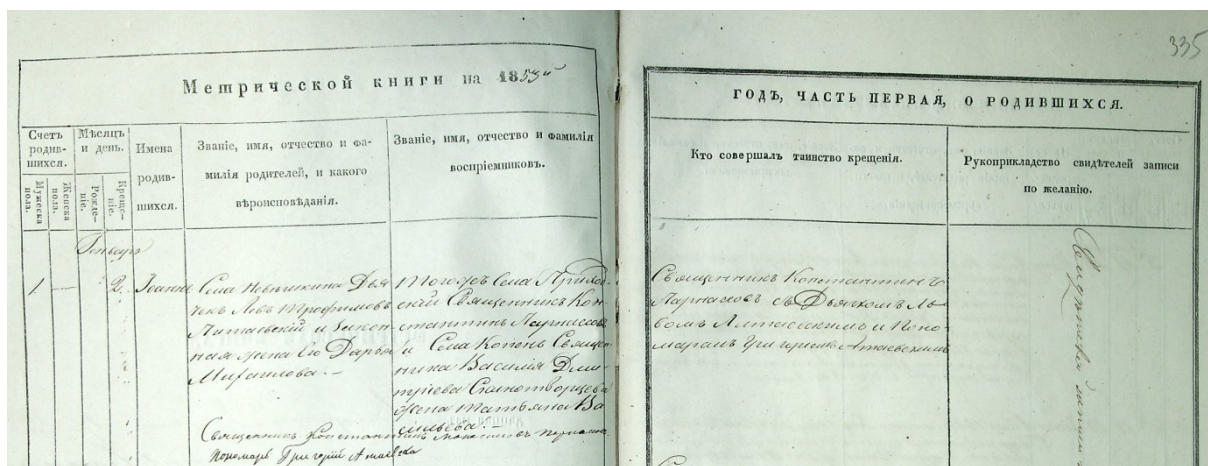
²ГАСО. Ф. 637. Оп. 2. Д. 1216. Л. 606 об, 607.



Фрагмент метрической книги 1898 г. с записью о рождении П. И. Питаевского
Fragment of the 1898 register of births with the entry about P. I. Pitaevskii

В книге записаны: имя (Петр), даты рождения (20 июня) и крещения (24 июня) ребенка, родители – «сеи Успенской церкви священник Иоанн Львов Питаевский и законная жена его Елизавета Петрова», восприемники (крестные родители) – «законноучитель Камышинского реального училища, священник Александр Петров Каталонский и г. Саратова мещанская жена Анна Львова», крестившие ребенка – священник Александр Каталонский с псаломщиком Евгением Руднянским». И. Л. Питаевский имел дом в Самойловке и работал законоучителем во 2-й земской школе. Его жена, бабушка Л. П., Каталонская Елизавета Петровна, 1857 г. рождения, была дочерью учителя.

Данные о дате рождения деда Л. П. – Питаевского Иоанна (Ивана) Львовича – имеются в метрической книге с. Невежино Аткарского уезда от 1853 г.: крестился 2 января 1853 г., его родители – «села Невешкино дьякон Лев Трофимов Питаевский и законная жена его Дарья Михайлова», восприемники – «того же села приходской священник Константин Парнасов и села Копены священника Василия Дмитриева Скинотворцева жена Татьяна Васильева», совершали «таинство крещения» – «священник Константин Парнасов с дьяконом Львом Питаевским и пономарем Григорием Атаевским»³.



Фрагмент метрической книги 1853 г., с. Невежино Аткарского уезда
Fragment of the 1853 register of births, the village of Nevezhino, Atkarsky district

³ Там же. Ф. 637. Оп. 1. Т. 1. Д. 266. Л. 334 об, 335.



Впоследствии Лев Трофимович стал причетником церкви с. Дивовка Аткарского уезда, а потом был перемещен на псаломщическое место к Крестовоздвиженской церкви сл. Водопьяновой Аткарского уезда.

Метрическая книга Покровской церкви с. Поповка Саратовской округи за 1827 г. позволяет выйти на дату рождения **прадеда Л. П.** – Питаевского Льва Трофимовича: он родился и был крещен 12 февраля 1827 г.⁴; родители – «пономарь Трофим Ефимов», восприемники – «священник Стефан Димитревский и женка Марья Ефимова».

Сведения о **прапрадеде Л. П.** Трофиме Ефимовиче Питаеве⁵ и прабабушке Мавре Ивановне позволяют уточнить данные той же Покровской церкви 1837 г. о рождении 5 января 1837 г. Саввы, младшего брата Льва. Родители: «села Поповки пономарь Трофим Ефимов Питаев и законная жена его Мавра Иванова»; восприемники – «того же села священник Стефан Григориев Димитревский; того же села Дякона Иоанна Павлова Куракина жена Екатерина Михайлова»; совершали крещение – «молитвован имя нарек и крещение

совершил той же церкви священник Стефан Григориев Димитревский, при крещении находились Дякон Иоанн Павлов Куракин, дьячок Симон Ананов Гусев, пономарь Александр Васильев Серебряков»⁶. Как видим, фамилия рода Питаев была преобразована в фамилию Питаевский, что было характерно для русского православного духовенства XVIII – XIX веков.

Краткая биография Петра Ивановича Питаевского

Начальные биографические сведения об П. И. Питаевском, отце академика Л. П. Питаевского, можно найти в клировой ведомости⁷ Успенской церкви слободы Три Острова Балашовского уезда Саратовской губернии за 1917 г.⁸ Последующие, более полные, биографические данные П. И. Питаевского обнаружались в Государственном архиве Российской Федерации⁹.

Как уже говорилось, Петр Иванович Питаевский родился 20 июня (2 июля) 1898 г. в многодетной семье Ивана Львовича и Елизаветы Петровны Питаевских. Петр был самым

Часть первая орождающихся.				
№.	Число рожде- ния.	У кого кпо родился.	Число креще- ния.	Кто восприемники.
39	12	поповки Трофим Ефимов Питаев	12	Стефан Димитревский и Марья Ефимова

Фрагменты из метрической книги 1827 г. Покровской церкви с. Поповка Саратовского уезда

Fragments from the 1827 register of births, Pokrov church, Popovka village, Saratov district

⁴ГАСО. Ф. 637. Оп. 1. Д. 1591. Л. 497.

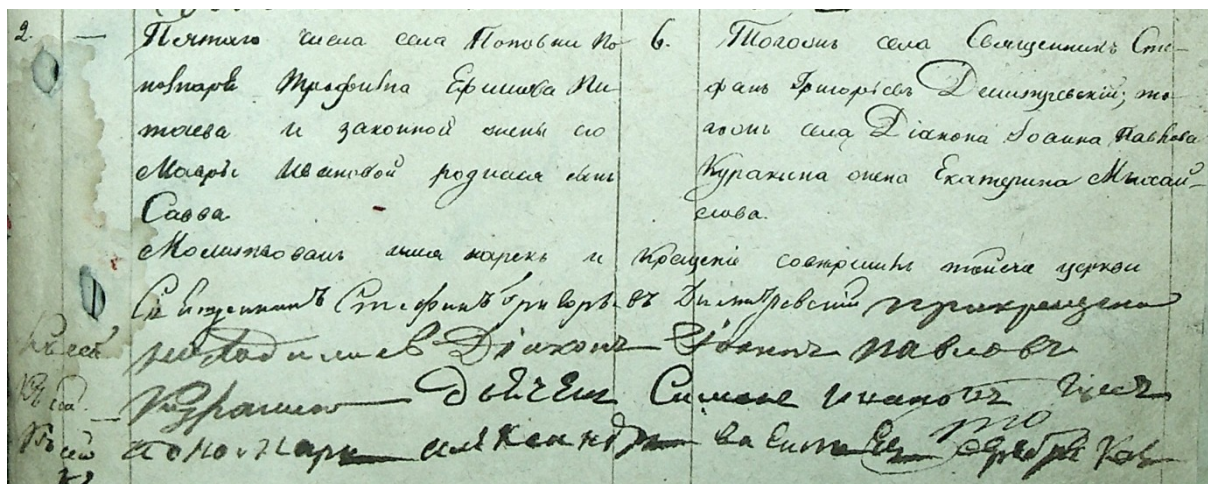
⁵Там же. Ф. 28. Оп. 1. Д. 153. Л. 45, 45 об.

⁶Там же. Ф. 637. Оп. 1. Т. 3. Д. 1631. Л. 314.

⁷Клировые ведомости – официальные документы, которые составлялись в каждом храме. В них была представлена подробная информация о причте (служителях) и приходе. В частности, клировые ведомости содержали послужные списки священнослужителей (священник и дьякон) и церковнослужителей (псаломщик, чтец (клирик), певчий и др.), а также сведения об их ближайших родственниках. В послужном списке священника указывались: сведения: полное имя, возраст, где родился, какого звания родители, какое учебное заведение и в каком году окончил, в каком году рукоположен в священнический сан и когда поставлен на настоящее место, где и когда служил в других местах, какие имеет награды, состоит ли учителем, имя и возраст супруги, имена, фамилии, возраст детей священника и где они учатся. В послужном списке псаломщика указывались: полное имя, возраст, когда и какое учебное заведение окончил, с какого времени определен на должность и посвящен в стихарь, имена жены и детей, в каком учебном заведении они обучаются.

⁸ГАСО. Ф. 135. Оп. 1. Д. 7973. Л. 8 об, 9.

⁹ГАРФ. Ф. Р-9506. Оп.10. Ед. хр. 232. Л. 1–55.



Фрагмент из метрической книги 1837 г. Покровской церкви с. Поповка Саратовского уезда
 Fragment from the 1837 register of births, Pokrov church, Popovka village, Saratov district

младшим из детей, остальные к моменту его рождения были уже устроены в жизни: Вера (1878 г. рожд.), Антонина (1879 г. рожд.), Галина (1888 г. рожд.), Лев (1889 г. рожд.). Брат Лев работал инженером на пороховом заводе в Петрограде.

С 1910 по 1916 г. Петр Питаевский учился в Балашовской мужской гимназии. Поступал после ее окончания в Московский университет, но вскоре вернулся на родину. С 1 января 1917 г. начал работать учителем в сельской школе II ступени в с. Самойловка. С 1 марта по 5 августа 1921 г. совмещал педагогическую деятельность с заведованием волостным политпросветом. С 5 августа 1921 г. по 9 ноября 1922 г. был членом уездного Исполкома и заведовал уездным политпросветом (уездным отделом народного образования) в Елани Сталинградской (ныне Волгоградской) области.

9 ноября 1922 г. П. И. Питаевский был командирован на учебу в Саратовский институт народного хозяйства, который впоследствии был преобразован в факультет общественных наук (ФОН) Саратовского государственного университета (СГУ). В 1924 г. ФОН стал именоваться факультетом хозяйства и права (ФХП). Петр Питаевский учился по программе и учебному плану цикла «Регулирование народного хозяйства». 1 мая 1925 г. он окончил экономическое отделение ФХП СГУ, получив диплом экономиста.

Во время обучения в университете Петр Иванович охотно участвовал в общественной

деятельности. Писал небольшие статьи в «общественно-научный, литературно-художественный иллюстрированный журнал» саратовского студенчества «Студенческая мысль»¹⁰.

Четыре года, с 1 августа 1924 г. по 1 августа 1928 г. П. И. Питаевский проработал экономистом в Областном (Нижне-Волжском) конъюнктурном бюро Госплана СССР. 1 августа 1928 г. был назначен заведующим сектором Нижне-Волжского крайплана (Саратов). Примета тогдашнего времени: в 1929 г. он проходил «чистку» госаппарата и получил статус «проверен». С 1930 по 1932 г. был членом Президиума Крайплана.

С 1 июля 1930 г. П. И. Питаевский преподавал (по совместительству) в Саратовском плановом экономическом институте Центросоюза в должности доцента, вел курс «Планирование советской торговли». С 1 ноября 1932 г. перешел в Саратовский плановый институт Госплана РСФСР, где в должности доцента кафедры народнохозяйственного планирования читал курс «Планирование народного хозяйства» и продолжал целеустремленно заниматься научной работой.

5 января 1935 г. квалификационной комиссией Госплана СССР был утвержден в звании доцента по кафедре народнохозяйственного планирования. 13 июня 1938 г. решением Совета Московского планового института Госплана СССР ему была присуждена степень кандидата экономических наук. 15 октября 1938 г. он ста-

¹⁰ Питаевский П. Дух вещей. Шутка // Студенческая мысль. 1923. № 1. С. 37–38; Питаевский П. Бриллиант // Студенческая мысль. 1923. № 6–7. С. 3.



новится деканом промышленного факультета, а 15 декабря 1938 г. – заведующим кафедрой народнохозяйственного планирования Саратовского планового института.



P. I. Pitaevskii

Петр Иванович Питаевский, 1938 г. (ГАРФ)
Petr I. Pitaevskii, 1938 (The State Archive
of the Russian Federation)

В годы Великой Отечественной войны П. И. Питаевский вел научно-популяризаторскую работу: читал лекции по экономическим вопросам для партийно-хозяйственного актива крупнейших оборонных предприятий г. Саратова, участвовал в организации экономического лектория, руководил его планово-экономическим циклом. С 1 октября 1944 г. работал по совместительству в Саратовском кредитно-экономическом институте доцентом по курсу народно-хозяйственного планирования и заведующим Саратовским филиалом Всесоюзного заочного института советской торговли Наркомторга СССР.

В 1946 г. П. И. Питаевский продолжил свою деятельность в новой структуре – Саратовском экономическом институте, образованном в результате объединения Саратовского планового института Госплана РСФСР и Саратовского кредитно-экономического института. 21 февраля 1959 г. Петр Иванович получил ученое звание профессора по кафедре народнохозяйственного планирования (без защиты докторской диссертации). Он назначается заместителем директора (с 1961 г. – проректором) института по учебной и научной работе. Оставив этот пост в конце

1962 г., П. И. Питаевский заведовал кафедрой планирования народного хозяйства Саратовского экономического института вплоть до своей смерти 23 июня 1969 г. За 40 лет своей научно-педагогической деятельности он опубликовал несколько десятков работ в области плановой региональной экономики. Среди них – учебники, изданные в Москве:

Питаевский П. И. Планирование хозяйства района. Планирование местного хозяйства и культурного строительства административного района : учебное пособие для экономических ВУЗов. М. : Госполитиздат, 1952. 342 с.

Питаевский П. И. Планирование хозяйства района. Планирование местного хозяйства и культурного строительства в административном районе : учебное пособие для экономических ВУЗов. Изд. 2-е, перераб. и доп. М. : Госполитиздат, 1955. 356 с.

Краткая биография Анны Самойловны Фейгельсон

В архивах ГАРФ, РГАСПИ, ГАСО и ГАНИСО имеются отдельные сведения об Анне Самойловне Фейгельсон, матери Л. П. Питаевского.

Анна (Хана) Фейгельсон родилась 18 февраля (3 марта) 1903 г. в слободе Покровской (ныне – г. Энгельс Саратовской области). У нее, согласно списку общины, был старший брат Яков, родившийся 24 декабря 1900 г. (6 января 1901 г.)¹¹. Более подробные данные о семье можно найти в личном деле Якова Самуиловича Фейгельсона, в начале 1930-х гг. работавшего преподавателем (заместителем председателя) кафедры истории рабочего движения в Международной ленинской школе в Москве и готовившего рукопись книги об истории революционного движения¹². Родителями Якова и Анны были мелкие ремесленники: отец – Фейгельсон Самуил Израилевич (Шмуель Сролевич) – часовщик, родом из Двинска, мать Эсфирь Александровна (урожденная Коробкова) – чулочница, родилась в слободе Покровской. В своих анкетах их дети позиционировали свое сословие так: «из мещан».

С 1906 г. семья жила в Саратове¹³. Училась Анна Самойловна в Саратове с 1912 по 1920 г. в гимназии и (после революции) в школе II ступени. В 1920 г. поступила на экономическое отделение факультета общественных наук Саратовского университета, который окончила в 1924 г. (факультет стал именоваться факультетом хозяйства и права). Полученная ей специальность –

¹¹ ГАСО. Ф. 637. Оп. 2. Д. 3777-Б. Л. 191.

¹² РГАСПИ. Ф. 495. Оп. 65 а. Д. 8354. Л. 14–15 об.

¹³ ГАРФ. Ф. Р-5144. Оп. 2. Д. 3510. Л. 1–32; Ф. Р-5284. Оп. 1. Д. 160. Л. 1–12.



экономист, преподаватель политической экономики. В период учебы, с 1922 г., после развода родителей жила с матерью у брата, работавшего председателем кафедры общественно-экономических наук Саратовского областного коммунистического университета имени В. И. Ленина (Комвуза)¹⁴.

В 1921–1922 гг. как «делегатка женорганизации» являлась научным сотрудником на кафедре статистики. С июля 1924 по август 1925 г. Анна Самойловна работала экономистом-статистиком в Областном (Ниже-Волжском) конъюнктурном бюро Госплана СССР. В 1925 г. профессора Саратовского государственного университета М. Н. Рагольский, Е. И. Шлифштейн и доцент П. С. Лебединский рекомендовали ее в аспирантуру Института экономических исследований при Российской ассоциации научно-исследовательских институтов общественных наук (РАНИОН) в Москве. Так, в своей рекомендации доцент кафедры политической экономики П. С. Лебединский писал:

«...Тов. Фейгельсон Анна Самойловна работала в руководимом мною семинарии по теоретической политической экономике на Факультете Хозяйства и Права Саратовского Государственного имени Н. Г. Чернышевского Университета, во II-м триместре 1923–24 академического года. Работая в семинарии, т. А. С. Фейгельсон проявила интерес к науке, умение работать, трудолюбие и вдумчивость. К исследовательской работе она, по моему мнению, вполне способна»¹⁵.

В этот период в Москве жил ее брат Яков, ставший слушателем исторического отделения Института красной профессуры. В январе 1926 г., предварительно выдержав испытание по теории марксизма и представив письменную работу, она стала аспиранткой РАНИОНа. Во время обучения в аспирантуре брала частные уроки немецкого языка, чтобы иметь возможность работать со специализированной литературой, занималась английским языком (французский язык изучала в университете).

Выехав 20 декабря 1926 г. на время зимних каникул в Саратов, она не смогла вернуться

к 3 января 1927 г. в Москву по болезни. По заключению врачей ей был необходим перерыв в обучении на несколько месяцев. В итоге в июле 1927 года она была из аспирантуры отчислена.

В сентябре 1927 г. Анна Самойловна поступает на работу в Саратовский Комвуз на должность ассистента кабинета экономики. В следующем году Комвуз переименовывают в Ниже-Волжский (Саратовский) Коммунистический университет имени В. И. Ленина. В октябре 1929 г. она становится заведующим кабинета экономики и ассистентом кафедры «по политэкономии». В январе 1930 г. вступает в секцию научных работников (профсоюз). Преподает политическую экономию. В 1931 г. в своей анкете она писала, что дополнительно работает секретарем кафедры и имеет учебную нагрузку 190 часов в год. В это время Анна Самойловна жила с мужем П. И. Питаевским и матерью в коммунальной квартире с общей площадью 30 кв. м.

В марте 1932 г. ее назначили доцентом кафедры. Против этого выступила «группа научных сотрудников», которая в газете «Коммузовец» назвала это назначение незаслуженным, принизила деятельность Фейгельсон и требовала от зам. проректора тов. Мартынова сообщить общественности Комвуза обоснования такого выдвижения, считая, что продемонстрированный «метод выдвижения сугубо бюрократичен, обойдена вся комвузовская общественность в лице секции научных работных месткома и партийной организации»¹⁵.

А. С. Фейгельсон считала выдвинутые обвинения незаслуженными, но сложившаяся обстановка посчитала невозможной для дальнейшего пребывания в Комвузе. 15 апреля она подала заявление об освобождении от работы¹⁶.

В последующие годы Анна Самойловна решительно поменяла свою профессию, получив медицинское образование. Об этом свидетельствуют данные как следственного дела Я. С. Фейгельсона (в 1937 г. он был обвинен в том, что состоял в троцкистско-зиновьевской оппозиции, осужден и сослан в Уралск)¹⁷, так и упоми-

¹⁴ГАНИСО. Ф. 140. Оп. 2. Д. 154. Л. 202–220. В этом архивном деле содержатся и другие используемые в статье сведения об А. С. Фейгельсон.

¹⁵За что выдвинута Фейгельсон? // Коммузовец. 1932. 17 марта. № 10 (38). С. 2.

¹⁶В архивном деле ГАНИСО (Ф. 138. Оп. 1. Д. 629. Л. 9–10) есть информация об обвинении Алексея Ивановича Мартынова, работавшего в Ниже-Волжской коммунистической сельскохозяйственной школе имени В. И. Ленина (преемнице Саратовского Комвуза), в том, что он с ноября 1932 г. по октябрь 1938 г. в качестве зам. проректора по учебной части не только не боролся с троцкистами, но и дважды устраивал у себя на кафедре доцентом и ассистентом неквалифицированную беспартийную сестру троцкиста Фейгельсон.

¹⁷ГАРФ. Ф. 10035. Оп. 2. Д. 26712. Л. 1–133 об.



навшейся анкеты П. И. Питаевского от 1938 г., где Анна Самойловна называлась студенткой медицинского института. В автобиографии Льва Петровича Питаевского от 22 июня 1951 г. [3, л. 2 об] отмечено, что его мать работает ассистентом кафедры патологической физиологии Саратовского медицинского института.

Анна Самойловна умерла 9 марта 1993 г. в Москве.

Школьные годы Льва Питаевского

Свою школьную эпопею в Саратове Лев Питаевский описал в автобиографии [3, л. 2, 2 об]: он начал учиться в 1940 г. в 5-й средней школе, продолжил обучение с 1942 г. в 28-й мужской неполной школе (здесь он 7 февраля 1947 г. вступил в члены ВЛКСМ), а в 1947–1950 гг. заканчивал обучение в 19-й мужской средней школе. В автобиографии [3, л. 2] отметил, что в школе он выполнял обязанности члена школьного комитета ВЛКСМ и секретаря комсомольского бюро класса.

О талантливом и инициативном Льве Питаевском так вспоминали его одноклассники:

«Класс наш окончательно сформировался на 8-м году обучения в престижной в Саратове 19-й мужской средней школе. С этого времени

мы и оказались вместе. В нашем юном коллективе сложилась группа одаренных молодых людей, к которым тянулось большинство других учеников. Явным центром этой группы были два человека: Лев Питаевский и Венедикт Егоров, связанные предыдущей совместной учебой и прекрасной юношеской дружбой. Каждому школьнику в классе по обыкновению дают какое-то прозвище, обычно смешное. Льва и Венедикта называли уважительно – «гиганты мысли». Оба учились безукоризненно. Венедикт был похож на мыслителя-созерцателя. Лев же был не только мыслителем, но и обладал очень живым и энергичным характером.

<...>

Одаренность Льва на всех производила впечатление. Феноменальная память, умение мгновенно «схватывать» суть вопроса в сочетании с удивительной работоспособностью благоприятствовали его быстрому росту уже в школьные годы. Еще одна поражавшая нас черта – удивительно быстрое чтение. Читал он много, интересовался не только физикой и математикой, но и историей и хорошо знал ее. Его школьным увлечением довольно длительное время был интерес к радиотехнике. Лев Питаевский стал не только автором идеи, но и непосредственным исполнителем программы создания школьного радиоузла, его первым диктором.

<...>

Всегда активный и достаточно независимо себя ведущий, Лев был постоянным участником общественной жизни школы. <...> Он был членом комсомольского бюро школы. Направляющая роль вышестоящих инстанций во многом заключалась в периодических проверках работы. Такие провер-



Золотые медалисты средней школы № 19 г. Саратова, 1950 г. (слева направо):
Евгений Никитин, Венедикт Егоров и Лев Питаевский

Gold medalists of Secondary School No. 19 of Saratov, 1950 (from left to right):
Evgeny Nikitin, Venedikt Egorov and Lev Pitaevskii



ки райкомом ВЛКСМ переживали и мы. Помним, как во время одной из них у наших активистов накопилось много претензий к райкомовским работникам. На заключительном общем собрании по итогам проверки было объяснено, что главное – самокритика. В своем выступлении Лев Питаевский заявил: «Мы согласны со значением самокритики, но надеемся, что райком нас извинит, если сегодня мы будем критиковать главным образом его». Все мы захохотали и радостно зааплодировали. Представители райкома недовольно поморщились, а секретарь парткома школы, преподаватель истории, сделала страшные глаза и, глядя на смелого школьника, покачала головой. Но все ограничилось легкими внушениями» [4].

К числу лучших учеников школы принадлежал и Евгений Никитин. В 1950 г. Е. Никитин, В. Егоров и Л. Питаевский окончили школу с золотыми медалями. Впоследствии с профессором Е. Е. Никитиным Лев Петрович Питаевский опубликует ряд работ в журнале «Успехи физических наук».

Л. П. Питаевский всегда гостеприимно встречал своих школьных друзей, когда те приезжали в Москву по каким-то делам¹⁸.

Лев Питаевский – студент университета



Питаевский Л.

Лев Питаевский, 1951 г. [3]

Lev Pitaevskii 1951 [3]

Успешно сдав летом 1950 г. вступительные экзамены, Лев Петрович Питаевский поступил на физико-технический факультет Московского

государственного университета (МГУ). Но поступить в Москве, причем отлично успевая, он смог только год, так как факультет был расформирован. В июне 1951 г. Л. Питаевский переводится в Саратовский государственный университет на второй курс 1-го физического факультета. Занимался он на кафедре теоретической физики, которой руководил около 40 лет (с 1938 по 1979 г.) профессор Александр Самойлович (Шулим Шмулевич) Шехтер, ученик члена-корреспондента АН СССР Дмитрия Ивановича Блохинцева, работавшего в СГУ в 1935–1937 гг. и стоявшего у истоков возникновения этой кафедры.

Структуру образовательных дисциплин того времени отражает приводимая таблица. В ней, следуя записям в зачетной книжке Л. Питаевского, названы также преподаватели, работавшие на физическом факультете в первой половине 1950-х гг. С позиции настоящего времени можно твердо утверждать, что в годы учебы Л. Питаевского в СГУ работала плеяда прекрасных преподавателей, формировавших для своих студентов естественнонаучный «багаж» в будущее.

В зачетной книжке Льва Питаевского стоят только оценки «отлично», причем нередко зачеты и экзамены им сдавались досрочно. Об этом можно найти упоминание в газете СГУ «Сталинец».

Как и в школе, Лев Питаевский активно участвовал в общественной жизни физического факультета. На четвертом курсе он опубликовал в университетской газете «Сталинец» статью о политическом просвещении студентов¹⁹. Это был отклик на публикацию в той же газете «Нужна ли нам система обязательных теоретических конференций». Л. Питаевский ратовал за проведение таких конференций не в качестве самоцели, а как действенной «формы углубленного изучения марксистско-ленинской теории». Он считал, что участие в них должно быть добровольным и привел цитату из решения XII съезда комсомола (март 1954 г.): «покончить с бюрократическими извращениями и администрированием в организации политического просвещения».

А. С. Шехтер в должности декана в 1952 г. отметил достижения второкурсника Льва Питаевского в характеристике для военкомата.

¹⁸См.: Питаевский Л. П. О моем друге Виталии Очеве // Проблемы палеоэкологии и исторической геоэкологии : сб. научных трудов Всероссийской научной конференции, посвященной 80-летию со дня рождения профессора Виталия Георгиевича Очева / под ред. А. В. Иванова. Саратов : Издательство Саратовского государственного технического университета, 2012. С. 28, 29.

¹⁹Питаевский Л. П. Покончить с формализмом в политическом воспитании // Сталинец, 1954. 3 апреля. № 13 (535). С. 2.



Преподавательский контингент / Faculty

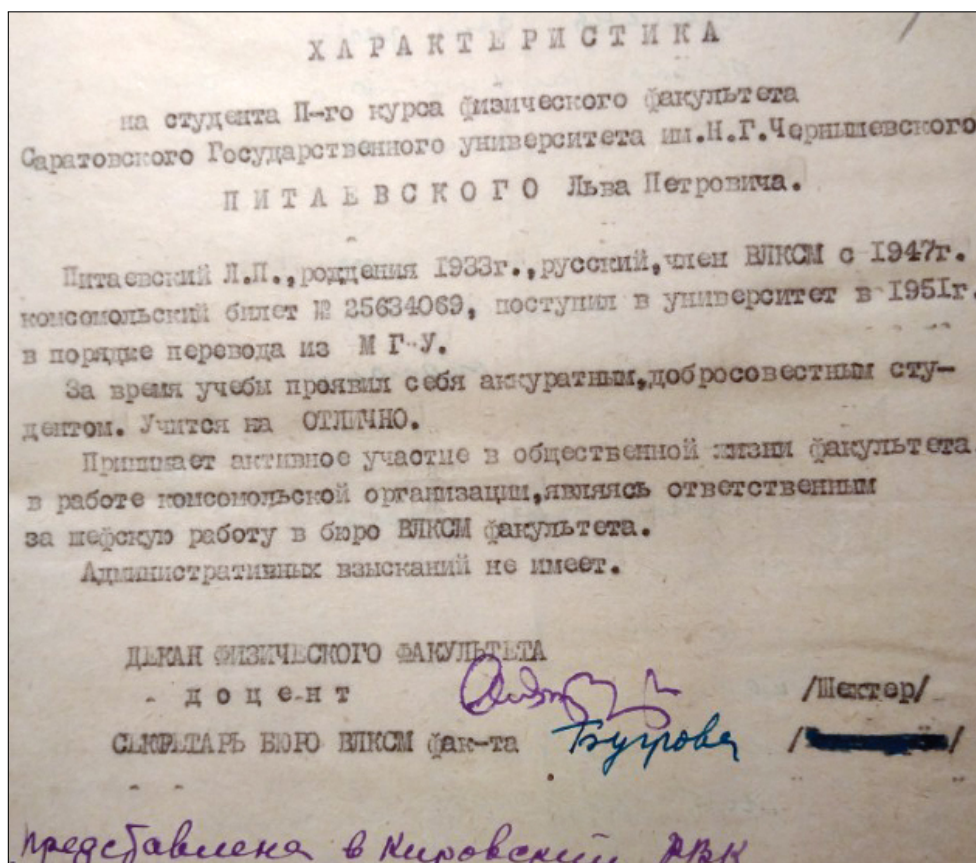
ФИО преподавателя	Учебная дисциплина
Физические дисциплины	
Андрианов А. С.	Физический практикум, ч. III, Лаборатория оптики
Баранов Л. И.	Спецкурсы (2), руководство курсовой работой
Бравин А. В.	Лекции по дисциплине «Общая физика (атомная физика)», семинары по дисциплинам «Общая физика (оптика)», «Общая физика (атомная физика)», Физический практикум
Голубков П. В.	Лекции по дисциплине «Общая физика, ч. II»
Евсеев В. И.	Лаборатория кафедры электроники
Игонин В. В.	Лекции по дисциплине «История физики»
Кац М. Л.	Лекции по дисциплине «Общая физика (оптика)»
Ковнер М. А.	Лекции по дисциплинам «Электродинамика», «Атомные спектры»
Попов Ф. М.	Спецлаборатория физики твердого тела, руководство производственной практикой по специальному плану, 5 курс, 9 семестр
Седин В. А.	Лаборатория «Электрорадиотехника»
Степухович А. Д.	Лекции по дисциплинам «Термодинамика», «Статистическая физика», «Спецкурс»
Тайков И. Ф.	Лаборатория молекулярной физики
Толстиков В. А.	Лекции по дисциплине «Основы электрорадиотехники»
Шевчик В. Н.	Семинары по дисциплине «Общая физика, ч. II», Физический практикум
Шехтер А. С.	Лекции по дисциплине «Квантовая механика», спецкурсы (3), Спецлаборатория, руководство дипломной работой
Штромберггер Л. В.	Лекции по дисциплине «Физика высокого вакуума», Вакуумная лаборатория
Математические дисциплины	
Бурмистров Е. Ф.	Лекции по дисциплине «Техническая механика»
Купцов Н. П.	Лекции по дисциплине «Методы математической физики»
Либер А. Е.	Лекции по дисциплине «Дифференциальная геометрия»
Павлючук Н. Г.	Семинары по дисциплине «Математический анализ»
Рассудов В. М.	Лекции по дисциплине «Теоретическая механика»
Рахманов Б. Н.	Лекции по дисциплинам «Математический анализ», «Дифференциальные уравнения»
Гуманитарные дисциплины	
Лобанова М. Т., Смирнова Л. А.	Английский язык
Эльфанд Я. А.	Основы марксизма-ленинизма
Зелькина О. С.	Диалектический материализм
Рорер А. Ш.	Исторический материализм
Сескутова А. А., Бабайцев К. Ф., Конева Н. А., Петров В. И.	Политическая экономия
Практика, военная подготовка, физическая культура	
Шахматов В. Б.	Педагогическая практика (в Железнодорожной школе № 4 г. Саратова с 01.03.1955 г. по 14.03.1955 г.)
Воробьев Н. П., Диденко В. М.	Дисциплины по военной подготовке
Ломанов	Местная противовоздушная оборона
Кожевников П. П.	Физвоспитание

ЭКЗАМЕНЫ СДАНЫ ДОСРОЧНО

Студенты III курса физическо-математического факультета Евгений Никитин, Лев Пятаевский досрочно сдали все 5 экзаменов по политэкономии, методам математической физики, статистической физике и др. Все экзамены сданы на «отлично».

Университетская газета «Сталинец», 27 июня 1953 г.

The newspaper "Stalinets" dated June 27, 1953



Студенческая характеристика Льва Питаевского, 1952 г.
Student characteristics of Lev Pitaevskii, 1952

После окончания университета Лев Питаевский мечтал продолжить свое образование в Москве, в Институте физических проблем. Своеобразный «барьер», который нужно было преодолеть, чтобы попасть в аспирантуру этого института и считаться учеником Л. Д. Ландау, была система из 9 экзаменов по теоретической физике, именовавшаяся теоретическим минимумом Ландау: по математике (два), механике, теории поля, квантовой механике, статистической физике, механике сплошных сред, электродинамике сплошных сред и квантовой электродинамике.

Саратовский историк А. И. Аврус о «марафоне» Л. П. Питаевского по сдаче теорминимума Ландау» писал:

«Со школьных лет Питаевский отличался выдающимися способностями и хотел продолжить учебу в аспирантуре у академика Л. Ландау. А для этого надо было сдать знаменитый «минимум Ландау». Лев рассказывал мне, как на 5-м курсе он несколько раз ездил к Ландау и сдавал один экзамен за другим. Экзамены были настолько трудными и индивиду-

альными, что в Саратове не у кого было получить консультацию, все надо было осваивать самостоятельно. Продолжая успешно учиться на 5-м курсе и завершая дипломную работу, Лев одновременно сдал весь «минимум Ландау». Он стал аспирантом Ландау, одним из его лучших учеников» [5].

В составленном в 1961 г. самим Л. Д. Ландау перечне физиков, сдавших теорминимум в 1934–1961 гг., фамилия Питаевского – двадцать пятая²⁰.

На пятом курсе Л. П. Питаевский сдал на отлично государственные экзамены по общей физике и основам марксизма-ленинизма. 27 июня 1955 г. он защитил дипломную работу «Точное решение некоторых нестационарных задач в квантовой механике» (научный руководитель – Александр Самойлович Шехтер) с отличной оценкой. Как отмечается в [6, с. 169] в дипломной работе «оригинальным способом» были решены задачи о вынужденных колебаниях гармонического осциллятора, о параметрических колебаниях, о малых колебаниях диполя

²⁰См. Иоффе Б. Л. Без ретуши. Портреты физиков на фоне эпохи. М.: ФАЗИС, 2004. С. 10.



1. Каппанесц	33 д	22 Балашич	54 к
2. Лифшиц	34 д	23 Велен	55 к
3. Ахисер	35 (к)	24 Мехенд	55
4. Пацранку	35 2к	25 Питаевский	55 к

Фрагмент списка физиков-теоретиков, сдавших теорминимум Ландау
A fragment of the list of physicists, passed through the Landau theoretical minimum

в переменном (во времени) однородном (в пространстве) электрическом поле, о движениях частицы в переменных однородных электрических и магнитных полях».

Интересная коллизия возникла при оформлении выпускных документов. Сведения о защите дипломной работы подписали сразу два декана – З. И. Кирьяшкина (1-й физический факультет) и Б. М. Заморозков (2-й физический факультет). Некоторый период (первая половина 1950 гг.) у физиков было деканское двоевластие в связи с планами открыть в Саратовском университете специальный радиофизический факультет. Подводя итоги выпуска 1955 г., декан физического факультета Зинаида Ивановна Кирьяшкина отметила:

«Успешно окончившие факультет и положительно зарекомендовавшие себя в научной работе получают рекомендации для поступления в аспирантуру. В текущем году рекомендованы в аспирантуру: трое (Питаевский Л., Зайцева Н., Никитин Е.) – в институты АН СССР, двое (Богомолов, Забелин) – в аспирантуру физического факультета нашего университета»²¹.

Краткая биография Л. Л. Лукашинской

Учеба в Саратовском государственном университете не только дала старт блестящей научной карьере Льва Петровича Питаевского, но и сыграла решающее значение в его личной жизни. На физическом факультете он познакомился со своей будущей женой Любовью Лазаревной Лукашинской.

Любовь Лазаревна родилась 3 марта 1932 г. в Москве, где ее семья и жила до начала Великой Отечественной войны. В автобиографии, написанной в июне 1950 г., она сообщала [7, л. 5, 5 об]:

«До 1941 г. мы жили в Москве. Во время Великой Отечественной войны эвакуировались в Саратов, где и живем по настоящее время.

Родители отца были членами колхоза Минской обл. Родители матери: отец – рабочий крахмального завода; мать – домохозяйка.

Отец мой, Лазарь Самуилович, родился в 1906 г. в семье рабочего в Минске. В раннем детстве его отец умер. С 12 лет он работал на щетинной фабрике. Когда организовались колхозы, его мать вступила в члены колхоза и состояла в нем до самой смерти в 1941 г. В 1928 г. отец закончил рабфак и поступил в Московский институт механизации сельского хозяйства имени Калинина на отделение электрификации. В 1933 г. он окончил ВТУЗ и работал в Москве инженером-электриком. Отец имел авторское свидетельство за изобретение по механической обработке щетины.



Лукашинская

Л. Л. Лукашинская, 1950 г. [7]

L. L. Lukashinskaya 1950 [7]

22 июня 1941 г. он был мобилизован на фронт. 21 августа 1941 г. мой отец погиб.

Мать моя, Дмитровская Яна Синаевна, родилась в семье рабочего в Каменце. С 14 лет начала работать в перчаточной мастерской, затем была переведена на швейную фабрику «Октябрь» в качестве портнихи. В 1930 г. закончила рабфак и поступила в 1-й Московский медицинский институт. После его окончания она 4 года работала в сельской местности, а затем в Москве в поликлинике 3-да имени Сталина вплоть до начала войны. В 1941 г.

²¹Кирьяшкина З. Физический факультет // Сталинец. 1955. 18 июня. № 22–23 (590–591). С. 2.



я и мама эвакуировались в Саратов. Здесь она была направлена на работу на станцию «Скорая помощь» в качестве врача. Сейчас она работает заведующей лечебной частью этой же станции.

В 1946 г. в октябре я вступила в комсомол. В 1948–1949 учебном году была секретарем комсомольской организации 12-й женской средней школы. В 1950 г. окончила 10-ый класс школы.

Братьев и сестер у меня нет».

Любовь Лукашинская была зачислена на 1-й физический факультет Саратовского университета в 1950 г. При поступлении в университет в те годы сдавалось 7 экзаменов. Л. Лукашинская получила «отлично» на экзаменах по физике, русскому языку (устном и письменном), английскому языку. Оценкой «хорошо» отмечена ее успешная сдача экзаменов по математике (устной и письменной) и химии [7, л. 7]. И в университете она училась очень успешно. В университетской газете «Сталинец» за 1952 г.²² сообщалось о приказе ректора Р. В. Мерцлина, в котором Л. Лукашинской объявлялась (в числе ряда студентов) благодарность за активную работу в редакции этой газеты.

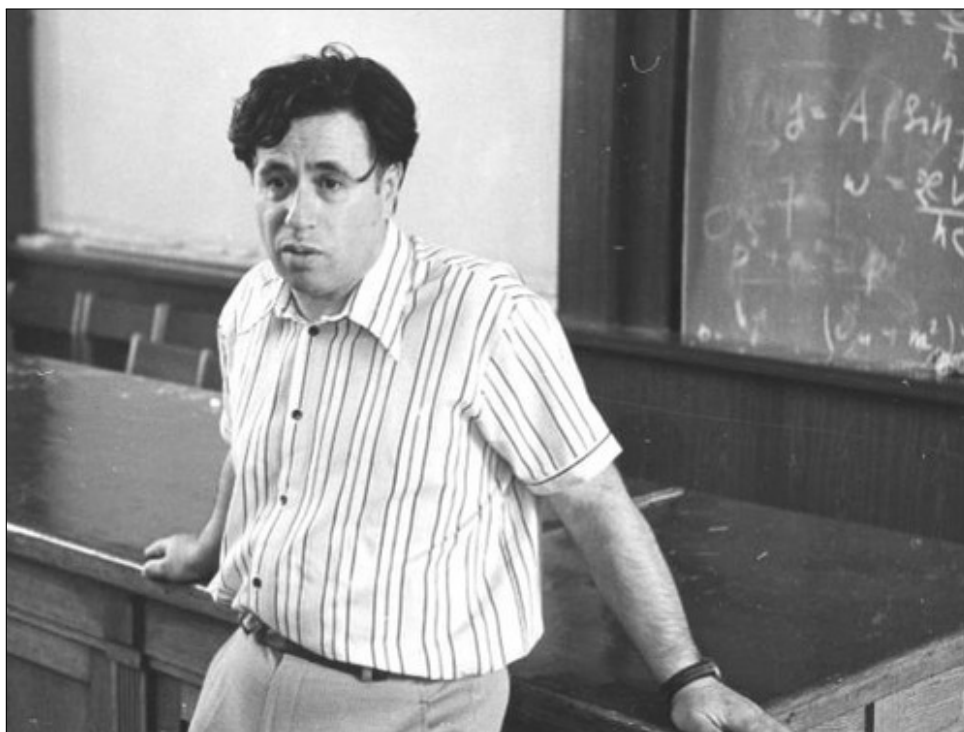
Университет окончила в 1955 г. по специальности «Физика», защитив на «отлично» ди-

пломную работу на тему «Исследование температурной зависимости электропроводности интерметаллических соединений». Государственные экзамены по физике и основам марксизма-ленинизма сдала на «отлично». После окончания Саратовского университета была направлена в распоряжение Министерства авиационной промышленности для работы в г. Саратове на завод № 292.

Дальнейшее краткое жизнеописание Л. Л. Лукашинской приведем, следуя [1]:

«В 1956 году Лев Петрович женился на своей сокурснице по Саратовскому университету Любови Лазаревне Лукашинской. Вскоре родился их сын Владимир. Брак был долгим и счастливым. Люба, как ее называли все друзья, сумела создать теплый гостеприимный дом, в котором Льву было приятно и удобно работать. <...>

В 1998 году Л. П. П. был приглашен Университетом Тренто (Италия) для совместной работы с группой профессора Сандро Стрингари. Здесь он прожил остаток своей жизни, регулярно посещая Россию во время сессий Академии наук, покада позволяло здоровье. Во время одного из этих посещений случилось трагическое столкновение автомобилей, убившее его жену Любу».



Л. П. Питаевский в Большой физической аудитории СГУ, 1977 г.

Lew P. Pitaevskii in the Large Physics Auditorium of Saratov State University, 1977

²²В ознаменование дня печати // Сталинец. 1952. 6 мая. № 19 (451). С. 1.



Вместо заключения. Приветствие академика Л. П. Питаевского к 70-летию физического факультета СГУ

«Дорогие коллеги, поздравляю вас с юбилеем факультета, точнее, с его выходом из детского возраста. Ведь возраст обычного взрослого факультета, вроде Факультета Свободных Искусств (а какое искусство свободнее, чем физика?!) Ягеллонского Университета – 650 лет. Так что нашему факультету нужно, по человеческим меркам, считать лет эдак 10. Не будем удивляться обилию потомков. У факультетов другая «физиология»...

Но – шутки в сторону. Желаю всем коллегам здоровья и благополучия. Коллеги-студенты должны знать, что студенческие годы – неповторимый по свежести чувств и восприятия период жизни. Дорожите каждой минутой. Мои студенческие годы совпали со сложным периодом в жизни нашей страны. (Впрочем, этот период, кажется, длится уже 1200 лет). Но теперь я понимаю, что все – и хорошее и плохое – было для меня чрезвычайно важно.

Я хочу в этот день вспомнить моих первых учителей теоретической физики, Ш. Ш. Шехтера и М. А. Ковнера. Шехтер был моим научным руководителем. Он глубоко понимал физику и отличался удивительной скромностью. Как-то он показал мне один из своих результатов, который стеснялся опубликовать. Впоследствии результат был независимо получен другим автором и вызвал значительный интерес. Шехтер немало способствовал моему пониманию физики и помог делом, когда заявка на мое распределение в АН СССР потерялась в канцелярии СГУ.

Замечу, что в то время я осознал «неприятную» черту профессии физика-теоретика. Чтобы сделать что-то стоящее, вы должны думать над задачей весь день – и часть ночи. Иногда это несовместимо с другими обязанностями.

Я желаю факультету развития и процветания, сотрудникам – здоровья и удачи в работе, а студентам – выбора профессии, соответствующей их способностям и успеха в ней.

Лев Петрович Питаевский,
выпускник физического факультета СГУ 1955 г.,
физик-теоретик, академик РАН.
16.02.2016».

Авторы выражают искреннюю благодарность доценту Анжеле Григорьевне Хачаянц, заведующей кафедрой истории музыки Саратовской государственной консерватории имени Л. В. Собинова, и Елене Иосифовне Гуревич, ведущему инженеру Института физики Саратовского национального исследовательского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского, за помощь в поиске и анализе исторических документов.

Поступила в редакцию 17.09.2025; одобрена после рецензирования 29.09.2025;
принята к публикации 10.10.2025; опубликована 28.11.2025

The article was submitted 17.09.2025; approved after reviewing 29.09.2025;
accepted for publication 10.10.2025; published 28.11.2025

Список литературы

1. Андреев А. Ф., Герштейн С. С., Гуревич А. В., Дмитриев В. В., Крейнс Н. М., Либерман М. А., Мейерович Б. Э., Покровский В. Л., Ритус В. И., Рютова М. П., Старобинский А. А., Фейгельман М. В., Фомин И. А., Чаплик А. В. Памяти Льва Петровича Питаевского // Успехи физических наук. 2023. Т. 193, № 2. С. 227–228. <https://doi.org/10.3367/UFNr.2022.12.039307>
2. Аникин В. М., Чурочкин Д. В., Чурочкина С. В., Черкасова О. А. К 90-летию со дня рождения Л. П. Питаевского // Физик: ученый, педагог, наставник. Сборник научных трудов. Саратов : Издательство «Саратовский источник», 2023. С. 47–48.
3. Архив Саратовского университета. Личное дело Питаевского Льва Петровича. 26 л.
4. Ильин В. С., Очев В. Г., Шуб Г. М. Питаевский Лев Петрович: К 70-летию со дня рождения // Известия Саратовского университета. Новая серия. 2003. Т. 3, вып. 1. С. 224–225.
5. Аврус А. И. Физики. Взгляд со стороны // Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика. 2011. Т. 19, № 3. С. 80–88.
6. Саратовский университет. 1909–1959. Саратов : Издательство Саратовского университета, 1959. 292 с.
7. Архив Саратовского университета. Личное дело Лукашинской Любови Лазаревны. 41 л.

References

1. Andreev A. F., Gershtein S. S., Gurevich A. V., Dmitriev V. V., Kreines N. M., Liberman M. A., Meierovich B. E., Pokrovsky V. L., Ritus V. I., Ryutova M. P., Starobinskii A. A., Feigel'man M. V., Fomin I. A., Chaplik A. V. In memory of Lev Petrovich Pitaevskii. *Phys. Usp.*, 2023, vol. 66, iss. 2, pp. 213–214. <https://doi.org/10.3367/UFNe.2022.12.039307>
2. Anikin V. M., Churochkin D. V., Churochkina S. V., Cherkasova O. A. To the 90th anniversary of L. P. Pitaevskii's birth. *Fizik: Uchenyj, pedagog, nastavnik. Sbornik nauchnykh trudov* [Physicist: Scientist, teacher, mentor. Collection of scientific papers]. Saratov, Izdatelstvo "Saratovskiy istochnik", 2023, pp. 47–48 (in Russian).
3. Archive of Saratov State University. Personal file of Lev P. Pitaevskii. 26 sh. (in Russian).
4. Il'in V. S., Ochev V. G., Shub G. M. Pitaevskii Lev Petrovich: To the 70th anniversary. *Izv. Saratov Univ.*, 2003, vol. 3, iss. 1, pp. 224–225 (in Russian).
5. Avrus A. I. Physicists. Intent look from without. *Izvestiya VUZ. Applied Nonlinear Dynamics*, 2011, vol. 19, no. 3, pp. 80–88 (in Russian).
6. Saratov State University. 1909–1959. Saratov, Saratov State University Publ., 1959. 292 p. (in Russian).
7. Archive of Saratov State University. Personal file of Lyubov' L. Lukashinskaya. 41 sh. (in Russian).

PERSONALIA

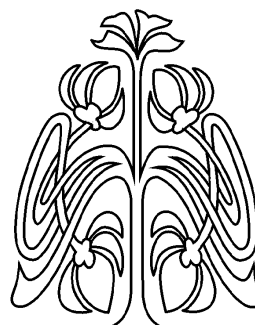
Памяти профессора Николая Ивановича Сеницына (01.06.1937–02.11.2025)



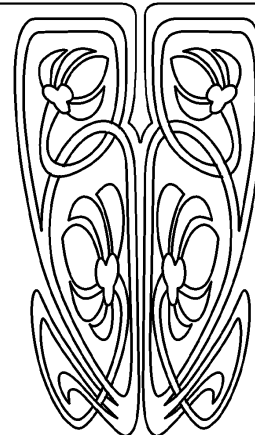
2 ноября 2025 года после продолжительной болезни скончался доктор физико-математических наук, профессор, заслуженный деятель науки РФ, лауреат Государственной премии РФ в области науки и техники Николай Иванович Сеницын. Вся его жизнь была связана с Саратовским государственным университетом имени Н. Г. Чернышевского.

Н. И. Сеницын родился 1 июня 1937 г. в г. Саратове в семье крупного советского историка и археолога, профессора СГУ Ивана Васильевича Сеницына (1900–1972), открывшего уникальные памятники древней культуры на территории Поволжья, Прикаспийской области, в том числе в Калмыкии. В юные годы Николаю Сеницыну нравилось ездить с отцом на раскопки, вникать в тонкости истории и археологического дела, но когда пришла пора поступать в университет, он после окончания в 1955 г. 19-й средней школы выбрал физический факультет Саратовского университета.

После завершения обучения в университете в 1960 г. Николай Иванович был принят в аспирантуру и параллельно начал преподавательскую деятельность на кафедре электроники СГУ. В 1964 г. он защитил кандидатскую диссертацию по вакуумной СВЧ-электронике, а в 1980 г. – докторскую диссертацию по проблемам вакуумной СВЧ-микроэлектроники и акустоэлектроники. Своим главным учителем Н. И. Сеницын называл профессора Владимира Николаевича Шевчика.



ПРИЛОЖЕНИЯ





С 1980-х гг. жизнь Н. И. Синицына проходила под эгидой академического Института радиотехники и электроники (ИРЭ), получившего в 2006 г. имя его основателя академика В. А. Котельникова. С 1981 г. Николай Иванович – заведующий лабораторией микроэлектроники созданного в тот год Саратовского филиала ИРЭ АН СССР. В 1988 г он становится заместителем директора Саратовского филиала по научной работе.

Однако связи с университетом в период работы в Институте радиотехники и электроники Н. И. Синицын никогда не прерывал и вписал интересную страницу в историю физического факультета. В 1986 г. он возглавил образованный в Саратовском филиале ИРЭ филиал кафедры вычислительной физики и автоматизации научных исследований физического факультета СГУ (с 2012 г. – кафедра компьютерной физики и метаматериалов). Филиал кафедры был создан на основе совместного решения приказа Академии наук СССР и Министерства высшего и среднего специального образования РСФСР. Это был один из первых в стране филиалов университета в научном учреждении, поддержанный в 1997 г. грантом Федеральной целевой программы «Интеграция высшего образования и фундаментальной науки». Организация филиала кафедры была обоюдодополнительной: в университете в учебный план подготовки по специальности «Физика» вошли новые дисциплины (лекции и лабораторные практикумы, сопровождаемые изданием учебных пособий), а институт решал задачу привлечения на работу талантливой молодежи. Всего до 2010-х гг. подготовку на базовой кафедре прошли около 300 студентов. Сотрудниками и аспирантами кафедры и ее филиала было защищено 5 докторских и 10 кандидатских диссертаций. Лекции по современной сверхвысокочастотной электронике и электромагнитобиологии, которые тщательно готовил и читал Н. И. Синицын, вызывали повышенный интерес у студентов физического факультета СГУ.

Как ученый Н. И. Синицын внес большой вклад в развитие вакуумной и твердотельной сверхвысокочастотной микроэлектроники, биомедицинской физики. Его исследования носили пионерский характер.

В 1988–1989 гг. на Первой и Второй международных конференциях по вакуумной микроэлектронике, проходивших в США и Англии, Н. И. Синицын в своих докладах представил результаты разработки принципиально нового класса миниатюрных низковольтных источников СВЧ колебаний на базе ламп обратной волны, способных работать в экстремальных условиях сильного радиационного излучения, сильных СВЧ электромагнитных полей, высоких и низких температур и одновременно не уступающих по уровню миниатюризации полупроводниковым устройствам аналогичного назначения. Эти приборы нашли широчайшее применение. К примеру, с их использованием впервые была осуществлена «мягкая» посадка космического аппарата на Луну, проводилась стыковка космических кораблей.

Вторым ярким направлением работы Н. И. Синицына было открытие и изучение эмиссионных особенностей тонкопленочных нанотрубных углеродных структур, что знаменовало собой фундаментальный вклад в эмиссионную наноэлектронику. Доклад академика Ю. В. Гуляева и Н. И. Синицына о целенаправленных работах ИРЭ по обнаружению и исследованию полевой эмиссии с таких структур прозвучал на Седьмой международной конференции по вакуумной микроэлектронике в июле 1994 г. во Франции.

Н. И. Синицын входил в состав авторского коллектива сотрудников ИРЭ, чьи достижения в области биомедицинской радиоэлектроники в 2000 г. отмечены Государственной премией РФ. Была разработана и внедрена радиоэлектронная аппаратура для лечения и функциональной диагностики с использованием низкоинтенсивных электромагнитных колебаний в миллиметровом диапазоне длин волн.

Как выдающийся практик-экспериментатор Н. И. Синицын на протяжении многих десятилетий входил в составы диссертационных советов физико-математического профиля на базе Саратовского университета. Он при каждой защите старался досконально выяснить, чем хороша и какие преимуществами перед предшествующими возможными аналогами имеет рассматриваемая работа, какими прогностическими и прикладными возможностями обладает. Под научным руководством самого Николая Ивановича защищено свыше 20 кандидатских диссертаций. По 8 докторским диссертациям он был научным консультантом.

Н. И. Синицыну была присуща, прежде всего, чрезвычайная ответственность за любое дело, выражающаяся в тщательном продумывании последовательности действий и формулировок, «погружении» (для прояснения физической картины) во все детали теории и эксперимента, строгом контроле хода выполнения работ, требовательности к самому себе и ко всем сотрудникам, от действий кото-



рых зависел конечный результат, обязательном стремлении сделать все на «самом высшем уровне». Весьма нагляден и поучителен в этом отношении был разработанный Н. И. Сеницыным «сценарий» подготовки и проведения в Саратове 15–19 июля 2002 г. Четвертой Всемирной конференции по вакуумным источникам электронов (IVeSC'2002), оставившей незабываемые впечатления у ее участников.

Н. И. Сеницына отличало предельно уважительное отношение к людям, с которыми сводила его научная жизнь. Академиков В. А. Котельникова и Н. Д. Девяткова, профессора М. Б. Голанта он причислял к великим ученым XX столетия. С пиететом называл он и другие имена. Одной из форм проявления уважения к учителям и коллегам у Николая Ивановича были посвящения, которыми он предварял некоторые свои научные статьи, а также написание мемориальных статей. Он был внимателен к людям и никогда не отказывал обращающимся к нему за помощью или содействием.

В интересную и содержательную сторону своей жизни Николай Иванович умел превращать и свой досуг. Многие годы он вместе со своей супругой Розой Васильевной проводил отпуск на Волге, а также в далеких и длительных путешествиях по стране, причем порой в сложных и опасных обстоятельствах (например, в сплавах по рекам). Рассказывал и писал он об этих путешествиях увлекательно и познавательно, демонстрируя свою историко-археологическую жилку.

Среди государственных наград Н. И. Сеницына – орден «Знак почета» (1998), медали «За трудовое отличие» (1986) и «Ветеран труда» (1988).

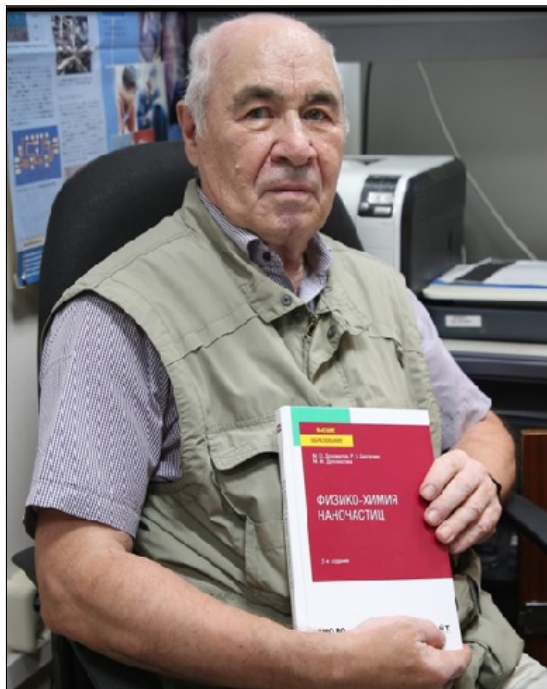
Октябрьский номер журнала «Радиотехника и электроника» за 2022 год полностью посвящен 85-летию Н. И. Сеницына. В журнале как дань уважения к его личности опубликовано научные статьи ученых из Саратова, Москвы, Санкт-Петербурга, Уфы.

С уважением и благодарностью будут вспоминать Николая Ивановича Сеницына все знавшие его люди.

*Редколлегия журнала
«Известия Саратовского университета.
Новая серия. Серия: Физика»*



Памяти профессора Рауфа Загидовича Бахтизина (20.01.1943–10.09.2025)



10 сентября 2025 года на 83-м году жизни после продолжительной болезни скончался Рауф Загидович Бахтизин, доктор физико-математических наук, профессор Уфимского университета науки и технологий.

Р. З. Бахтизин родился 20 января 1943 г. в семье педагогов Загида Имамутдиновича Бахтизина, преподавателя математики, и Факии Маликовны Салимовой, преподавателя химии и биологии, заслуженного учителя РСФСР. Отец – участник Великой Отечественной войны, первый директор Уфимского нефтяного техникума. Семейные традиции, безусловно, сказалась на выборе Рауфом Загидовичем будущей профессии – в 1966 г. он окончил физический факультет Ленинградского государственного университета по специальности электрофизика. Местом учебы он специально выбрал Ленинград как крупный научный центр в области электроники, физических исследований твердых тел, полупроводников и поверхностных явлений. К слову, двое других детей старших Бахтизиных тоже стали учеными, но в других областях – медицины и химии.

С 1972 г. Р. З. Бахтизин работал в Башкирском государственном университете, в 1980 г. он стал заведовать кафедрой экспериментальной физики, в 2004 г. получившей название кафедры физической электроники и нанофизики. В 1990 г. защитил диссертацию на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. В 1991 г. был утвержден в ученом звании профессора. С 2022 г. он профессор кафедры физической электроники и нанофизики Физико-технического института Уфимского университета науки и технологий, преемника Башкирского государственного университета.

Научную деятельность Р. З. Бахтизина отличала экспериментальная направленность. Поддерживаемый грантами, его научный коллектив активно проводил работы по изучению наноструктур и физических явлений на поверхности твердых тел с использованием современных методов сверхвысоковакуумной туннельной и атомно-силовой микроскопии. Эти работы были ориентированы на разработку новых материалов и современных приборов электронной техники, в том числе для авиационной техники и космических исследований. Занимался Рауф Загидович и классическими по постановке проблемами выявления природы и моделирования шумов в вакуумной и твердотельной электронике. В 2025 г. свет увидели две книги Рауфа Загидовича – «Физические основы наноэлектроники» и «Физико-химия наночастиц».



Научно-техническая эрудиция Рауфа Загидовича позволяла ему проводить научные консультации, полезные для сотрудников промышленных предприятий. На кафедре «Физическая электроника и нанофизика» готовились специалисты, востребованные промышленностью и исследовательскими учреждениями.

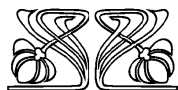
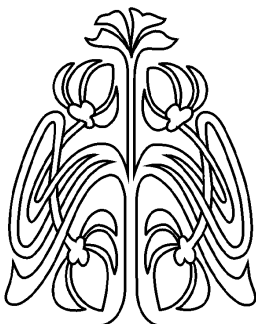
Рауф Загидович, публиковавший свои работы в солидных научных журналах, пользовался большим авторитетом среди отечественных и зарубежных ученых. Это выражалось в его приглашении на работу в ведущие исследовательские центры Германии и Японии, а также на крупные научные мероприятия. Он сам активно участвовал в организации и проведении научных конференций. Примерами могут служить всемирные конференции по вакуумным источникам электронов IVESC, проводившиеся в различных странах. Конференция IVESC 2002 г. состоялась в Саратове, и в ее успешное проведение, завершившееся изданием трудов в журнале «Applied Surface Science», Рауф Загидович внес неоценимый вклад.

Благодаря Р. З. Бахтизину между университетами и научными организациями Уфы и Саратова установились научные и дружеские связи. Так, параллельно, в Саратове (в Саратовском филиале Института радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН) и Уфе (в университете), организовывались научные конференции для молодых ученых по актуальным проблемам микро- и наноэлектроники, и при этом шел своеобразный «обмен» выступающими: ученые Уфы приглашались с докладами в Саратов, а саратовские исследователи приезжали в Уфу. Темы докладов Рауфа Загидовича были связаны с исследованиями методами сканирующей туннельной микроскопии поверхностных физико-химических свойств полупроводников. Неоднократно он выступал и в качестве официального оппонента при проведении диссертационных защит в совете по физико-математическим наукам в СГУ. Рауф Загидович регулярно встречался с сотрудниками Саратовского филиала Института радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН и Саратовского государственного университета, постоянно созванивался и обменивался с ними деловыми письмами и праздничными поздравлениями.

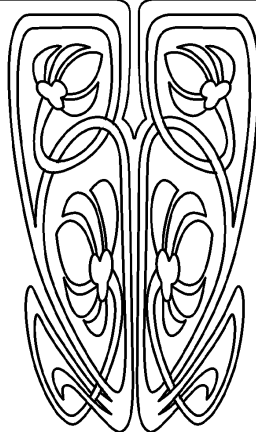
Плодотворная научно-образовательная деятельность Рауфа Загидовича Бахтизина отмечена государственной наградой РФ – почетным званием «Заслуженный работник высшей школы Российской Федерации» (2006). Ему вручен почетный знак «Изобретатель СССР» (1991). Он заслуженный деятель науки (1992), заслуженный изобретатель (1996), лауреат Государственной премии в области науки и техники (2005) Республики Башкортостан.

Рауф Загидович будучи высокопрофессиональным ученым и педагогом был спокойным, доброжелательным и одновременно надежным человеком, способным взять на себя ответственность в нужный момент. Его обаяние не могло не вызвать искреннего уважения знавших его людей. Таким он и останется в их памяти.

*Редколлегия журнала
«Известия Саратовского университета.
Новая серия. Серия: Физика»*



ПОДПИСКА



Подписка на печатную версию

Подписной индекс издания 36015.
Оформить подписку на печатную версию
можно в Интернет-каталоге
ГК «Урал-Пресс» (ural-press.ru).
Журнал выходит 4 раза в год.
Цена свободная

Электронная версия журнала находится
в открытом доступе (fizika.sgu.ru)

Адрес Издательства

Саратовского университета (редакции):

410012, Саратов, Астраханская, 83

Тел.: +7(845-2) 51-29-94, 51-45-49, 52-26-89

Факс: +7(845-2) 27-85-29

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

Адрес редколлегии серии:

410012, Саратов, Астраханская, 83,
СГУ имени Н. Г. Чернышевского,
физический факультет

Тел./факс: +7 (8452) 52-27-05

E-mail: fizik@sgu.ru

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



ISSN 1817-3020 (Print). ISSN 2542-193X (Online)
Известия Саратовского университета. Новая серия.
Серия: Физика. 2025. Том 25, выпуск 4

ИЗВЕСТИЯ САРАТОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА Новая серия

Серия: Акмеология образования. Психология развития
Серия: История. Международные отношения
Серия: Математика. Механика. Информатика
Серия: Науки о Земле
Серия: Социология. Политология
Серия: Физика
Серия: Филология. Журналистика
Серия: Философия. Психология. Педагогика
Серия: Химия. Биология. Экология
Серия: Экономика. Управление. Право

