

**Моделирование локальных электромагнитных полей  
в нанобиокомплексах на основе квантовых точек InP/ZnS**

*О.П. Пономарев<sup>1</sup>, В.О. Пономарев<sup>2</sup>*

*<sup>1</sup>Уральский федеральный университет имени первого Президента  
России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия*

*<sup>2</sup>АО «Екатеринбургский центр МНТК «Микрохирургия глаза»,  
г. Екатеринбург, Россия*

*ponomarev7713@mail.ru*

Высококочувствительные биомаркеры, разработанные на основе квантовых точек (КТ), представляют альтернативу широко известным органическим красителям, которые используются в ходе хирургических вмешательств на сетчатке. Биологические свойства КТ позволяют отчетливо визуализировать состояние сетчатки, стекловидного тела, задней гиалоидной, внутренней пограничной и эпиретинальных мембран, кольца Вейса.

Проведено математическое и компьютерное моделирование фотосинтетических структур на основе КТ. На базе метода разложения искомым полей по векторным сферическим гармоникам предложен усовершенствованный математический аппарат расчета локальных электромагнитных полей в нанобиокомплексах. Используются коэффициенты Г. Ми с учетом *h*-слоистого покрытия КТ сферической формы произвольного состава и размеров, а также ограничения рядов разложения по мультиполям до трех членов. Оценена сходимость рядов с учетом реальных свойств материала КТ и биоокружения. Получены сечения рассеяния, экстинкции квантовых точек InP/ZnS типа GA-150 в полиметилметакрилате для различного размерного ряда, а также амплитудные распределения локальных электромагнитных полей. Проведено моделирование плазмон-поляритонного механизма взаимодействия КТ в кластере с биомолекулами. Определены параметры процессов, ухудшающих оптические свойства нанобиокомплекса при фёрстеровском безызлучательном взаимодействии донорно-акцепторных пар. В программе ANSYS HFSS получены трехмерные распределения рассеянного света на кластере КТ размерностью 5×5×3.

Результаты моделирования кинетики взаимодействия КТ с биоокружением показывают возможность реализации искусственного нейростимулятора фоторецепторов, например, на основе мембраны пористого оксида алюминия со встроенными в поры КТ полупроводникового (InP/ZnS) типа.

*Ключевые слова:* квантовая точка; нанобиокомплекс; фоторецептор; спектр флуоресценции; плазмон; кластер; имплант.

*Для цитирования:* Пономарев О.П., Пономарев В.О. Моделирование локальных электромагнитных полей в нанобиокомплексах на основе квантовых точек InP/ZnS // Изв. вузов. Электроника. – 2018. – Т. 23. – № 1. – С. 72–83. DOI: 10.24151/1561-5405-2018-23-1-72-83

## Modeling of Electromagnetic Fields in Nano-Biocomplexes Based on InP/ZnS Quantum Dots

*O.P. Ponomarev<sup>1</sup>, V.O. Ponomarev<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>*Ural Federal University named after the first President of Russia  
B.N.Yeltsin, Yekaterinburg, Russia*

<sup>2</sup>*Yekaterinburg IRTC Eye Microsurgery Center, Yekaterinburg, Russia*

*ponomarev7713@mail.ru*

The high-sensitive biomarkers, developed based on the quantum dots (QD), present an alternative to widely known organic dyes, which are used during surgical operations on retina. The QD biological properties permit to distinctly visualize the state of retina, hyaline body, of back hyoloid, internal boundary and epiretinal membranes, of Weiss ring.

The mathematical and computer modeling of the QD-based photosynthetic structures has been carried out. Based on the expansion method for desired fields by vector spherical harmonics an improved mathematical apparatus for calculating the local electromagnetic fields in the nano-biocomplexes using G. Mi coefficients and taking into account the QD *h*-layer covering of spheric form, having a random composition and size limiting series of expansion in multipoles up to three terms, has been offered. The convergence of series has been estimated taking into account the real properties of QD material and biological environment. The scattering and extinction cross sections of GA-150 type InP/ZnS QDs in polymethylmethacrylate for various size range, as well as the amplitude distributions of local electromagnetic fields have been obtained. The modeling of Plasmon-polariton interaction mechanism of QDs in a cluster with biomolecules has been carried out. The parameters of the processes worsening the optical properties of the nano-biocomplex during the Förster nonradiative interaction of the donor acceptor couples have been determined. The three-dimensional scattered light distributions on a 5x5x3 dimension QD cluster have been obtained in the ANSYS HFSS software.

The results of modeling kinetics of interaction of quantum dots with bioenvironment show the possibility of implementing an artificial neuron-stimulator of the photo receptors, for example, based on the aluminum porous oxide with those built into pores of a semiconductor (InP/ZnS) type QD.

*Keywords:* quantum dot; nano-biocomplex; photoreceptor; fluorescence spectrum; plasmon; exciton.

*For citation:* Ponomarev O.P., Ponomarev V.O. Modeling of electromagnetic fields in nano-biocomplexes based on InP/ZnS quantum dots // Proc. of Universities. Electronics. – 2018. – Vol. 23. – № 1. – P. 72–83. DOI: 10.24151/1561-5405-2018-23-1-72-83

**Введение.** В настоящее время актуальны исследования медико-биологических механизмов повреждения сетчатки, ответственных за тяжелую витреоретинальную патологию органа зрения. Патология проявляется в пигментном ретините, отслойке сетчатки, диабетической ретинопатии и возрастной макулярной дегенерации, что ведет к снижению зрения и в некоторых случаях – к слепоте. В ходе хирургических вмешательств на сетчатке для лучшей визуализации интраокулярных структур, как правило, используются органические красители.

Высококочувствительные биомаркеры, разработанные на основе квантовых точек (КТ), представляют альтернативу широко известным органическим красителям, используемым в ходе хирургических вмешательств на сетчатке. В процессе витреоретинальных вмешательств уникальные физико-химические и биологические свойства КТ позволяют отчетливо визуализировать состояние сетчатки, стекловидного тела, задней гиалоидной, внутренней пограничной и эпиретинальных мембран, кольца Вейса [1]. В работе [2] предложена технология восстановления зрения при повреждении сетчатки, основанная на инъекции массива коллоидных КТ в стекловидное тело (интравитреально) или под сетчатку (субретинально). В то же время остаются неисследованными вопросы синтеза нетоксичных КТ заданного размерного ряда, разработки адекватного накопленным экспериментальным данным математического аппарата расчета локальных электромагнитных полей в нанобиокомплексах и их моделирования с учетом свойств реального биоокружения КТ.

Цель настоящей работы – разработка адекватного статистическим данным по спектрам поглощения структурными элементами сетчатки (фоторецепторами) математического аппарата расчета локальных электромагнитных полей в нанобиокластерах на основе КТ для моделирования их флуоресцентных свойств в реальном биоокружении глаза.

**Теория.** С учетом особенностей биохимического взаимодействия КТ с белковым окружением и спектром поглощения фоторецепторов сетчатки сформированы следующие исходные данные для математической и компьютерной модели нанобиокомплекса: форма КТ, число оболочек, функционализация. Для этого в ООО «НТИЦ «Нанотех-Дубна» (г. Дубна, Россия) были синтезированы водорастворимые квантовые точки InP/ZnS маркировки GA-150, имеющие максимум спектра флуоресценции 535 нм (изумрудно-зеленая область спектра). Синтезированные КТ покрыты лигандами ПЭГ-NH<sub>2</sub>, имеют квантовый выход флуоресценции более 21 %. Средний диаметр КТ составляет 25 нм [3].

Основным показателем эффективности взаимодействия донорно-акцепторных пар в нанобиокомплексе является интенсивность фёрстеровского безызлучательного переноса энергии (FRET). FRET зависит от соотношения длины волны возбуждения КТ и их геометрических размеров, расстояния между донорно-акцепторными парами, силанизации и функционализации КТ, конфигурации (толщины и числа оболочек КТ), химического состава ядра и оболочек.

Для объяснения взаимодействия плазмон-поляритонов и индуктивно-резонансного переноса энергии в донорно-акцепторных парах согласно FRET-механизму используются методы молекулярной кинетики и квантовой механики. Об эффективности FRET судят по зависимости сечения экстинкции в диапазоне длин волн возбуждения донорно-акцепторных пар, распределении локальных электромагнитных полей в кластере КТ, в том числе в составе нанобиокомплекса. Для интерпретации явления отрицательной фотопроводимости и проявления свойств левосторонних сред в средах на основе КТ используются метод функции Грина, теория Г. Ми, Друде [4]. Для объяснения

FRET необходим универсальный способ описания сопутствующих явлений в нанобио-комплексе (спектров поглощения и флуоресценции). Эффективен метод разложения искомым полей по векторным сферическим гармоникам в квазистатическом приближении [5, 6], в который целесообразно ввести поправки к коэффициентам Г. Ми с учетом слоистости оболочек КТ.

Рассмотрим задачу возбуждения КТ типа ядро  $R_1$ /оболочка  $R_2$  дипольным источником света вне сферы (частный случай – на сфере) (рис.1). Диэлектрическую и магнитную проницаемость среды, оболочки и ядра КТ обозначим комплексными величинами  $\dot{\epsilon}_3, \dot{\mu}_3, \dot{\epsilon}_2, \dot{\mu}_2$  и  $\dot{\epsilon}_1, \dot{\mu}_1$  соответственно. Источник с дипольным моментом  $\vec{p}_0$  находится в точке  $M'(r', \theta', \varphi')$ . Обозначим напряженность электрического поля и магнитную индукцию диполя соответственно  $\vec{E}^{dip}, \vec{B}^{dip}$ . Для электромагнитного поля внутри КТ:  $\vec{E}^{(1)}, \vec{B}^{(1)}$ , для электромагнитного поля вне КТ:  $\vec{E}^{dip} + \vec{E}^{(2)}, \vec{B}^{dip} + \vec{B}^{(2)}$ .

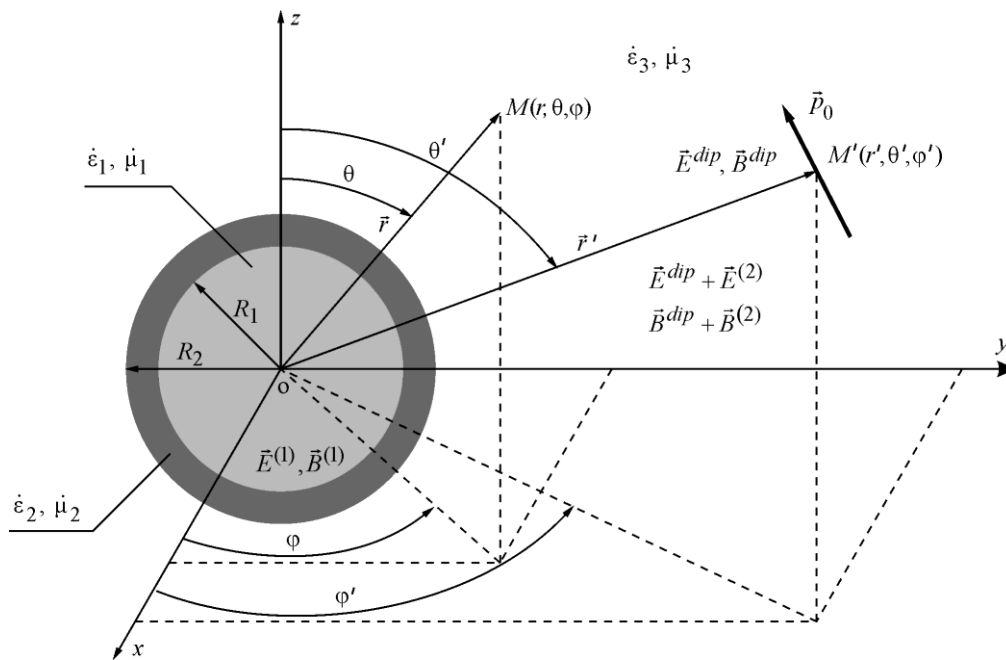


Рис.1. Геометрия задачи  
Fig.1. Geometry of the problem

Задача имеет сферическую симметрию, и искомые решения для полей диполя, полей внутри и вне объема КТ могут быть найдены путем разложения в ряды по системам цилиндрических и сферических функций, имеющих свойства полноты и ортогональности. Воспользуемся разложением искомым полей на сферические гармоники по аналогии с представлением для векторной функции Грина [7]:

$$G(\vec{r}, \vec{r}') \equiv \delta^{(3)}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} = ik \sum_{n=0}^{\infty} j_n(kr_{<}) h_n^{(1)}(kr_{>}) \cdot \sum_{m=-n}^n Y_{nm}^*(\theta', \varphi') Y_{nm}(\theta, \varphi), \quad (1)$$

где  $h_n^{(1)}(z) = j_n(z) + iy_n(z)$  – сферическая функция Бесселя 3-го рода (функция Ганкеля первого рода);  $j_n(z), y_n(z)$  – сферические функции Бесселя 1-го и 2-го рода соответ-

венно;  $Y_{nm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(2n+1)(n-m)!}{4\pi(n+m)!}} \cdot P_n^m(\cos\theta)e^{im\varphi}$  – скалярная сферическая гармоника;  $P_n^m(\cos\theta)$  – присоединенная функция Лежандра;  $r_< = \min(r, r')$ ;  $r_> = \max(r, r')$ ; «\*» – знак комплексного сопряжения.

Пусть в свободном пространстве волновое число  $k_0 = \omega/C$  ( $C$  – скорость света), в средах 1, 2 и 3 (см. рис.1) волновые числа  $k_{1(2,3)} = \sqrt{\varepsilon_{1(2,3)}\mu_{1(2,3)}} \cdot k_0$ . Для поперечно-электрических волн типа ТЕ поле диполя с учетом (1) описывается следующими выражениями [5]:

$$\vec{E}_{TE}^{dip} = k_0 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{a_{nm}}{n(n+1)} j_n(k_3 r) \vec{L} Y_{nm}(\theta, \varphi), \quad (2)$$

$$\vec{B}_{TE}^{dip} = -i \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{a_{nm}}{n(n+1)} \left[ \vec{\nabla} \left( j_n(k_3 r) \vec{L} Y_{nm}(\theta, \varphi) \right) \right]. \quad (3)$$

Аналогично для поперечно-магнитных волн типа ТМ:

$$\vec{E}_{TM}^{dip} = -i \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{b_{nm}}{n(n+1)} \left[ \vec{\nabla} \left( j_n(k_3 r) \vec{L} Y_{nm}(\theta, \varphi) \right) \right], \quad (4)$$

$$\vec{B}_{TM}^{dip} = -k_0 \varepsilon_3 \mu_3 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{b_{nm}}{n(n+1)} j_n(k_3 r) \vec{L} Y_{nm}(\theta, \varphi). \quad (5)$$

В формулах (2)–(5) дифференциальный оператор  $\vec{L} = -i[\vec{r}\vec{\nabla}]$ . Постоянные коэффициенты определяются как:

$$a_{nm} = -i4\pi k_0^2 \sqrt{\varepsilon_3 \mu_3} h_n^{(1)}(k_3 r') \left( \vec{p}_0 \vec{L}' \right) Y_{nm}^*(\theta', \varphi'), \quad (6)$$

$$b_{nm} = 4\pi \frac{k_0}{\sqrt{\varepsilon_3}} \left( \vec{p}_0 \left[ \vec{\nabla}' \vec{L}' \right] \right) h_n^{(1)}(k_3 r') Y_{nm}^*(\theta', \varphi'), \quad (7)$$

где  $\vec{L}' = -i[\vec{r}'\vec{\nabla}']$ ;  $\vec{\nabla}' = \frac{\partial}{\partial r'} \vec{r}'^0 + \frac{1}{r'} \frac{\partial}{\partial \theta'} \vec{\theta}'^0 + \frac{1}{r' \sin \theta'} \frac{\partial}{\partial \varphi'} \vec{\varphi}'^0$ ;  $\vec{r}'^0, \vec{\theta}'^0, \vec{\varphi}'^0$  – единичные орты точки источника;  $\vec{L} = \frac{i}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \vec{\theta}^0 - \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \vec{\varphi}^0$ .

Для внешней по отношению к КТ области поле описывается следующими формулами [8]:

$$\begin{aligned} \vec{E}^{(2)} = & -i \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{\beta_{nm}^{(2)}}{n(n+1)} \left[ \vec{\nabla} \left( h_n^{(1)}(k_3 r) \vec{L} Y_{nm}(\theta, \varphi) \right) \right] + \\ & + k_0 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{\alpha_{nm}^{(2)}}{n(n+1)} h_n^{(1)}(k_3 r) \vec{L} Y_{nm}(\theta, \varphi), \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \vec{B}^{(2)} = & -k_0 \varepsilon_3 \mu_3 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{\beta_{nm}^{(2)}}{n(n+1)} h_n^{(1)}(k_3 r) \vec{L} Y_{nm}(\theta, \varphi) - \\ & - i \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{\alpha_{nm}^{(2)}}{n(n+1)} \left[ \vec{\nabla} \left( h_n^{(1)}(k_3 r) \vec{L} Y_{nm}(\theta, \varphi) \right) \right], \end{aligned} \quad (9)$$

где  $\beta_{nm}^{(2)} = -q_n b_{nm}$ ;  $\alpha_{nm}^{(2)} = -p_n a_{nm}$ .

Коэффициенты  $q_n$  и  $p_n$  определяются для  $h$ -слойной КТ ( $h$  – число оболочек) по формулам [9]:

$$q_n = - \frac{\left\{ m_h \psi_n(m_h y_h) \left[ \psi'_n(y_h) + T_n^{h-1} \chi'_n(y_h) \right] - \psi'_n(m_h y_h) \left[ \psi_n(y_h) + T_n^{h-1} \chi_n(y_h) \right] \right\}}{\left\{ m_h \xi_n(m_h y_h) \left[ \psi'_n(y_h) + T_n^{h-1} \chi'_n(y_h) \right] - \xi'_n(m_h y_h) \left[ \psi_n(y_h) + T_n^{h-1} \chi_n(y_h) \right] \right\}}, \quad (10)$$

$$p_n = - \frac{\left\{ \psi_n(m_h y_h) \left[ \psi'_n(y_h) + S_n^{h-1} \chi'_n(y_h) \right] - m_h \psi'_n(m_h y_h) \left[ \psi_n(y_h) + S_n^{h-1} \chi_n(y_h) \right] \right\}}{\left\{ \xi_n(m_h y_h) \left[ \psi'_n(y_h) + S_n^{h-1} \chi'_n(y_h) \right] - m_h \xi'_n(m_h y_h) \left[ \psi_n(y_h) + S_n^{h-1} \chi_n(y_h) \right] \right\}}, \quad (11)$$

где

$$T_n^l = - \frac{\left\{ m_l \psi_n(m_l y_l) \left[ \psi'_n(y_l) + T_n^{l-1} \chi'_n(y_l) \right] - \psi'_n(m_l y_l) \left[ \psi_n(y_l) + T_n^{l-1} \chi_n(y_l) \right] \right\}}{\left\{ m_l \chi_n(m_l y_l) \left[ \psi'_n(y_l) + T_n^{l-1} \chi'_n(y_l) \right] - \chi'_n(m_l y_l) \left[ \psi_n(y_l) + T_n^{l-1} \chi_n(y_l) \right] \right\}}, \quad (12)$$

$$S_n^l = - \frac{\left\{ \psi_n(m_l y_l) \left[ \psi'_n(y_l) + S_n^{l-1} \chi'_n(y_l) \right] - m_l \psi'_n(m_l y_l) \left[ \psi_n(y_l) + S_n^{l-1} \chi_n(y_l) \right] \right\}}{\left\{ \chi_n(m_l y_l) \left[ \psi'_n(y_l) + S_n^{l-1} \chi'_n(y_l) \right] - m_l \chi'_n(m_l y_l) \left[ \psi_n(y_l) + S_n^{l-1} \chi_n(y_l) \right] \right\}}. \quad (13)$$

Здесь  $\psi_n(z) = z \cdot j_n(z)$ ,  $\chi_n(z) = z \cdot y_n(z)$ ,  $\xi_n(z) = z \cdot h_n^{(1)}(z)$  – функции Рикатти – Бесселя;  $l = 1, \dots, h$  – номер оболочки;  $m_l = n_{l+1}/n_l$  – отношение коэффициента преломления  $(l+1)$ -слоя к коэффициенту преломления  $l$ -го слоя;  $y_l = k_l R_l$ ;  $k_l = 2\pi \cdot n_l / \lambda$  – волновое число в  $l$ -м слое. В формулах (10)–(13) используются производные функций по аргументу.

Можно показать, что для  $T_n^0 = S_n^0 = 0$  величины  $q_n$  и  $p_n$  представляют собой коэффициенты Г. Ми [10]. Опуская промежуточные выкладки, запишем формулы для расчета тангенциальных компонент напряженности электрического поля в (8):

$$\begin{aligned} E_{\theta}^{(2)} = & -i \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{\beta_{nm}^{(2)}}{n(n+1)} \left[ \frac{h_n^{(1)}(k_3 r)}{r^2} \frac{\cos \theta}{\sin^2 \theta} m \sqrt{\frac{(2n+1)(n-m)!}{4\pi(n+m)!}} \cdot P_n^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \right] - \\ & - k_0 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{\alpha_{nm}^{(2)}}{n(n+1)} h_n^{(1)}(k_3 r) \frac{m}{r \sin \theta} \sqrt{\frac{(2n+1)(n-m)!}{4\pi(n+m)!}} \cdot P_n^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} E_{\varphi}^{(2)} = & -i \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{\beta_{nm}^{(2)}}{n(n+1)} \left[ \frac{h_n^{(1)}(k_3 r)}{r^2} \frac{\cos \theta}{\sin^2 \theta} m \sqrt{\frac{(2n+1)(n-m)!}{4\pi(n+m)!}} \cdot P_n^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \right] - \\ & - k_0 \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{\alpha_{nm}^{(2)}}{n(n+1)} h_n^{(1)}(k_3 r) \frac{i}{r} \sqrt{\frac{(2n+1)(n-m)!}{4\pi(n+m)!}} \cdot \frac{\partial P_n^m(\cos \theta)}{\partial \theta} e^{im\varphi}, \end{aligned} \quad (15)$$

где  $\beta_{nm}^{(2)} = -q_n b_{nm}$ ;  $\alpha_{nm}^{(2)} = -p_n a_{nm}$ . Для соответствующих компонент магнитной индукции выкладки аналогичные.

Рассмотрим два случая: 1) диполь параллелен поверхности КТ и направлен вдоль координаты  $\theta'$ ; 2) диполь нормален к поверхности КТ и направлен по координате  $r'$ . Можно показать, что при ориентации диполя по касательной к КТ постоянные коэффициенты определяются выражениями

$$a_{nm} = -i4\pi k_0^2 \mu_3 \sqrt{\varepsilon_3 \mu_3} h_n^{(1)}(k_3 r') \frac{m}{r' \sin \theta'} \cdot \sqrt{\frac{(2n+1)(n-m)!}{4\pi(n+m)!}} \cdot P_n^m(\cos \theta') e^{-im\theta'},$$

$$b_{nm} = -4\pi \frac{k_0}{\sqrt{\varepsilon_3}} [h_n^{(1)}(k_3 r)]'_{r=r'} \sqrt{\frac{(2n+1)(n-m)!}{4\pi(n+m)!}} \cdot P_n^m(\cos \theta') e^{-im\theta'}.$$

Для ориентации диполя по нормали к КТ

$$a_{nm} = 0,$$

$$b_{nm} = 4\pi \frac{k_0}{\sqrt{\varepsilon_3}} \frac{h_n^{(1)}(k_3 r')}{r'} \sqrt{\frac{(2n+1)(n-m)!}{4\pi(n+m)!}} \left[ \frac{\partial P_n^m(\cos \theta')}{\partial \theta'} + im \frac{P_n^m(\cos \theta')}{\sin \theta'} \right] e^{-im\theta'}.$$

С учетом изложенного в окончательном виде выражения (14), (15) примут вид

$$E_\theta^{(2)} = i \frac{k_0}{\sqrt{\varepsilon_3}} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{mq_n}{n(n+1)} \cdot \frac{h_n^{(1)}(k_3 r) [h_n^{(1)}(k_3 r')]'}{r^2}_{r'=R_2} \cdot \frac{\cos \theta}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{(2n+1)(n-m)!}{(n+m)!} \times$$

$$\times P_n^m(0) P_n^m(\cos \theta) - i \cdot k_0^3 \mu_3 \sqrt{\varepsilon_3 \mu_3} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{m^2 p_n}{n(n+1)} \cdot \frac{(2n+1)(n-m)!}{(n+m)!} \times$$

$$\times \frac{h_n^{(1)}(k_3 R_2) h_n^{(1)}(k_3 r)}{r \cdot R_2} \cdot P_n^m(0) \frac{P_n^m(\cos \theta)}{\sin \theta},$$

$$E_\varphi^{(2)} = i \frac{k_0}{\sqrt{\varepsilon_3}} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{mq_n}{n(n+1)} \cdot \frac{h_n^{(1)}(k_3 r) [h_n^{(1)}(k_3 r')]'}{r^2}_{r'=R_2} \cdot \frac{\cos \theta}{\sin^2 \theta} \cdot \frac{(2n+1)(n-m)!}{(n+m)!} \times$$

$$\times P_n^m(0) P_n^m(\cos \theta) + k_0^3 \mu_3 \sqrt{\varepsilon_3 \mu_3} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{m^2 p_n}{n(n+1)} \cdot \frac{(2n+1)(n-m)!}{(n+m)!} \times$$

$$\times \frac{h_n^{(1)}(k_3 R_2) h_n^{(1)}(k_3 r)}{r R_2} \cdot P_n^m(0) \frac{\partial P_n^m(\cos \theta)}{\partial \theta},$$

где коэффициенты  $q_n$ ,  $p_n$  находятся по формулам (10), (11).

Расчеты коэффициентов Г. Ми для длины волны  $\lambda = 539$  нм показывают их быструю сходимость. Достаточно учитывать три первых члена рядов ( $n = 1, 2, 3$ ). Проведены расчеты распределения модуля напряженности электрического поля  $|\dot{E}^{(2)}| = \sqrt{|\dot{E}_\theta| + |\dot{E}_\varphi|^2}$ , где  $|\dot{E}_{\theta(\varphi)}| = \sqrt{\text{Re}(\dot{E}_{\theta(\varphi)}^{(2)})^2 + \text{Im}(\dot{E}_{\theta(\varphi)}^{(2)})^2}$ , для первых трех членов ряда по  $n$  в последних выражениях при следующих исходных данных: длина волны возбуждения  $\lambda_0 = 539$  нм; коэффициенты преломления среды:  $n_1 = 3,682$  (InP),  $n_2 = 2,39$  (ZnS),  $n_3 = 1,5$  (полиметилметакрилат (ПММК)); радиус ядра  $R_1 = 10$  нм, радиус оболочки  $R_2 = 12,5$  нм. При близком к экспоненциальному закону убывания поля по мере удаления от КТ наблюдается монотонное изменение амплитуды поля по всем координатам. Также расчет модуля напряженности электрического поля для первых трех чле-

нов ряда по  $n$  проведен для изменяемой длины волны возбуждения  $\lambda_0$  при тех же исходных данных для точки с координатами  $r = R_2, \theta = \pi/4$ . На длине волны порядка 400 нм наблюдается экситонный пик, обусловленный плазмонным резонансом [11]. Для КТ с ядром радиусом 10 нм и оболочкой радиусом 20 нм экситонный пик отсутствует. При уменьшении толщины оболочки до 0,5 нм ( $R_1 = 10$  нм,  $R_2 = 11$  нм) экситонный пик растет, что говорит о более интенсивном плазмонном резонансе на границе раздела сред InP – ZnS.

Моделирование взаимодействия КТ с макромолекулами фоторецепторных клеток предполагает учет FRET для массива наночастиц в биологически нейтральном растворе с точки зрения токсичности и деструктивного влияния на биоокружение. При возникновении плазмонного резонанса в массиве КТ при определенных условиях наблюдается аномальное усиление поля. Данное усиление поля сильно зависит от соотношения диаметра КТ, составляющих массив, и расстояния между КТ, которое определяет как интенсивность локальных полей, так и сечения, характеризующие исследуемые химические и биомолекулярные вещества. Геометрия матрикса КТ, взаимная ориентация дипольных моментов КТ и источника возбуждения влияют на положение локализованного плазмонного резонанса, который возникает при коллективных осцилляциях электронов в КТ. Фактически плазмонная наносистема, составленная из КТ, представляет собой нелинейную оптическую среду с плазмонным резонансом, возникающим на частоте излучения, равной или близкой к плазменной частоте колебания свободных электронов металла. Плазмонный резонанс сопровождается увеличением сечения поглощения и рассеяния КТ, а также локальным усилением амплитуды поля электромагнитной волны (ЭМВ) внутри и вблизи КТ. В результате локального усиления поля оптический нелинейный отклик среды с КТ может увеличиваться на несколько порядков [12].

**Результаты и их обсуждение.** В реальном биоокружении глаза структуре кластер КТ (донор) – макробелок (акцептор) присуще динамическое перераспределение заряда при диполь-дипольном взаимодействии донорно-акцепторных пар. С учетом вклада в абсорбцию дипольного и квадрупольного моментов в качестве примера на рис.2 показано рассчитанное в пакете Maple влияние толщины оболочки на спектр поглощения наночастицы InP с ядром радиусом 25 нм. Увеличение толщины оболочки ZnS приводит к увеличению ширины спектральных полос экстинкции и уменьшению интенсивности флуоресценции при неизменном положении экситонного пика.

Для передачи стимула возбуждения от КТ (доноров) к фоторецепторам сетчатки (акцепторам) целесообразно размещение КТ на биосовместимой подложке, например на мембране пористого оксида алюминия [13]. Медицинская практика показывает [14], что размеры импланта в витреальной полости в зависимости от размеров области пораженных фоторецепторов сетчатки могут варьироваться от  $0,2 \times 0,2$  мм до  $2 \times 2$  мм при толщине импланта 5–20 мкм. С точки зрения наноплазмоники имплант представляет

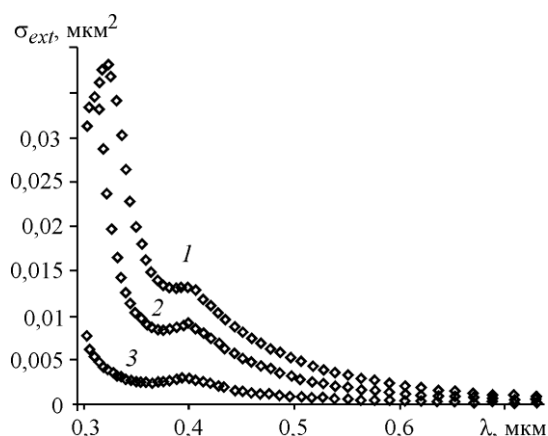


Рис.2. Сечение экстинкции InP/ZnS наночастиц в ПММК для разной толщины оболочки: 1 – 35 нм; 2 – 45 нм; 3 – 50 нм

Fig.2. Extinction of nanoparticles InP/ZnS in PMMA for shell thicknesses: 1 – 35 нм; 2 – 45 нм; 3 – 50 нм

собой фотонный кристалл со свойствами метаматериала с контролируемым электромагнитным откликом.

Для выяснения оптимального расстояния между КТ в кластере для эффективной передачи энергии по FRET-механизму проведено моделирование рассеянного поля от двух одинаковых по размерам, форме и составу наночастиц InP/ZnS, находящихся друг от друга на расстоянии 6 и 12 нм. Моделирование в программе ANSYS HFSS проведено для длины волны облучения 535 нм (рис.3). Направление падения плоского фронта

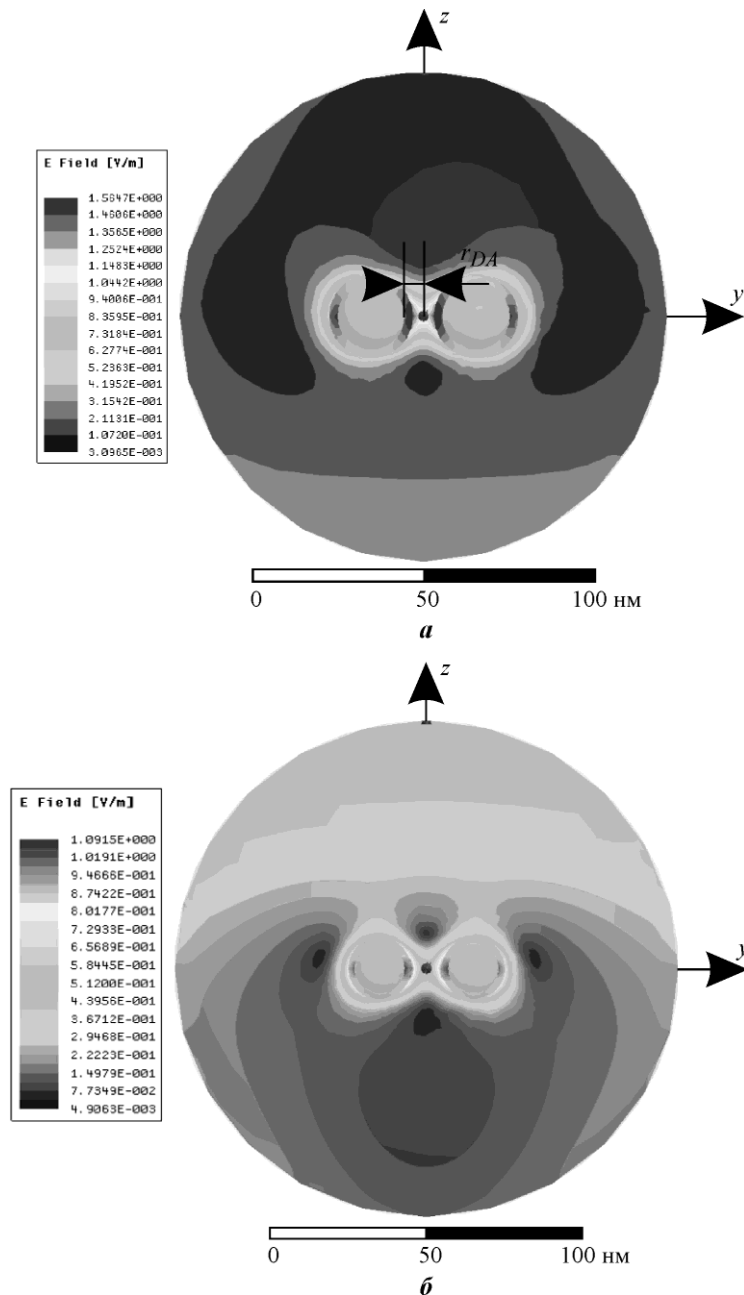


Рис.3. Распределение рассеянного электрического поля для двух КТ, расположенных на расстоянии 6 нм (а) и 12 нм (б)

Fig.3. Distribution of the scattered electric field for two QDs located at a distance of 6 nm (a) and 12 nm (b)

ЭМВ принималось вдоль оси  $oz$  перпендикулярно линии, проходящей через центры КТ. Вектор поляризации направлен вдоль оси  $oy$ . Интенсивность поля взаимодействия высокая, когда расстояние между донором и акцептором равно 6 нм, т.е. более ярко выражен FRET-эффект.

Для обеспечения FRET между КТ кластера и фоторецепторами сетчатки на поверхности контакта донорно-акцепторных пар необходимо сформировать электромагнитное поле локализованных плазмонов с синхронизацией колебаний, период которых соответствует пространственному положению (шагу) дисков фоторецепторов. Формирование такого распределения электромагнитного поля возможно за счет выбора формы и расстояния между КТ в мембране импланта.

На рис.4 показаны результаты моделирования напряженности рассеянного поля от кластера квантовых точек InP/ZnS в ПММК, расположенных друг от друга на расстоянии 6 нм. Кластер имеет размерность  $5 \times 5 \times 3$ , возбуждается плоской ЭМВ на длине волны 535 нм ( $\vec{k}$  – волновой вектор падающих ЭМВ напряженностью  $\vec{E}_0$ ). При нормальном падении ЭМВ на верхнюю грань кластера по оси  $oz$  с вектором поляризации электрического поля, параллельным оси  $oy$ , наблюдается максимум локального поля в центре кластера. В этой области максимум возбуждения относится к КТ в центре кластера. По мере удаления от центра FRET-эффект ослабевает. По аналогии с полупроводниковыми спазерами [6] для обеспечения равномерного рассеяния света на импланте необходимо изменять расстояние между соседними КТ в кластере, обеспечивая фазовый синхронизм и требуемое распределение интенсивности локального поля в зависимости от геометрии пораженного участка сетчатки.

**Заключение.** Результаты моделирования кинетики взаимодействия КТ с биоокружением свидетельствуют о возможности реализации искусственного нейростимулятора фоторецепторов, например, на основе мембраны пористого оксида алюминия со встроенными в поры КТ полупроводникового (InP/ZnS) типа. Усовершенствованный мате-

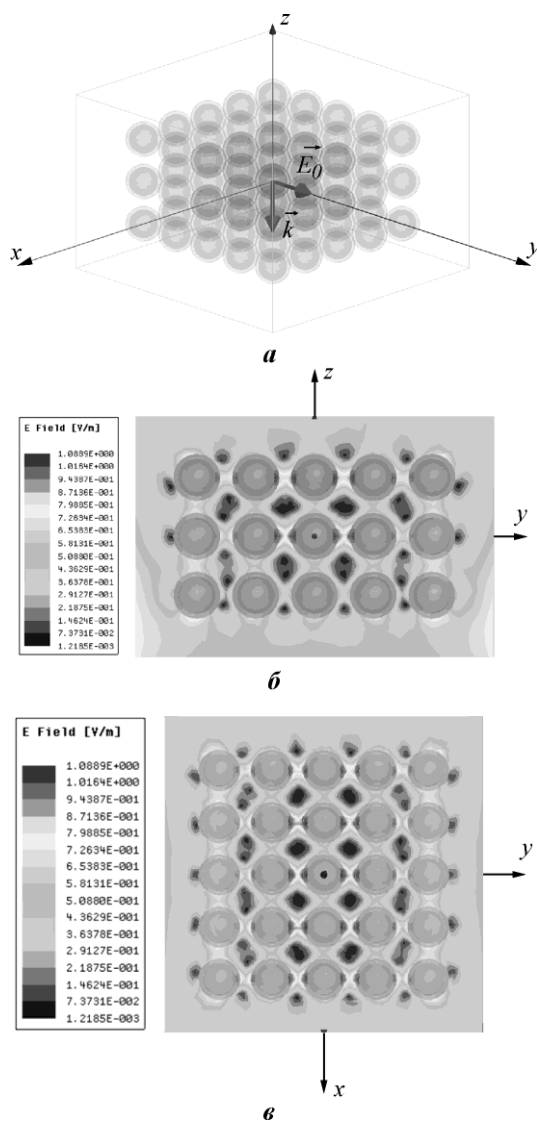


Рис.4. Моделирование рассеяния света на кластере наночастиц InP/ZnS в ПММК: а – нормальное падение ЭМВ на кластер; б – рассеянное поле от кластера (вид сбоку) в плоскости  $yoz$ ; в – распределение напряженности рассеянного электрического поля в плоскости  $xoz$  (вид сверху)

Fig.4. Statement of the problem of modeling light scattering on a cluster of nanoparticles InP/ZnS in PMMA for a normal propagating of the electromagnetic field (a); scattered field from the cluster (side view) at the plane  $yoz$  (b); c – distribution of the intensity of the scattered electric field at the plane  $xoz$  (top view)

матический аппарат расчета локальных электромагнитных полей в нанобиокомплексе на основе КТ позволяет получить оценку их оптимальных геометрических параметров в кластере для интраокулярной имплантации с целью стимулирования фототрансдукции искусственным путем.

### Литература

1. Visualizing vitreous using quantum dots as imaging agents / *S. Yamamoto, N. Manabe, K. Fujioka et al.* // *IEEE Trans. NanoBioscience.* – 2007. – Vol. 6. – No. 1. – P. 94–98.
2. *Olson J.* Method for stimulating retinal response using photoactive devices // Patent US, No. 106605. 2008.
3. Исследование физико-химических свойств квантовых точек InP/ZnS для офтальмологии / *В.О. Пономарев, А.С. Барыбин, О.П. Пономарев и др.* // *Биомедицинская радиоэлектроника.* – 2014. – № 3. – С. 23–31.
4. *Сарычев А.К., Шалаев В.М.* Электродинамика метаматериалов: пер. с англ. В.Г. Аракчеева, Ю.В. Владимировой / Науч. ред. В.Н. Задков. – М.: Научный мир, 2011. – 224 с.
5. *Климов В.В.* Наноплазмоника. – 2-е изд., испр. – М.: Физматлит, 2010. – 480 с.
6. Квантовая наноплазмоника: учеб. пособие / *Е.С. Андрианов, А.П. Виноградов, А.В. Дорофеев и др.* – Долгопрудный: Издат. дом «Интеллект», 2015. – 368 с.
7. *Apostol M., Vaman G.* Plasmons and diffraction of an electromagnetic plane wave by a metallic sphere // *Progress in Electromagnetics Research.* – 2009. – Vol. 98. – P. 97–118.
8. *Jackson J.D.* Classical electrodynamics. – 3-th ed. – John Wiley & Sons, Inc., 1998. – 808 p.
9. *Weiping C., Hofmeister H., Wei C.* Optical properties of Ag and Au nanoparticles dispersed within the pores of monolithic mesoporous silica // *J. of Nanoparticle Research.* – 2001. – No. 3. – P. 443–453.
10. *Борн М., Вольф Э.* Основы оптики: пер. с англ. – 2-е изд. – М.: Наука, 1973. – 719 с.
11. *Степанов А.Л.* Оптические свойства металлических наночастиц, синтезированных в полимере методом ионной имплантации (обзор) // *ЖТФ.* – 2004. – Т. 74. – Вып. 2. – С. 1–12.
12. *Михеева О.П., Сидоров А.И.* Поглощение и рассеяние инфракрасного излучения наночастицами диоксида ванадия с металлической оболочкой // *ЖТФ.* – 2003. – Т. 73. – Вып. 5. – С. 79–83.
13. *Савченко С.С., Ильин Д.О., Вохминцев А.С., Вайнштейн И.А.* Флуоресценция квантовых точек InP/ZnS в нанопористой матрице оксида алюминия // Тез. докл. II Междунар. молодежной науч. конф. «Физика. Технологии. Инновации». – Екатеринбург: УрФУ, 2015. – 380 с.
14. *Пономарев В.О.* Искусственные нанобиокомплексы на основе квантовых точек InP/ZnS для стимуляции фототрансдукции при заболеваниях сетчатки, сопровождающихся повреждением фоторецепторов // *Медицина и высокие технологии.* – 2017. – № 2. – С. 18–25.

Поступила 01.06.2017 г.; принята к публикации 09.11.2017 г.

**Пономарев Олег Павлович** – доктор технических наук, профессор, департамент радиоэлектроники и связи Института радиоэлектроники и информационных технологий Уральского федерального университета имени первого Президента России Б.Н. Ельцина (Россия, 620001, г. Екатеринбург, ул. Мира, 32), [ponomarev7713@mail.ru](mailto:ponomarev7713@mail.ru)

**Пономарев Вячеслав Олегович** – врач-офтальмохирург АО «Екатеринбургский центр МНТК «Микрохирургия глаза» (Россия, 620149, г. Екатеринбург, ул. Ак. Бардина, 4А), [ponomarev-mntk@mail.ru](mailto:ponomarev-mntk@mail.ru)

### References

1. Yamamoto S., Manabe N., Fujioka K., Hoshino A., Yamamoto K. Visualizing vitreous using quantum dots as imaging agents. *IEEE Trans. NanoBioscience*, 2007, vol. 6, no. 1, pp. 94–98.
2. Olson J. *Method for stimulating retinal response using photoactive devices*. US patent, no. 2008. 106605.
3. Ponomarev V.O., Barybin A.S., Ponomarev O.P. i dr. Issledovanie fiziko-himicheskikh svoystv kvantovykh tochek InP/ZnS dlya oftal'mologii [Investigation of the physicochemical properties of InP/ZnS quantum dots for

ophthalmology] *Biomedinskaya radioelektronika – Biomedical radioelectronics*, 2014, no. 3, pp. 23–31. (In Russian).

4. Sarychev A.K., Shalaev V.M. *Elektrodinamika metamaterialov*. Per. s angl. V.G. Arakcheeva, Yu.V. Vladimirovoj, nauch. red. V.N. Zadkov [Electrodynamics of metamaterials]. Moscow, Nauchnyj mir Publ., 2011. 224 p. (In Russian).

5. Klimov V.V. *Nanoplazmonika. 2-e izd., ispr.* [Nanoplasmonics]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2010. 480 p. (In Russian).

6. Andrianov E.S., Vinogradov A.P., Dorofeenko A.V., Zyablovskij A.A., Lisyanskiy A.A., Petuhov A.A. *Kvantovaya nanoplazmonika: ucheb. posobie* [Quantum nanoplasmonics]. Dolgoprudnyj, Izdatel'skij Dom «Intellekt» Publ., 2015. 368 p. (In Russian).

7. Apostol M., Vaman G. *Plasmons and diffraction of an electromagnetic plane wave by a metallic sphere*. Progress in Electromagnetics Research, PIER 98, 2009, pp. 97–118.

8. Jackson J.D. *Classical electrodynamics*. 3-th Edition. John Wiley & Sons, Inc. 1998, 808 p.

9. Weiping C., Hofmeister H., Wei C. Optical properties of Ag and Au nanoparticles dispersed within the pores of monolithic mesoporous silica. *Journal of Nanoparticle Research*, 2001, no. 3, pp. 443–453.

10. Born M., Vol'f E. *Osnovy optiki. Izd. 2-e. Perevod s ang l* [Fundamentals of Optics]. Moscow, Nauka Publ., 1973. 719 p. (In Russian).

11. Stepanov A.L. Opticheskie svojstva metallicheskih nanochastic, sintezirovannyh v polimere metodom ionnoj implantacii (obzor) [Optical properties of metallic nanoparticles synthesized in a polymer by the ion implantation method (review)]. *ZHTF – Journal of Technical Physics*, 2004, vol. 74, iss. 2, pp. 1–12. (In Russian).

12. Miheeva O.P., Sidorov A.I. Pogloshchenie i rasseyanie infrakrasnogo izlucheniya nanochasticami dioksida vanadiya s metallicheskoj obolochkoj [Absorption and scattering of infrared radiation by nanoparticles of vanadium dioxide with a metal shell]. *ZHTF – Journal of Technical Physics*, 2003, vol. 73, iss. 5, pp. 79–83 (In Russian).

13. Savchenko S.S., Il'in D.O., Vohmincev A.S., Vajnshtejn I.A. Fluorescenciya kvantovyh toчек InP/ZnS v nanoporistoj matricе oksida alyuminiya [Fluorescence of InP/ZnS quantum dots in a nanoporous alumina matrix]. *Tezisy dokladov II Mezhdunar. molodezhnoj nauch. konferencii: Fizika. Tekhnologii. Innovacii. FTI-2015* [Abstracts of II Intern. youth scientific. conference: Physics. Technologies. Innovation. PTI-2015]. Ekaterinburg, UrFU Publ., 2015. 380 p. (In Russian).

14. Ponomarev V.O. Iskusstvennye nanobiokompleksy na osnove kvantovyh toчек InP/ZnS dlya stimulyacii fototransdukcii pri zabolevaniyah setchatki soprovozhdayushchihsvya povrezhdeniem fotoreceptorov [Artificial nanobiocomplexes based on InP/ZnS quantum dots for stimulating phototransduction in diseases of the retina accompanied by damage to the photoreceptors]. *Medicina i vysokie tekhnologii – Medicine and High Technologies*, 2017, no. 2, pp. 18–25. (In Russian).

Submitted 01.06.2017; accepted 09.11.2017

**Ponomarev Oleg P.** – Dr. Sci. (Eng.), Prof., Department of Radio Electronics and Communication, Institute of Radio Electronics and Information Technologies, Ural Federal University named after the first President of Russia B.N. Yeltsin (Russia, 620002, Yekaterinburg, Mira str., 32), ponomarev7713@mail.ru

**Ponomarev Vjacheslav O.** – surgeon, Yekaterinburg IRTC Eye Microsurgery Center (Russia, 620149, Yekaterinburg, Academician Bardin str., 4A), ponomarev-mntk@mail.ru