

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ
БУКОВИНСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

МАТЕРІАЛИ

II науково-практичної інтернет-конференції
**РОЗВИТОК ПРИРОДНИЧИХ НАУК
ЯК ОСНОВА НОВІТНІХ
ДОСЯГНЕНЬ У МЕДИЦИНІ**



м. Чернівці
22 червня 2022 року

MINISTRY OF EDUCATION AND SCIENCE OF UKRAINE
MINISTRY OF HEALTH OF UKRAINE
BUKOVINIAN STATE MEDICAL UNIVERSITY

CONFERENCE PROCEEDINGS

II Scientific and Practical Internet Conference **DEVELOPMENT OF NATURAL SCIENCES AS A BASIS OF NEW ACHIEVEMENTS IN MEDICINE**



Chernivtsi, Ukraine
June 22, 2022

УДК 5-027.1:61(063)

Р 64

Медицина є прикладом інтеграції багатьох наук. Наукові дослідження у сучасній медицині на основі досягнень фізики, хімії, біології, інформатики та інших наук відкривають нові можливості для вивчення процесів, які відбуваються в живих організмах, та вимагають якісних змін у підготовці медиків. Науково-практична інтернет-конференція «Розвиток природничих наук як основа новітніх досягнень у медицині» покликана змінювати свідомість людей, характер їхньої діяльності та стимулювати зміни у підготовці медичних кадрів. Вміле застосування сучасних природничо-наукових досягнень є запорукою подальшого розвитку медицини як галузі знань.

Конференція присвячена висвітленню нових теоретичних і прикладних результатів у галузі природничих наук та інформаційних технологій, що є важливими для розвитку медицини та стимулювання взаємодії між науковцями природничих та медичних наук.

Голова науково-організаційного комітету

Володимир ФЕДІВ професор, д.фіз.-мат.н., завідувач кафедри біологічної фізики та медичної інформатики Буковинського державного медичного університету

Члени науково-організаційного комітету

Тетяна БІРЮКОВА к.тех.н., доцент кафедри біологічної фізики та медичної інформатики Буковинського державного медичного університету

Оксана ГУЦУЛ к.фіз.мат.н., доцент кафедри біологічної фізики та медичної інформатики Буковинського державного медичного університету

Марія ІВАНЧУК к.фіз.мат.н., доцент кафедри біологічної фізики та медичної інформатики Буковинського державного медичного університету

Олена ОЛАР к.фіз.мат.н., доцент кафедри біологічної фізики та медичної інформатики Буковинського державного медичного університету

Почесний гість

Prof. Dr. Anton FOJTIK Факультет біомедичної інженерії, Чеський технічний університет, м.Прага, Чеська республіка

Комп'ютерна верстка:

Марія ІВАНЧУК

Розвиток природничих наук як основа новітніх досягнень у медицині: матеріали II науково-практичної інтернет-конференції, м. Чернівці, 22 червня 2022 р. / за ред. В. І. Федіва – Чернівці: БДМУ, 2022. – 489 с.

У збірнику подані матеріали науково-практичної інтернет-конференції «Розвиток природничих наук як основа новітніх досягнень у медицині». У статтях та тезах представлені результати теоретичних і експериментальних досліджень.

Матеріали подаються в авторській редакції. Відповідальність за достовірність інформації, правильність фактів, цитат та посилань несуть автори.

Для наукових та науково-педагогічних співробітників, викладачів закладів вищої освіти, аспірантів та студентів.

Рекомендовано до друку Вченою Радою Буковинського державного медичного університету (Протокол №11 від 22.06.2022 р.)

ISBN 978-966-697-983-7

14. Сарапук В.І. Аналіз адаптаційних можливостей до початку ортопедичного лікування. // В.І. Сарапук. / Звітна науково-практична конференція лікарів-інтернів за 2013-2014 навчальний рік. - Івано-Франківськ. – 2014. – С. 75-76.
15. Сарапук В.І. Вивчення рівня адаптаційних можливостей у пацієнтів із повною відсутністю зубів. // В.І. Сарапук. / Звітна науково-практична конференція лікарів-інтернів за 2012-2013 навчальний рік. - Івано-Франківськ. – 2013. С. 53-54.
16. Сарапук В.І. Обґрунтування удосконаленої методики формування протетичної площини у разі виготовлення повних знімних пластинкових протезів. // В.І. Сарапук. / Звітна науково-практична конференція лікарів(провізорів)-інтернів за 2017-2018 навчальний рік. Івано-Франківськ. – 2018. – С. 86-87.

УДК 539.12-164; 539.3

Кузик О.В., Даньків О.О., Столярчук І.Д., Кіт І.І., Гуняк М.І.

Деформаційні ефекти в квантових точках при їх біомедичних застосуваннях

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, м. Дрогобич

olehkuzyk74@gmail.com

Анотація. Побудовано модель квантової точки виду ядро/багатошарова оболонка (CdSe/ZnS/CdS/ZnS), яка зазнає механічної деформації при її біомедичних застосуваннях, обумовленої напруженими гетеромежами, кривизною поверхні, наявністю адсорбованих атомів на поверхні КТ, імплантованих домішок, гідростатичним тиском за рахунок перебування КТ у рідині, лікарськими препаратами, та лігандами, які “обволікають” квантову точку. Досліджено вплив адсорбованого кисню, зумовлений деформаційними ефектами, на спектральні закономірності інтенсивності фотолюмінесценції квантових точок із багатошаровою оболонкою залежно від її структури.

Ключові слова: квантова точка із багатошаровою оболонкою, деформація, ліганди, кисень.

Вступ

Напівпровідникові квантові точки (КТ) володіють широким спектром поглинання, вузьким спектром випромінювання, великим стоксівським зсувом, високим квантовим виходом та фотостійкістю, значною чутливістю та біосумісністю. Тому КТ мають перспективи використання у нанобіології та наномедицині, зокрема, можуть використовуватися в якості флуоресцентних міток для контролю адресної доставки лікарських препаратів у режимі реального часу чи моніторингу лікування злоякісних пухлин [1-3]. Широко в цьому напрямку використовують КТ CdSe. Але КТ мають високу щільність поверхневих дефектів (завдяки

високому співвідношенню площі поверхні до об'єму), які діють як центри безвипромінювальної рекомбінації носіїв у КТ. Це призводить до пониження інтенсивності фотолюмінесценції за рахунок переносу електричного заряду з КТ до молекули протипухлинного препарату. Одним із методів вирішення цієї проблеми є створення квантових точок із захисною оболонкою, яка містить один або декілька шарів [4, 5]. Тому КТ CdSe, які мають багатоконпонентну структуру оболонки ZnS/CdS/ZnS, при незначній товщині, набагато краще пасивують зниження квантового виходу фотолюмінесценції КТ, порівняно як з тонкими, так і товстими оболонками ZnS. Такі КТ можуть стати оптимальними флуоресцентними мітками при створенні систем діагностики і лікування раку. Важливим чинником, який впливає на оптичні та електричні властивості КТ з багатшаровою оболонкою є механічна деформація [6-8]. Окрім внутрішніх чинників (невідповідність параметрів ґраток контактуючих матеріалів; тиск, обумовлений кривизною поверхні), механічна напруга в КТ може виникати за рахунок наявності адсорбованих атомів на поверхні КТ, легованих домішок чи гідростатичного тиску за рахунок перебування КТ у рідині. Ліганди, які “обволікають” КТ, також чинять додатковий тиск. Ракові клітини поглинають КТ активніше, ніж здорові клітини. Це пов'язано зі зміною пружності оточуючого середовища, а саме, зі зміною пружних сталей. Все це повинно відобразитися на зміні механічної напруги та деформації КТ, а встановлені закономірності зміни спектрального складу випромінювання флуоресцентної мітки на основі КТ дозволять оцінити стадію захворювання. Деформація КТ призводить до локального зсуву країв дозволених зон, а це, в свою чергу, призводить до зміни енергетичного спектру електронів та дірок і, відповідно, оптичних властивостей КТ. Таким чином, дослідження впливу деформаційних ефектів на енергетичний спектр носіїв заряду в КТ CdSe з багатоконпонентною оболонкою є актуальною задачею у контексті їх використання в медицині. Один із актуальних напрямків використання КТ у медицині стосується зменшення їх токсичності. Тому дослідження умов локалізації атомів Cd у КТ CdSe/ZnS/CdS/ZnS для зменшення її токсичності за допомогою індукування деформаційно-дифузійних потоків є актуальною задачею.

У даній роботі побудовано модель КТ виду ядро/багатшарова оболонка, яка зазнає механічної деформації при її біомедичних застосуваннях.

Модель

Розглядається сферична КТ з багатшаровою оболонкою з радіусом ядра R_0 та товщинами i -ого шару оболонки $d_i = R_i - R_{i-1}$ ($i = 1, 2, \dots, n$), яка не взаємодіє з іншими КТ та взаємодіє з лігандами, які її обволікають та / чи адсорбованими атомами кисню на її поверхні.

Для знаходження деформації $\varepsilon^{(i)}(r)$ матеріалів квантової точки з багатошаровою оболонкою, концентрації електронів провідності $n^{(i)}(r)$, напруженості електричного поля та електростатичного потенціалу $\varphi^{(i)}(r)$ розв'язувалась самоузгоджена система наступних рівнянь:

1) рівняння для визначення зміщень атомів $u_r^{(i)}$ у матеріалах ядра КТ та шарів оболонки

$$\vec{\nabla} \operatorname{div} \vec{u} = 0 \quad (1)$$

з відповідними граничними умовами [9]. Тиск на поверхні КТ визначається формулою

$$P = \theta N, \quad (2)$$

де θ та N – деформаційний потенціал та концентрація біля поверхні КТ атомів кисню чи молекул лігандів;

2) рівняння Пуассона, з якого визначається електростатичний потенціал $\varphi^{(i)}(r)$

$$\Delta \varphi^{(i)} = \frac{e}{\varepsilon_d^{(i)} \varepsilon_0} \Delta n^{(i)}(r), \quad (3)$$

де $\varepsilon_d^{(i)}$ – діелектрична проникність відповідного матеріалу гетеросистеми,

$$\Delta n^{(i)}(r) = R_S^{(i)} (e \varphi^{(i)}(r) - a_c^{(i)} \varepsilon^{(i)}(r)), \quad (4)$$

де $a_c^{(i)}$ – константа деформаційного потенціалу зони провідності, $R_S^{(i)}$ – деяка стала величина [8], яка залежить від пружних сталих та ступеня заповнення електронами зони провідності.

Результати розрахунків

Розрахунки деформації багатошарової сферичної КТ проводились для структур ядро-CdSe / оболонка-ZnS та ядро-CdSe / оболонка-ZnS/CdS/ZnS із відповідними значеннями параметрів [10, 11].

На рис. 1, 2 приведено залежність деформації матеріалів КТ CdSe/ZnS та CdSe / ZnS/CdS/ZnS, яка зумовлена тиском з боку адатомів кисню від їх поверхневої концентрації за різних радіусів ядра КТ. Така залежність пояснюється створенням тиску адатомами кисню на поверхні КТ. Причому найбільшій деформації зазнає ядро КТ, що пояснюється його меншим радіусом, а найменшій деформації – внутрішній шар оболонки CdS (рис. 1). Зміна радіуса ядра від 2 нм (рис. 1а) до 6 нм (рис. 1б) практично не змінює величини деформації. Це пояснюється тим, що для таких геометричних розмірів КТ за будь-яких значень концентрації адатомів кисню тиск відрізняється дуже мало.

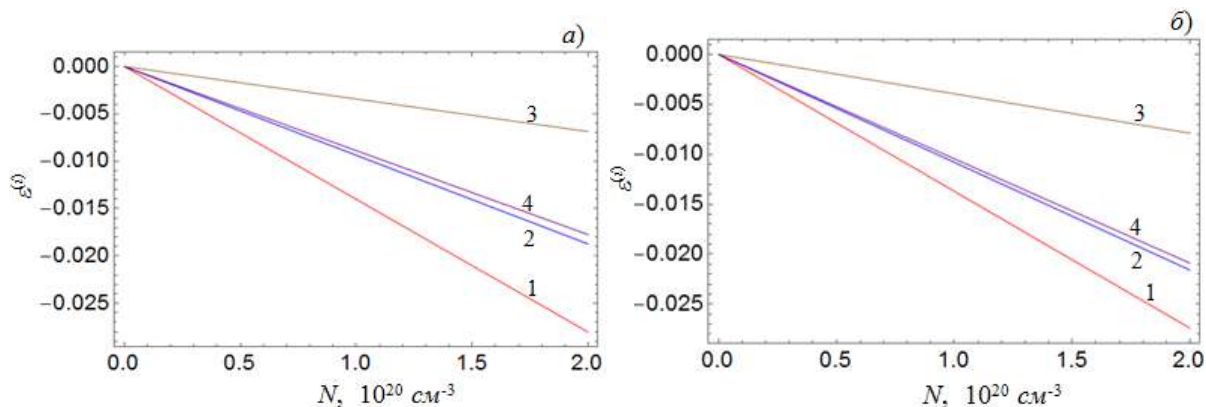


Рис. 1. Залежність деформації ядра КТ (1) та шарів оболонки (2 – ZnS, 3 – CdS, 4 – ZnS-зовнішня оболонка)) в КТ ядро-CdSe / оболонка-ZnS/CdS/ ZnS від концентрації адатомів кисню за різних радіусів ядра КТ: $R_0 = 2$ нм (а); $R_0 = 6$ нм (б)

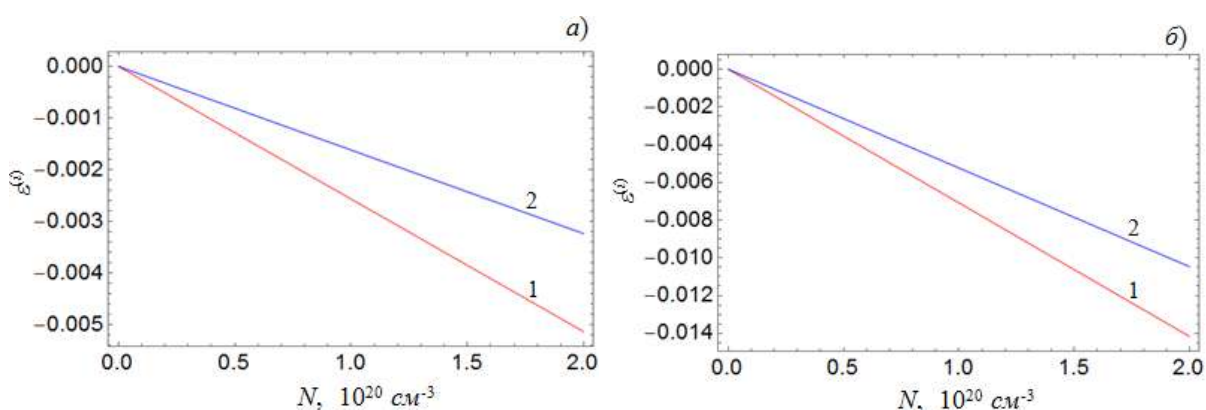


Рис. 2. Залежність деформації ядра КТ (1) та оболонки (2) в КТ ядро-CdSe / оболонка-ZnS від поверхневої концентрації альбуміну за різних радіусів ядра КТ: $R_0 = 2$ нм (а); $R_0 = 6$ нм (б)

Для встановлення закономірностей впливу кількості шарів оболонки на деформацію матеріалів КТ при її взаємодії із адсорбованими атомами кисню було розраховано деформацію в КТ ядро-CdSe / оболонка-ZnS за різних концентрацій кисню та різних радіусів ядра КТ (рис. 2). Характер залежності деформації у випадку одношарової оболонки аналогічний до відповідної залежності для КТ з тришаровою оболонкою. Але зменшення кількості шарів призводить до суттєвого зменшення деформації за рахунок тиску, зумовленого впливом кисню. Так, для КТ CdSe/ZnS з радіусом ядра 2 нм (рис. 2а) деформація матеріалу CdSe є меншою майже в 5,4 разів, ніж у КТ CdSe / ZnS/CdS/ZnS (рис 1а) при концентрації молекул кисню $N = 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$.

Отримані результати є важливими для прогнозованого керування оптичними характеристиками КТ, які взаємодіють з біологічними об'єктами. При зміні геометричних

розмірів окремих шарів оболонки або їх кількості, при різній концентрації КТ чи адатомів кисню величина деформації може змінюватися в широкому діапазоні і, відповідно, змінювати зонну структуру КТ.

На рис. 3 приведено залежність енергетичного зсуву дна зони провідності в матеріалах ядра КТ та шарів оболонки для КТ ядро-CdSe / оболонка-ZnS/CdS/ZnS (рис. 3а) та КТ ядро-CdSe / оболонка-ZnS (рис. 3б) від концентрації кисню. Пружна взаємодія біологічних об'єктів, які містять значну концентрацією кисню, з КТ призводить до короткохвильового зсуву максимуму інтенсивності фотолюмінесценції на 80 *meV* для КТ із тришаровою оболонкою та 30 *meV* для КТ з одношаровою оболонкою.

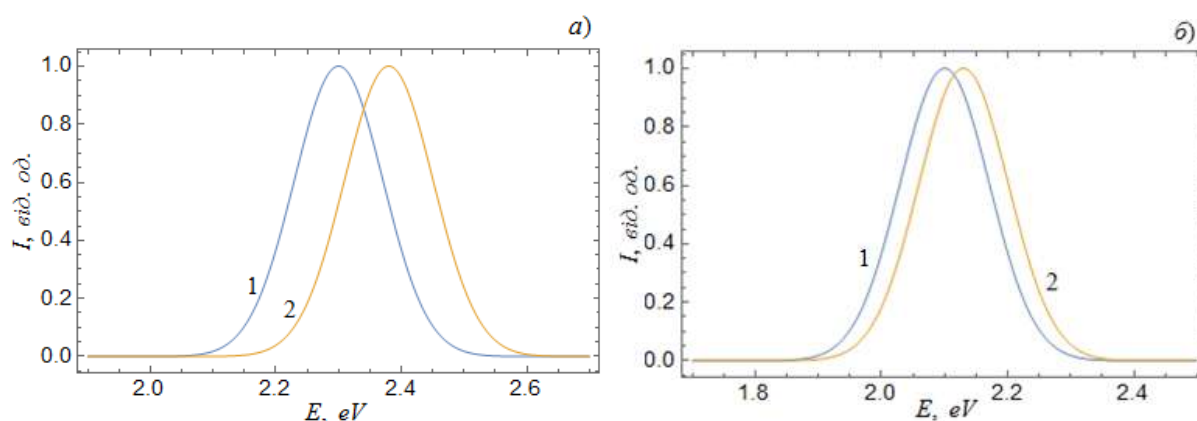


Рис. 3. Інтенсивність фотолюмінесценції КТ CdSe / ZnS/CdS/ZnS (а) та CdSe/ZnS (б) за наявності атомів кисню на поверхні КТ (2) та за їхньої відсутності (1)

Таким чином, встановлено, що КТ CdSe / ZnS/CdS/ZnS є більш чутливими до механічної деформації при їх біомедичних застосуваннях, ніж КТ CdSe/ZnS.

Список використаних джерел

1. Stock E., Dachner M.-R. Acoustic and optical phonon scattering in a single In(Ga)As quantum dot. *Physical Review*. 2011. V.83. P. 041304. URL: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.041304>.
2. Nadtochiy A.M., Blokhin S.A. Dynamic properties of AlGaAs vertical cavity surface emitting lasers with active region based on submonolayer InAs insertions. *Semiconductors*. 2011. V.45. P. 679. URL: <https://doi.org/10.1134/S1063782611050216>.
3. Sadeghi E. Optical nutation in multilayered ellipsoidal quantum dots. *Phys. E: Low-dimen. syst. and nanostr.* 2015. V.73. P. 1. URL: <https://doi.org/10.1016/j.physe.2015.05.015>.
4. Li B., Liu W., Zhu X. Pressure-dependent photoluminescence of CdSe/ZnS quantum dots: Critical point of different pressure regimes. *Physics Letters A*. 2019. V. 383. № 13. P. 1483-1486. URL: <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2019.01.059>.

5. Fan H.M., Ni Z.H., Feng Y.P., Fan X.F. High pressure photoluminescence and Raman investigations of CdSe/ZnS core/shell quantum dots. *Appl. Phys. Lett.* 2007. V. 90 P. 021921. URL: <https://doi.org/10.1063/1.2430772>.
6. Peleshchak R.M., Kuzyk O.V., Dan'kiv O.O. The conditions of formation of the uniform-sized quantum dots in the field of an ultrasonic wave. *Journal of Nano Research.* 2019. V. 57. P. 40. URL: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/JNanoR.57.40>.
7. Peleshchak R.M., Kuzyk O.V., Dan'kiv O.O. Influence of deformation effects on electrical properties of metal–semiconductor–doped semiconductor structure. *Ukr. J. Phys.* 2010. V. 55. P. 434–439. URL: <http://archive.ujp.bitp.kiev.ua/files/journals/55/4/550411p.pdf>.
8. Kuzyk O., Dan'kiv O., Peleshchak R., Stolyarchuk I. The Deformation of Spherical CdSe Quantum Dot with a Multilayer Shell. *Rom. J. Phys.* 2022. V.67 P. 607. URL: <https://rjp.nipne.ro/accpaps/9A041FF115318A99B2115B8B1710011B6C6F13CC.pdf>.
9. Peleshchak R.M., Kuzyk O.V., Dan'kiv O.O. The influence of the electrically inactive impurity on the energy spectrum of electron and hole in InAs/GaAs heterostructure with InAs quantum dots. *Rom. J. Phys.* 2020. V. 65. P. 610. URL: https://rjp.nipne.ro/2020_65_7-8/RomJPhys.65.610.pdf.
10. Vollath D., Fischer F.D., Holec D., Surface energy of nanoparticles – influence of particle size and structure. *Beilstein J. Nanotechnol.* 2018. V. 9. P. 2265. URL: <https://doi.org/10.3762/bjnano.9.211>.
11. Xu F., Zhou W., Navrotsky A. Cadmium selenide: Surface and nanoparticle energetic. *Journal of Materials Research.* 2011. V. 26. P. 720. URL: <https://doi.org/10.1557/jmr.2011.20>.

УДК 615.837+616-073.432.19

Олар О.І.

Новітні напрямки і перспективи використання ультразвуку у медицині

Буковинський державний медичний університет, м.Чернівці, Україна

olena.olar@bsmu.edu.ua

Анотація. Розглянуто основні напрямки і перспективи використання ультразвуку у діагностичних, терапевтичних, хірургічних методиках. Проаналізовано основні досягнення в розвитку ультразвукового обладнання, що дозволило розширення спектру медичних послуг в останнє десятиліття.

Ключові слова: УЗД, ехоконтраст, неінвазивна хірургія, штучний інтелект, доставка ліків.

Ультразвукові медичні технології значно покращилися за останнє десятиліття. Завдяки здобуткам у галузях технологій візуалізації, автоматизації, мобільності та інформаційних технологій і появі інноваційних спеціалізованих ультразвукових систем значно розширився увесь спектр медичних послуг.