

Современная наука и инновации.  
2023. № 4 (44). С. 130-137.  
Modern Science and Innovations.  
2023; 4(44):130-137.

ТЕХНОЛОГИЯ ПРОДОВОЛЬСТВЕННЫХ  
ПРОДУКТОВ /  
TECHNOLOGY OF FOOD PRODUCTS

Научная статья / Original article

УДК 004.94 + 546.41  
<https://doi.org/10.37493/2307-910X.2023.4.14>

**Максим Александрович Пирогов**  
[Maxim A. Pirogov]<sup>1\*</sup>,  
**Андрей Владимирович Блинов**  
[Andrey V. Blinov]<sup>2</sup>,  
**Ирина Михайловна Шевченко**  
[Irina M. Shevchenko]<sup>3</sup>,  
**Мария Анатольевна Ясная**  
[Maria A. Yasnaya]<sup>4</sup>,  
**Алексей Алексеевич Гвозденко**  
[Alexey A. Gvozdenko]<sup>5</sup>,  
**Алексей Борисович Голик**  
[Alexey B. Golik]<sup>6</sup>,  
**Зафар Абдулович Рехман**  
[Zafar A. Rehman]<sup>7</sup>

**Компьютерное квантово-химическое  
моделирование взаимодействия  
карбоната кальция с биополимерами**

**Computer quantum-chemical simulation  
of the interaction of calcium carbonate  
with biopolymers**

<sup>1, 2, 3, 4, 5, 6, 7</sup> *Северо-Кавказский Федеральный Университет, г. Ставрополь, Россия /  
North-Caucasus Federal University, Stavropol, Russia*

*\*Автор, ответственный за переписку: Максим Александрович Пирогов,  
pirogov.m.2002@gmail.com / Corresponding author: Maxim A. Pirogov,  
pirogov.m.2002@gmail.com*

**Аннотация.** В рамках данной работы проведено компьютерное квантово-химическое моделирование взаимодействия карбоната кальция с биополимерами (хитозан, гидроксиэтилцеллюлоза, гиалуроновая кислота). Квантово-химическое моделирование проводилось с использованием программного обеспечения QChem и молекулярного редактора IQmol. На первом этапе проводилось моделирование молекулы карбоната кальция и молекул хитозана, гидроксиэтилцеллюлозы, гиалуроновой кислоты, затем рассматривался молекулярный комплекс «карбонат кальция – биополимер», в котором взаимодействие карбоната кальция с биополимерами рассматривали как взаимодействие атома кальция в карбонате кальция с функциональными группами биополимеров. В результате получены модели молекулярных комплексов, а также рассчитаны значения полной энергии молекулярного комплекса, энергии высшей заселённой и низшей свободной молекулярных орбиталей, химической жёсткости и разницы полной энергии аминокислоты и молекулярного комплекса «карбонат кальция – биополимер». В результате установлено, что хитозан, гидроксиэтилцеллюлоза, гиалуроновая кислота могут использоваться для стабилизации наночастиц карбоната кальция, что подтверждается значениями разницы полной энергии и химической жёсткости молекулярных комплексов. Показано, что для хитозана оптимальным взаимодействием ( $\Delta E = 939,445$  ккал/моль,  $\eta = 0,026$  эВ) является соединение через аминогруппу, присоединённую к  $C_2$  остатка глюкозамина, для гидроксиэтилцеллюлозы – соединение через гидроксильную группу, присоединённую к  $C_6$  остатка этоксигруппу ( $\Delta E = 939,762$  ккал/моль,  $\eta = 0,036$  эВ), для гиалуроновой кислоты – соединение через гидроксильную группу, присоединённую к  $C_6$  остатка *N*-ацетилглюкозамина ( $\Delta E = 939,413$  ккал/моль,  $\eta = 0,022$  эВ).

© Пирогов М. А., Блинов А. В., Шевченко И. М., Ясная М. А., Гвозденко А. А., Голик А. Б., Рехман З. А., 2023

**Ключевые слова:** компьютерное квантово-химическое моделирование, наночастицы карбоната кальция, биополимеры, химическая жёсткость

**Для цитирования:** Пирогов М. А., Блинов А. В., Шевченко И. М., Ясная М. А., Гвозденко А. А., Голик А. Б., Рехман З. А. Компьютерное квантово-химическое моделирование взаимодействия карбоната кальция с биополимерами // Современная наука и инновации. 2023. № 4 (44). С. 130-137. <https://doi.org/10.37493/2307-910X.2023.4.14>

**Финансирование:** работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект FSRN-2023-0037).

**Abstract.** As part of this work, computer quantum chemical modeling of the interaction of calcium carbonate with biopolymers (chitosan, hydroxyethylcellulose, hyaluronic acid) was carried out. Quantum chemical modeling was carried out using QChem software and the IQmol molecular editor. At the first stage, modeling of the calcium carbonate molecule and molecules of chitosan, methylcellulose, hydroxyethylcellulose, hyaluronic acid was carried out, then the molecular complex “calcium carbonate - biopolymer” was considered, in which the interaction of calcium carbonate with biopolymers was considered as the interaction of the calcium atom in calcium carbonate with the functional groups of biopolymers. As a result, models of molecular complexes were obtained, and the values of the total energy of the molecular complex, the energy of the highest occupied and lowest free molecular orbitals, chemical hardness and the difference in the total energy of the amino acid and the molecular complex “calcium carbonate - biopolymer” were calculated. As a result, it was found that chitosan, hydroxyethylcellulose, and hyaluronic acid can be used to stabilize calcium carbonate nanoparticles, which is confirmed by the values of the difference in total energy and chemical rigidity of molecular complexes. It has been shown that for chitosan the optimal interaction ( $\Delta E = 939.445$  kcal/mol,  $\eta = 0.026$  eV) is the connection through the amino group attached to the C2 glucosamine residue, for hydroxyethylcellulose - the connection through the hydroxyl group attached to the C6 ethoxy group ( $\Delta E = 939.762$  kcal/mol,  $\eta = 0.036$  eV), for hyaluronic acid – connection through the hydroxyl group attached to the C6 residue of N-acetylglucosamine ( $\Delta E = 939.413$  kcal/mol,  $\eta = 0.022$  eV).

**Keywords:** computer quantum chemical modeling, calcium carbonate nanoparticles, biopolymers, chemical hardness

**For citation:** Pirogov MA, Blinov AV, Shevchenko IM, Yasnaya MA, Gvozdenco AA, Golik AB, Rehman ZA. Computer quantum-chemical simulation of the interaction of calcium carbonate with biopolymers. Modern Science and Innovations. 2023;4(44):130-137. (In Russ.). <https://doi.org/10.37493/2307-910X.2023.4.14>

**Funding:** the work was carried out with financial support from the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project FSRN-2023-0037).

**Введение.** Перспективным материалом медицины и биомедицины является наноразмерный карбонат кальция, который можно применять в качестве в качестве матричных контейнеров для иммобилизации биологически активных веществ [1 – 3]. Наночастицы карбоната кальция обладают рядом таких достоинств, как биосовместимость, мягкие условия разрушения (растворение при pH < 6,5), простота приготовления и низкая себестоимость. Возможность использования контейнеров для инкапсуляции лекарственных средств на основе карбоната кальция обусловлена низкой цитотоксичностью карбоната кальция и отсутствием его влияния на жизнеспособность клеточных культур, а также эффективностью их применения в качестве контейнеров для внутриклеточной доставки [4 – 6]. Было показано, что использование таких частиц для инкапсуляции лекарственного соединения усиливает терапевтический эффект от его применения благодаря повышению локальной концентрации действующего вещества, доставляемого внутрь клетки [7].

Для применения в биомедицинских и медицинских целях необходимо, чтобы частицы обладали высокой стабильностью в различных условиях среды. В работах [8 – 10] показано, что наночастицы карбоната кальция склонны к агрегации и оседанию в растворах. Для преодоления данной проблемы необходимо правильно подобрать стабилизатор [11 – 15]. Важно отметить, что стабилизатор тоже должен быть разрешен для применения в биомедицинских целях, обладать биодоступностью и

биodeградируемостью. В связи с этим актуальным является использование биополимеров в качестве стабилизатора наночастиц карбоната кальция.

Целью данной работы является исследование процесса взаимодействия карбоната кальция с различными биополимерами: хитозан, гиалуроновая кислота и гидроксиэтилцеллюлоза.

**Материалы и методы исследований.** Квантово-химическое моделирование процесса взаимодействия карбоната кальция с различными биополимерами проводилось с использованием программы QChem. Построение молекул проводилось в молекулярном редакторе IQmol при следующих параметрах построения: расчет – Energy, метод – B3LYP, базис – 6-31G\*, convergence – 5, силовое поле – Gchemical.

Квантово-химическое моделирование проводилось в два этапа. На первом этапе проведено моделирование молекул биополимеров: гидроксиэтилцеллюлоза, хитозан, гиалуроновая кислота. На втором этапе рассматривалось взаимодействие атома кальция в карбонате кальция с функциональными группами биополимеров.

В рамках квантово-химического моделирования рассчитывались полная энергия молекулярного комплекса ( $E$ ), энергия высшей заселённой молекулярной орбитали ( $E_{\text{HOMO}}$ ) и энергия низшей свободной молекулярной орбитали ( $E_{\text{LUMO}}$ ). На основе полученных результатов были рассчитана разница энергии биополимера и молекулярной системы «CaCO<sub>3</sub>+биополимер» ( $\Delta E$ ) и химическая жёсткость молекулярной системы ( $\eta$ ), характеризующая стабильность системы (формулы 1, 2) [16, 17]:

$$\Delta E = E_1 - E_2, \quad (1)$$

где  $E_1$  – полная энергия биополимера, ккал/моль;  $E_2$  – полная энергия системы «CaCO<sub>3</sub>+биополимер», ккал/моль.

$$\eta = \frac{(E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}})}{2}, \quad (2)$$

где  $E_{\text{LUMO}}$  – энергия низшей свободной молекулярной орбитали, эВ;  $E_{\text{HOMO}}$  – энергия высшей заселённой молекулярной орбитали, эВ.

**Результаты исследований и их обсуждение.** В рамках квантово-химического моделирования процесса взаимодействия наночастиц карбоната кальция с биополимерами проведены квантово-химические расчёты, результаты которых представлены в таблице 1.

**Таблица 1 – Результаты квантово-химического моделирования процесса взаимодействия наночастиц карбоната кальция с биополимерами**

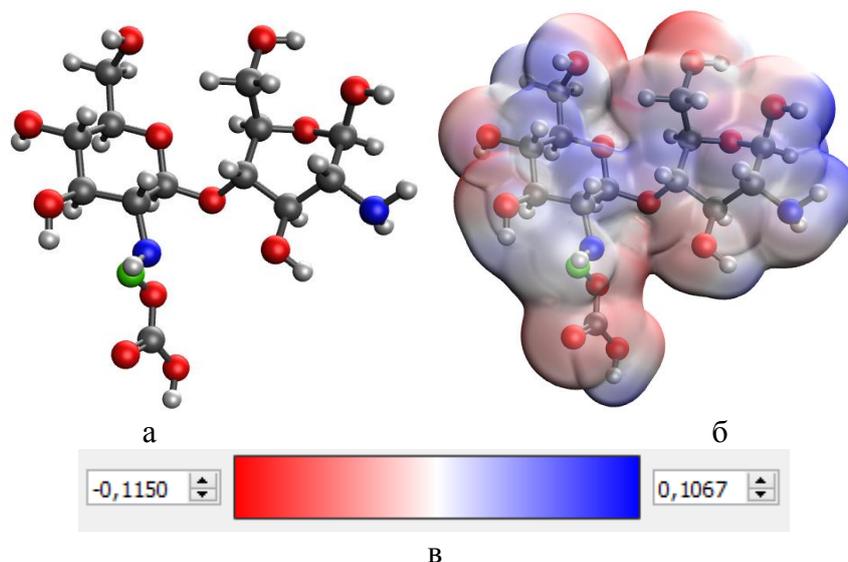
**Table 1 – Results of quantum chemical modeling of the interaction of calcium carbonate nanoparticles with biopolymers**

Биополимер	Взаимодействие с биополимером	$E$ , ккал/моль	$\Delta E$ , ккал/моль	$E_{\text{HOMO}}$ , эВ	$E_{\text{LUMO}}$ , эВ	$\eta$
Хитозан	–	-1258,049	–	-0,225	0,030	0,128
	Через гидроксильную группу, присоединённую к C <sub>6</sub> остатка глюкозамина	-2197,511	939,462	-0,059	-0,013	0,023
	Через гидроксильную группу, присоединённую к C <sub>3</sub> остатка глюкозамина	-2197,442	939,393	-0,066	-0,028	0,019
	Через аминогруппу, присоединённую к C <sub>2</sub> остатка глюкозамина	-2197,494	939,445	-0,083	-0,032	0,026
Гидроксиэтил целлюлоза	–	-2220,750	–	-0,235	0,041	0,138
	Через этоксигруппу, присоединённую к C <sub>3</sub> остатка глюкопиранозы	-3160,028	939,278	-0,061	-0,028	0,017
	Через этоксигруппу, присоединённую к C <sub>2</sub>	-3159,701	938,951	-0,085	-0,069	0,008

	остатка глюкопиранозы					
	Через этоксигруппу, присоединённую к $C_6$ остатка глюкопиранозы	-3160,512	939,762	-0,098	-0,026	0,036
Гиалуроновая кислота	–	-1429,434	–	-0,232	-0,002	0,115
	Через карбоксильную группу, присоединённую к $C_6$ остатка глюкопиранозы	-2368,784	939,350	-0,098	-0,063	0,018
	Через гидроксильную группу, присоединённую к $C_3$ остатка глюкопиранозы	-2368,806	939,372	-0,072	-0,041	0,016
	Через гидроксильную группу, присоединённую к $C_2$ остатка глюкопиранозы	-2368,831	939,397	-0,080	-0,036	0,022
	Через гидроксильную группу, присоединённую к $C_4$ остатка <i>N</i> -ацетилглюкозамина	-2368,809	939,375	-0,073	-0,034	0,020
	Через гидроксильную группу, присоединённую к $C_6$ остатка <i>N</i> -ацетилглюкозамина	-2368,847	939,413	-0,074	-0,030	0,022
	Через вторичную аминогруппу в ацетамидном радикале, присоединённом к $C_2$ остатка <i>N</i> -ацетилглюкозамина	-2368,766	939,332	-0,070	-0,032	0,019

Исходя из анализа полученных данных установлено, что все представленные соединения являются энергетически выгодными ( $\Delta E > 939,330$  ккал/моль).

На основе оптимальных значений химической жёсткости и разницы полной энергии определены наиболее вероятные варианты взаимодействия карбоната кальция с биополимерами. Для хитозана оптимальным взаимодействием ( $\Delta E = 939,445$  ккал/моль,  $\eta = 0,026$  эВ) является соединение через аминогруппу, присоединённую к  $C_2$  остатка глюкозамина, представленное на рисунке 1.



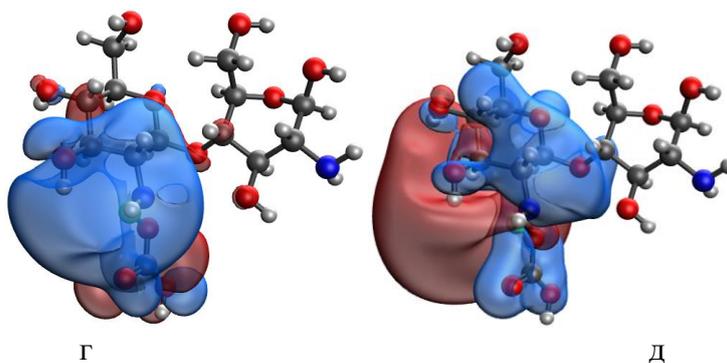


Рисунок 1 – Результаты моделирования взаимодействия молекул хитозана и карбоната кальция через аминокгруппу, присоединённую к  $C_2$  остатка глюкозамина в хитозане: а – модель молекулярного комплекса; б – распределение электронной плотности; в – градиент распределения электронной плотности; г – высшая заселённая молекулярная орбиталь (HOMO); д – низшая свободная молекулярная орбиталь (LUMO)

Figure 1 – Results of modeling the interaction of chitosan and calcium carbonate molecules through an amino group attached to the  $C_2$  of the glucosamine residue in chitosan: a – model of the molecular complex; b – electron density distribution; c – gradient of the electron density distribution; d – the highest populated molecular orbital (HOMO); d – the lowest free molecular orbital (LUMO)

Оптимальным взаимодействием для гидроксиэтилцеллюлозы ( $\Delta E = 939,762$  ккал/моль,  $\eta = 0,036$  эВ) является соединение через гидроксильную группу, присоединённую к  $C_6$  остатка этоксигруппы, представленное на рисунке 2.

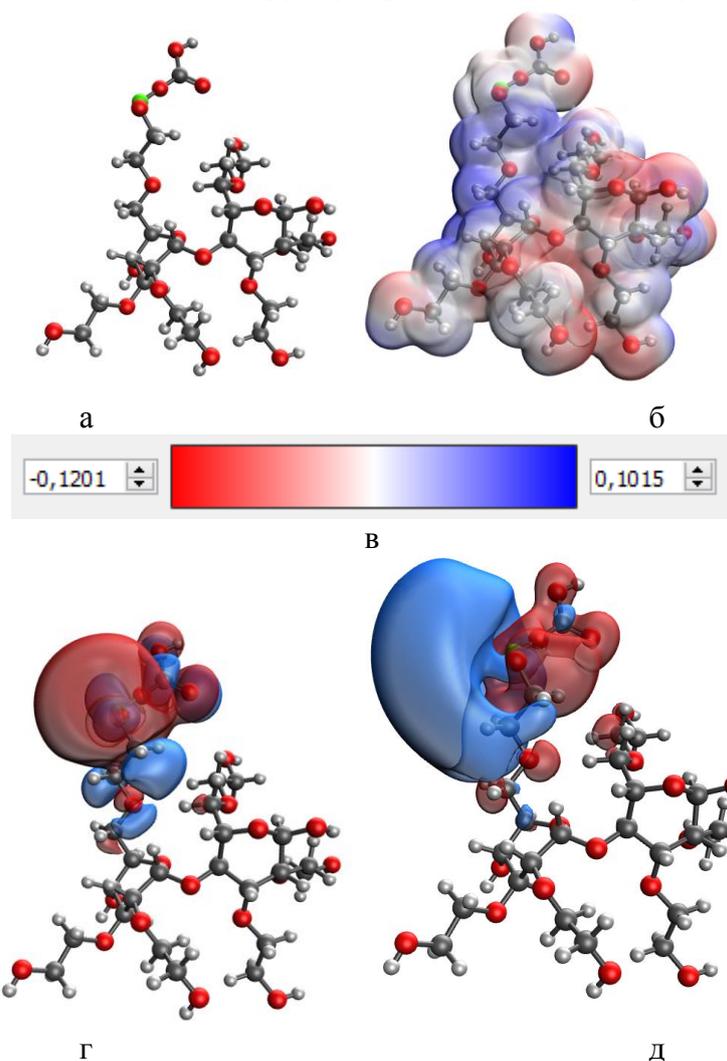


Рисунок 2 – Результаты моделирования взаимодействия молекул гидроксиэтилцеллюлозы и карбоната кальция через этилгидроксильную группу, присоединённую к  $C_6$  остатка глюкопиранозы в

гидроксиэтилцеллюлозе: а – модель молекулярного комплекса; б – распределение электронной плотности; в – градиент распределения электронной плотности; г – высшая заселённая молекулярная орбиталь (HOMO); д – низшая свободная молекулярная орбиталь (LUMO)

**Figure 2 – Results of modeling the interaction of hydroxyethylcellulose and calcium carbonate molecules through an ethylhydroxyl group attached to C6 of the glucopyranose residue in hydroxyethylcellulose: а – model of the molecular complex; б – electron density distribution; в – gradient of the electron density distribution; д – the highest populated molecular orbital (HOMO); е – the lowest free molecular orbital (LUMO)**

Оптимальным взаимодействием для гиалуроновой кислоты ( $\Delta E = 939,413$  ккал/моль,  $\eta = 0,022$  эВ) является соединение через гидроксильную группу, присоединённую к C<sub>6</sub> остатка N-ацетилглюкозамина.

Установлено, что формирование химического взаимодействия между молекулами биополимеров и карбоната кальция обусловлено смещением электронной плотности и формированием молекулярных орбиталей в зоне взаимодействия между молекулами.

**Закключение.** В результате проведения компьютерного квантово-химического моделирования взаимодействия карбоната кальция с биополимерами (хитозан, гидроксиэтилцеллюлоза, гиалуроновая кислота) получены модели молекулярных комплексов «карбонат кальция – биополимер», получены значения полной энергии молекулярного комплекса, энергии высшей заселённой и низшей свободной молекулярных орбиталей, а также рассчитаны значения химической жёсткости системы и разницы полной энергии биополимера и молекулярного комплекса. Исходя из полученных данных установлено, что хитозан, гидроксиэтилцеллюлоза, гиалуроновая кислота могут использоваться для стабилизации наночастиц карбоната кальция.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Volodkin D.V. et. al. Matrix polyelectrolyte microcapsules: New system for macromolecule encapsulation // *Langmuir*. 2004. Vol. 20. No. 8. P. 3398.
2. Svenskaya Y.I. et. al. Photodynamic therapy platform based on localized delivery of photosensitizer by vaterite submicron particles. *Colloids and Surfaces // B: Biointerfaces*. 2016. Vol. 1. No. 146. P. 171–179.
3. Maleki Dizaj et. al. Calcium carbonate nanoparticles as cancer drug delivery system // *Expert opinion on drug delivery*. 2015. Vol. 12. No. 10. P. 1649-1660.
4. Hettiarachchi et. al. Synthesis of calcium carbonate microcapsules as self-healing containers // *RSC advances*. 2019. Vol. 9. No. 41. P. 23666-23677.
5. Parakhonskiy B. V., Foss C., Carletti E. Tailored intracellular delivery via a crystal phase transition in 400 nm vaterite particles // *Biomaterials Science*. 2013. Vol. 1. No. 12. P. 1273–1281.
6. Bukreeva et. al. Calcium carbonate and titanium dioxide particles as a basis for container fabrication for brain delivery of compounds. *Doklady physical chemistry*. 2011. V. 440. P. 165-167.
7. Fujiwara M. et. al. Calcium carbonate microcapsules encapsulating biomacromolecules // *Chemical Engineering Journal*. 2008. Vol. 1. No. 137. P. 14–22.
8. Biradar S. et. al. Calcium carbonate nanoparticles: synthesis, characterization and biocompatibility // *Journal of Nanoscience and nanotechnology*. 2011. Vol. 11. No. 8. P. 6868-6874.
9. Kim J. et. al. Improved suspension stability of calcium carbonate nanoparticles by surface modification with oleic acid and phospholipid // *Biotechnology and bioprocess engineering*. 2015. Vol. 20. P. 794-799.
10. Sun R. et. al. The effects of additives on the porosity and stability of amorphous calcium carbonate // *Microporous and mesoporous materials*. 2020. Vol. 292. P. 109736.
11. Nagaraja A.T., Pradhan S., McShane M. J. Poly (vinylsulfonic acid) assisted synthesis of aqueous solution stable vaterite calcium carbonate nanoparticles // *Journal of colloid and interface science*. 2014. Vol. 418. P. 366-372.
12. Chuzeville L. et. al. Eco-friendly processes for the synthesis of amorphous calcium carbonate nanoparticles in ethanol and their stabilisation in aqueous media // *Green Chemistry*. 2022. Vol. 24. No. 3. P. 1270-1284.
13. Xu D. et. al. Synthesis of stable calcium carbonate nanoparticles for pH-responsive controlled drug release // *Green Materials Letters*. 2022. Vol. 333. P. 133635.
14. Rao C. et. al. In vitro preparation and characterization of amorphous calcium carbonate nanoparticles for applications in curcumin delivery // *Journal of Materials Science*. 2019. Vol. 54. No. 16. P. 11243-11253.
15. Tester C. et. al. In vitro synthesis and stabilization of amorphous calcium carbonate (ACC) nanoparticles within liposomes // *CrystEngComm*. 2011. Vol. 13. No. 12. P. 3975-3978.

16. Блинова А. А. и др. Компьютерное квантово-химическое моделирование взаимодействия фосфата кальция с аминокислотами // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2022. № 14. С. 352-361.
17. Blinova A.A. et al. Synthesis and characterization of calcium silicate nanoparticles stabilized with amino acids // *Micromachines*. 2023. Vol. 14. No. 2. P. 245.

## REFERENCES

1. Volodkin DV et. al. Matrix polyelectrolyte microcapsules: New system for macromolecule encapsulation. *Langmuir*. 2004;20;8:3398.
2. Svenskaya YI et. al. Photodynamic therapy platform based on localized delivery of photosensitizer by vaterite submicron particles. *Colloids and Surfaces. B: Biointerfaces*. 2016;1(146):171-179.
3. Maleki Dizaj et. al. Calcium carbonate nanoparticles as cancer drug delivery system. Expert opinion on drug delivery. 2015;12(10):1649-1660.
4. Hettiarachchi et. al. Synthesis of calcium carbonate microcapsules as self-healing containers. *RSC advances*. 2019;9:41:23666-23677.
5. Parakhonskiy BV, Foss C, Carletti E. Tailored intracellular delivery via a crystal phase transition in 400 nm vaterite particles. *Biomaterials Science*. 2013;1:12:1273–1281.
6. Bukreeva et. al. Calcium carbonate and titanium dioxide particles as a basis for container fabrication for brain delivery of compounds. *Doklady physical chemistry*. 2011;440:165-167.
7. Fujiwara M et. al. Calcium carbonate microcapsules encapsulating biomacromolecules. *Chemical Engineering Journal*. 2008;1:137:14–22.
8. Biradar S et. al. Calcium carbonate nanoparticles: synthesis, characterization and biocompatibility. *Journal of Nanoscience and nanotechnology*. 2011;11:8:6868-6874.
9. Kim J et. al. Improved suspension stability of calcium carbonate nanoparticles by surface modification with oleic acid and phospholipid. *Biotechnology and bioprocess engineering*. 2015;.20:794-799.
10. Sun R et. al. The effects of additives on the porosity and stability of amorphous calcium carbonate. *Microporous and mesoporous materials*. 2020;292:109736.
11. Nagaraja AT, Pradhan S, McShane MJ. Poly (vinylsulfonic acid) assisted synthesis of aqueous solution stable vaterite calcium carbonate nanoparticles. *Journal of colloid and interface science*. 2014;418:366-372.
12. Chuzeville L et. al. Eco-friendly processes for the synthesis of amorphous calcium carbonate nanoparticles in ethanol and their stabilisation in aqueous media. *Green Chemistry*. 2022;24(3):1270-1284.
13. Xu D et. al. Synthesis of stable calcium carbonate nanoparticles for pH-responsive controlled drug release. *Green Materials Letters*. 2022;333:133635.
14. Rao C et. al. In vitro preparation and characterization of amorphous calcium carbonate nanoparticles for applications in curcumin delivery. *Journal of Materials Science*. 2019;54(16):11243-11253.
15. Tester C et. al. In vitro synthesis and stabilization of amorphous calcium carbonate (ACC) nanoparticles within liposomes. *CrystEngComm*. 2011;13(12):3975-3978.
16. Блинова АА. и др. Комп'ютерное квантово-химическое моделирование взаимодействия фосфата кал'тсиа с аминокислотами. Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2022;14:352-361. (In Russ.).
17. Blinova AA. et al. Synthesis and characterization of calcium silicate nanoparticles stabilized with amino acids. *Micromachines*. 2023;14(2):245.

## ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

**Максим Александрович Пирогов** – студент 4 курса бакалавриата кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет, Северо-Кавказский федеральный университет, ул. Пушкина, 1, г. Ставрополь, 355029, Россия, +79614883920, <https://orcid.org/0000-0001-9217-6262>, [pirogov.m.2002@gmail.com](mailto:pirogov.m.2002@gmail.com)

**Андрей Владимирович Блинов** – кандидат технических наук, доцент кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет, Северо-Кавказский федеральный университет, ул. Пушкина, 1, г. Ставрополь, 355029, Россия, +79887679460, <https://orcid.org/0000-0001-9321-550X>

**Ирина Михайловна Шевченко** – кандидат технических наук, доцент кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет, Северо-Кавказский федеральный университет, ул. Пушкина, 1, г. Ставрополь, 355029, Россия, +79187873330, <https://orcid.org/0009-0005-9113-9335>, [imshevchenko@ncfu.ru](mailto:imshevchenko@ncfu.ru)

**Мария Анатольевна Ясная** – кандидат химических наук, доцент кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет, Северо-Кавказский федеральный университет, ул. Пушкина, 1, г. Ставрополь, 355029, Россия, +79187873330, <https://orcid.org/0000-0002-4486-4834>, [jasnaja.marija@mail.ru](mailto:jasnaja.marija@mail.ru).

**Алексей Алексеевич Гвозденко** – ассистент кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет, Северо-Кавказский федеральный университет, ул. Пушкина, 1, г. Ставрополь, 355029, Россия, +79887060469, <https://orcid.org/0000-0001-7763-5520>, [gvozdenko.1999a@gmail.com](mailto:gvozdenko.1999a@gmail.com)

**Алексей Борисович Голик** – ассистент кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет, Северо-Кавказский федеральный университет, ул. Пушкина, 1, г. Ставрополь, 355029, Россия, +79180124774, <https://orcid.org/0000-0003-2580-9474>, [lexgoldman@gmail.com](mailto:lexgoldman@gmail.com)

**Зафар Абдулович Рехман** – ассистент кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет, Северо-Кавказский федеральный университет, ул. Пушкина, 1, г. Ставрополь, 355029, Россия, +79624073291, <https://orcid.org/0000-0003-2809-4945>, [zafrehman1027@gmail.com](mailto:zafrehman1027@gmail.com)

#### INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

**Maxim A. Pirogov** – Student of the Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University, 1, Pushkin St., Stavropol, 355029, Russia, +79614883920, <https://orcid.org/0000-0001-9217-6262>, [pirogov.m.2002@gmail.com](mailto:pirogov.m.2002@gmail.com)

**Andrey V. Blinov** – PhD, Assistant Professor of the Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University, 1, Pushkin St., Stavropol, 355029, Russia, +79887679460, <https://orcid.org/0000-0001-9321-550X>

**Irina M. Shevchenko** – PhD, Assistant Professor of the Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University, 1, Pushkin St., Stavropol, 355029, Russia, +79187873330, <https://orcid.org/0009-0005-9113-9335>, [imshevchenko@ncfu.ru](mailto:imshevchenko@ncfu.ru)

**Maria A. Yasnaya** – PhD, Assistant Professor of the Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University, 1, Pushkin St., Stavropol, 355029, Russia, +79187873330, <https://orcid.org/0000-0002-4486-4834>, [jasnaja.marija@mail.ru](mailto:jasnaja.marija@mail.ru).

**Alexey A. Gvozdenko** – Assistant of the Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University, 1, Pushkin St., Stavropol, 355029, Russia, +79887060469, <https://orcid.org/0000-0001-7763-5520>, [gvozdenko.1999a@gmail.com](mailto:gvozdenko.1999a@gmail.com)

**Alexey B. Golik** – Assistant of the Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University, 1, Pushkin St., Stavropol, 355029, Russia, +79180124774, <https://orcid.org/0000-0003-2580-9474>, [lexgoldman@gmail.com](mailto:lexgoldman@gmail.com)

**Zafar A. Rehman** –Assistant of the Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University, 1, Pushkin St., Stavropol, 355029, Russia, +79624073291, <https://orcid.org/0000-0003-2809-4945>, [zafrehman1027@gmail.com](mailto:zafrehman1027@gmail.com)

**Вклад авторов:** все авторы внесли равный вклад в подготовку публикации.

**Конфликт интересов:** авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

**Contribution of the authors:** the authors contributed equally to this article.

**Conflict of interest:** the authors declare no conflicts of interests.

*Статья поступила в редакцию: 18.10.2023;  
одобрена после рецензирования: 13.11.2023;  
принята к публикации: 05.12.2023.*

*The article was submitted: 18.10.2023;  
approved after reviewing: 13.11.2023;  
accepted for publication: 05.12.2023.*