14

# Плазмонные наностержни Au@$TaS_2$ со структурой „ядро–оболочка“ для эффективной фототермической тераностики

© Эгбали Амир,[1] Ф.А. Шуклин,[1] А.В. Шабанов,[1] Махмудпур Аболфазл,[2] А.А. Вишневый[1]

[1]Центр фотоники и двумерных материалов, МФТИ, Физтех,
141700 Долгопрудный, Московская обл., Россия
[2]Университет ИТМО, Физико-технический мегафакультет,
197101 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: shuklin.fa@mipt.ru

*Поступило в Редакцию 17 марта 2026 г.*
*В окончательной редакции 22 апреля 2026 г.*
*Принято к публикации 28 апреля 2026 г.*

Предложена новая структура наностержней для фототермической тераностики типа ядро–оболочка Au@$TaS_2$, сочетающая сильное плазмонное поглощение золотого ядра с высокой фотостабильностью и оптимальными тепловыми свойствами оболочки. Проведено исчерпывающее численное исследование, которое показало, что применение оболочки $TaS_2$ толщиной 5 nm приводит к красному смещению локализованного поверхностного плазмонного резонанса в область NIR-IIa, росту отношения поглощения к экстинкции, связанного с фототермической конверсией, на 87 % при незначительном уменьшении поглощения ($\sim 17\,\%$) и более равномерному распределению тепла, что снижает риск локального повреждения. По сравнению с гибридными наностержнями TiN-Au, структура Au@$TaS_2$ демонстрирует существенно более сильное оптическое поглощение. Полученные результаты позволяют рассматривать наностержни Au@$TaS_2$ как фототермически стабильную и высокоэффективную платформу для глубинной плазмонной фототермической терапии.

**Ключевые слова:** фототермическая тераностика, наностержни, плазмонный резонанс, оптическое поглощение.

DOI: 10.61011/JTF.2026.08.63373.72-26

## Введение

Онкологические заболевания остаются одной из наиболее серьезных проблем современной медицины и глобального здравоохранения. Несмотря на значительный прогресс в диагностике и лечении, рак по-прежнему является одной из ведущих причин смертности во всем мире. Согласно эпидемиологическим исследованиям, риск развития онкологических заболеваний в течение жизни чрезвычайно высок: в среднем у каждого второго человека диагностируется та или иная форма рака, а смертность от него остается одной из наиболее значительных среди всех заболеваний [1]. В связи с этим разработка новых, более эффективных и менее инвазивных методов терапии опухолей является одной из ключевых задач современной биомедицинской физики и наномедицины.

Традиционные методы лечения опухолей включают хирургическое удаление новообразований, лучевую терапию и химиотерапию. Однако каждый из этих подходов имеет существенные ограничения. Хирургическое вмешательство часто сопряжено с высоким риском повреждения окружающих тканей и не всегда применимо при локализации опухоли в труднодоступных областях. Химиотерапия сопровождается значительными системными побочными эффектами, поскольку используемые препараты воздействуют не только на опухолевые клетки, но и на здоровые ткани организма. Лучевая терапия также может приводить к повреждению окружающих тканей и имеет ограничения по допустимым дозам облучения. Эти обстоятельства стимулируют поиск альтернативных терапевтических стратегий, способных обеспечить более высокую селективность воздействия на опухолевые ткани.

Одним из перспективных направлений развития онкологических технологий является фототермическая терапия (ФТТ). Данный метод основан на использовании фототермических агентов — наноструктурированных материалов, способных эффективно поглощать электромагнитное излучение и преобразовывать его энергию в тепло [2–4]. При локальном облучении опухолевой области лазерным излучением такие наночастицы нагреваются и создают локализованное тепловое воздействие, которое приводит к разрушению опухолевых клеток. Важным преимуществом ФТТ является возможность точного пространственного контроля нагрева, что позволяет минимизировать повреждение окружающих здоровых тканей. Кроме того, многие фототермические наноструктуры могут одновременно использоваться в диагностических целях, например, для фотоакустической или оптической визуализации [5,6]. Такое совмещение терапевтических и диагностических функций получило название тераностики и рассматривается как одно из

наиболее перспективных направлений современной наномедицины.

Эффективность ФТТ во многом определяется спектральными характеристиками используемого излучения. Наиболее перспективным является применение излучения в ближнем инфракрасном диапазоне, поскольку именно в этой области спектра биологические ткани обладают наибольшей оптической прозрачностью. Особенно важным является так называемое второе ближнее инфракрасное окно (NIR-II), охватывающее диапазон длин волн приблизительно от 1000 до 1700 nm [7]. В этом диапазоне наблюдается уменьшение рассеяния и поглощения света в биологических тканях, что обеспечивает более глубокое проникновение излучения и повышает эффективность воздействия на опухоли, расположенные на значительной глубине. Поддиапазон NIR-IIa (1300 – 1400 nm) представляет особый интерес для применения в тканях головного мозга, поскольку здесь достигается оптимальное сочетание глубины проникновения, контрастности визуализации и безопасности воздействия [8–11]. Например, Сюньчжи У. и соавт. показали, что при прохождении через блок свиной мышечной ткани толщиной 2 mm лазер с длиной волны 1275 nm демонстрирует пропускание в 2.2 раза более высокое, чем лазер с длиной волны 808 nm [10].

Для реализации ФТТ в диапазоне NIR широко используются плазмонные наночастицы на основе благородных металлов. Среди них особое место занимают золотые наностержни, которые обладают выраженным локализованным поверхностным плазмонным резонансом (ЛППР). Одним из ключевых преимуществ таких наноструктур является возможность тонкой настройки спектрального положения плазмонного резонанса путем изменения их геометрических параметров, прежде всего — соотношения длины и диаметра частицы [12–14]. Благодаря этому резонанс можно смещать в ближний инфракрасный диапазон, что повышает эффективность фототермического нагрева.

Несмотря на многочисленные преимущества, применение золотых наностержней в ФТТ связано с рядом существенных ограничений. Одной из основных проблем является их фототермическая нестабильность. При интенсивном лазерном облучении золотые наностержни могут изменять свою форму вследствие плавления или реконструкции поверхности, что приводит к смещению плазмонного резонанса и снижению эффективности поглощения света [15]. Кроме того, характерное распределение электрического поля вблизи плазмонных наноструктур приводит к сильной локализации тепловыделения, что может вызывать образование областей перегрева и повышать риск повреждения здоровых тканей [12,16].

В связи с этим активно исследуются альтернативные фототермические платформы и гибридные наноструктуры, в которых плазмонные свойства благородных металлов сочетаются с функциональными характеристиками других материалов. Одним из наиболее перспективных подходов является создание наночастиц типа „ядро–оболочка“. В таких системах металлическое ядро обеспечивает сильное плазмонное поглощение, тогда как оболочка может стабилизировать структуру частицы, модифицировать ее оптические свойства и улучшать тепловые характеристики.

В последние годы значительное внимание уделяется двумерным материалам и дихалькогенидам переходных металлов, обладающим уникальными электронными и оптическими свойствами. Среди них дисульфид тантала ($TaS_2$) представляет особый интерес благодаря своему металлическому характеру проводимости, который отличает его от большинства полупроводниковых дихалькогенидов переходных металлов [17,18]. Наличие высокой плотности свободных носителей заряда обеспечивает значительное поглощение электромагнитного излучения в ближнем инфракрасном диапазоне и высокую фототермическую эффективность.

Наноструктуры на основе $TaS_2$ в последние годы активно рассматриваются как перспективные фототермические агенты для биомедицинских применений. Было показано, что двумерные наноструктуры $TaS_2$ способны эффективно преобразовывать энергию излучения в тепло и могут использоваться для комбинированной терапии и диагностики опухолевых заболеваний [19–21]. Высокая фотостабильность и устойчивость к интенсивному оптическому облучению делают этот материал особенно привлекательным для фототермических применений.

Одновременно с этим активно исследуются гибридные плазмонные структуры, в которых свойства различных материалов могут взаимно усиливаться за счет электромагнитного взаимодействия. В частности, взаимодействие плазмонных мод в системах типа „ядро–оболочка“ может приводить к гибридизации резонансных состояний и значительному изменению спектральных характеристик наноструктур. Механизм гибридизации плазмонных мод подробно описан в ряде работ и играет важную роль при анализе оптических свойств сложных наночастиц [28].

В настоящей работе предлагается и исследуется новая гибридная наноструктура типа „ядро–оболочка“, состоящая из золотого наностержня, покрытого оболочкой из дисульфида тантала (Au@$TaS_2$). Предполагается, что такая структура позволит объединить сильное плазмонное поглощение золотого ядра с высокой фототермической стабильностью и благоприятными тепловыми свойствами оболочки $TaS_2$. Кроме того, взаимодействие плазмонных мод ядра и оболочки может приводить к смещению локализованного поверхностного плазмонного резонанса в область длин волн, более подходящую для биомедицинских применений.

Целью настоящей работы является численное исследование оптических и фототермических свойств наностержней Au@$TaS_2$ и оценка их перспективности в качестве фототермических агентов для терапии и диагностики опухолей. В рамках работы проводится моделирование взаимодействия наночастиц с электромагнитным

излучением в диапазоне NIR, анализируются спектры поглощения и рассеяния, распределение электрических полей и тепловых потоков, а также эффективность фототермического преобразования энергии.

Особое внимание уделяется влиянию толщины оболочки $TaS_2$ на спектральное положение плазмонного резонанса и тепловые характеристики наноструктуры. Кроме того, проводится сравнительный анализ с другими гибридными системами на основе нитрида титана и золота, которые ранее рассматривались как перспективные фототермические платформы [12].

Таким образом, представленное исследование направлено на выявление фундаментальных закономерностей взаимодействия света с гибридными плазмонными наноструктурами и оценку их потенциала для фототермических и фотоакустических применений в глубоких тканях, включая потенциальные применения в области опухолей головного мозга.

## 1. Методика

Структура исследуемых наностержней типа ядро–оболочка показана на рис. 1. Геометрия стержня задается его длиной ($L$), диаметром ($W$), и толщиной оболочки ($t$). Для сравнения изучаемых наностержней с предложенными ранее наностержнями типа ядро–оболочка TiN-Au [12] мы используем такие же геометрические параметры, а именно длина $L = 160$ nm, ширина $W = 32$ nm и толщина оболочки $t = 5$ nm.

Наностержни помещены в однородную среду (воду, показатель преломления $n = 1.33$). На наностержни падает линейно поляризованная плоская волна, во всех численных расчетах мощность падающего излучения $10^5$ W/cm$^2$ для корректного сравнения результатов моделирования. Начальная температура среды задана равной 310 K, что продиктовано физиологическими свойствами тканей мозга, температура на границе домена расчета зафиксирована на уровне комнатной (293 K).

Дисперсии комплексных коэффициентов преломления $(n + ik)$ $TaS_2$, Au и TiN продемонстрирована на рис. 2.

Теплофизические параметры воды, золота, и TiN взяты из Luo и др. [12]. Плотность 2H-$TaS_2$ рассчитана из молярной массы [22], значения удельной теплоемкости

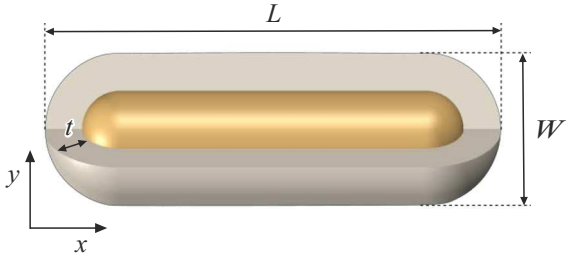


**Рис. 1.** Схема наностержня со структурой ядро–оболочка длиной $L$ и диаметром $W$ с толщиной оболочки $t$.

получены с помощью закона Дюлонга–Пти [23], теплопроводность была вычислена с помощью уравнения Видмана–Франца [24]. Все использованные в расчетах теплофизические параметры собраны в табл. 1. В исследовании рассматривается 2H-фаза дисульфида тантала, поскольку она представляет собой термодинамически стабильный при комнатной температуре политип. Электрические поля и тепловая плотность были рассчитаны численно методом конечных элементов (МКЭ) в программном пакете COMSOL Multiphysics 6.1.

Также были вычислены сечения рассеяния и поглощения структуры ($\sigma_{sct}$, $\sigma_{abs}$), затем из них получены нормированные сечения по формулам

$$NSCS = \frac{\sigma_{sct}}{\pi r^2}, \quad NACS = \frac{\sigma_{abs}}{\pi r^2}.$$

Радиус $r$, использованный для нормировки, зависит от направления падения света: в случае падения вдоль оси наностержня радиус взят равным половине диаметра $r = W/2$; в случае падения под углом к оси наностержня был использован эквивалентный радиус $r_e$:

$$r_e = \sqrt[3]{\frac{(3L - W)W^2}{16}}.$$

Хотя повышение температуры отдельной наночастицы не зависит от ее сечения рассеяния, в случае ансамбля из множества частиц, характерном для ФТТ, ситуация иная. В этом случае свет, рассеиваемый отдельными наночастицами, представляет собой механизм потерь, уменьшающий поток фотонов, доступных для поглощения соседними частицами. Следовательно, сильное рассеяние на уровне отдельной частицы — т. е. низкое отношение поглощения к экстинкции — может снижать общее поглощение света ансамблем наночастиц. Это уменьшение коллективного поглощения, в свою очередь, приводит к меньшему повышению температуры в целевой раковой ткани. Поэтому в данном исследовании отношение поглощения к экстинкции использовалось в качестве косвенной оценки эффективности фототермической конверсии (ФТК) [25–27], учитывающей возможную роль рассеяния в режиме множества частиц

$$\eta = \frac{\sigma_{abs}}{\sigma_{sct} + \sigma_{abs}}.$$

При облучении стержня светом с длиной волны $\sigma_{abs}$, соответствующей максимуму поглощения, он выделяет тепло; установившаяся равновесная и усредненная по объему частицы температура $\overline{T}$ рассчитана с помощью CST Microwave Studio 2021.

## 2. Результаты и обсуждение

Сначала мы изучим оптические и фототермические свойства рассредоточенных в водной среде стержней типа ядро–оболочка Au@$TaS_2$, на которые падает линейно поляризованная вдоль оси $x$ и распространяющаяся

**Таблица 1.** Теплофизические параметры

| Материал | Удельная теплоемкость, J/(kg·K) | Плотность, kg/m$^3$ | Коэффициент теплопроводности, W/(m·K) |
|---|---|---|---|
| 2H-TaS$_2$ | 305 | 7073 | 7.8 |
| Au | 129 | 19320 | 317.0 |
| Вода | 4184 | 1000 | 0.6 |
| TiN | 719 | 5240 | 19.2 |

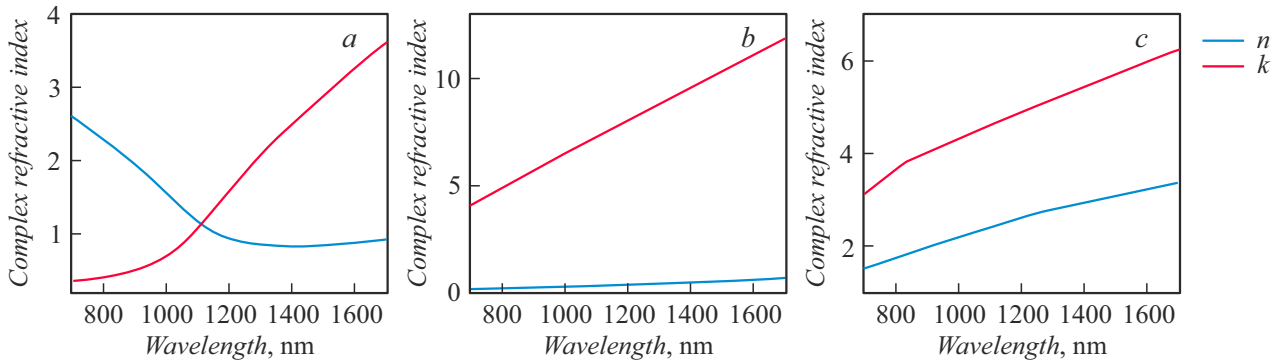


**Рис. 2.** Дисперсия показателя преломления: *a* — TaS$_2$, *b* — золота, *c* — TiN.

вдоль оси *z* плоская волна. Наиболее значимый результат добавления оболочки из TaS$_2$ — это существенное красное смещение длины волны ЛППР. Из рис. 3, *a*, *b* видно, что по мере увеличения толщины оболочки от 0 до 5 nm, резонансная длина волны ЛППР смещается от 1040 к 1375 nm глубоко внутрь NIR-IIa диапазона, наиболее предпочтительного для ФТТ опухолей тканей мозга. Кроме того, как видно на рис. 3, *c*, добавление оболочки существенно увеличивает значение используемой в работе косвенной оценки эффективности фототермической конверсии: от 0.46 в отсутствие оболочки до 0.86 при толщине оболочки 5 nm, что соответствует росту на 87 % при умеренном уменьшении поглощения ($\sim$ 17 %). Такое изменение связано с тем, что с увеличением толщины оболочки сечение рассеяния уменьшается быстрее, чем сечение поглощения; вследствие этого возрастает доля экстинкции, приходящаяся на поглощение. Красное смещение происходит из-за гибридизации плазмонных мод золотого ядра и оболочки из TaS$_2$ [28], что не только смещает резонанс, но и стабилизирует оптический отклик системы. Увеличение толщины оболочки также уменьшает среднюю температуру частицы с 560 до 525 K, как показано на рис. 3, *d*.

Уменьшение температуры вызвано уменьшением поглощения и относительно малой теплопроводностью TaS$_2$. Основные оптические и фототермические параметры системы на резонансной длине волны $\lambda_{abs}$ приведены в табл. 2.

На рис. 4 показаны распределения интенсивностей электрических полей |E| и порожденные ими объемные плотности тепловых потоков *q* для чисто золотого наностержня и для наностержня типа ядро–оболочка Au@TaS$_2$. Как видно на рис. 4, *a*, электрическое поле чисто золотого наностержня локализуется на краях частицы вне ее объема, что характерно для продольной дипольной плазмонной моды. При добавлении тонкой оболочки из дисульфида тантала максимумы интенсивности сдвигаются к краям сердцевины при более слабой локализации в оболочке, а интенсивность поля в целом уменьшается. В распределении теплового потока, показанном на рис. 4, *c*, *d*, видны максимумы выделения тепла, совпадающие с максимальной локализацией поля внутри частицы, что подтверждает преобладание механизма Джоуля–Ленца в нагревании частицы. В случае чисто золотого наностержня объемный тепловой поток локализован в центре длины стержня, ближе к его поверхности. В случае с Au@TaS$_2$, напротив, тепловой поток максимален на краях стержня внутри оболочки, увеличиваясь ближе к ее внутренней границе, создавая более распределенное, но все еще неоднородное распределение тепла. При реальных практических применениях излучение может падать на наностержни под произвольными углами. Для оценки эффективности наностержней при реалистичных углах освещения мы рассчитали спектры поглощения при разных углах падения излучения: в дополнение к случаю волны, поляризованной вдоль оси *x* и налетающей вдоль оси стержня, мы промоделировали отклик системы при поляризованной вдоль оси *y* и распространяющейся вдоль оси *x* волне.

Результат расчета показан на рис. 5. В отличие от продольной дипольной моды остальные плазмонные моды не так чувствительны к отношению сторон части-

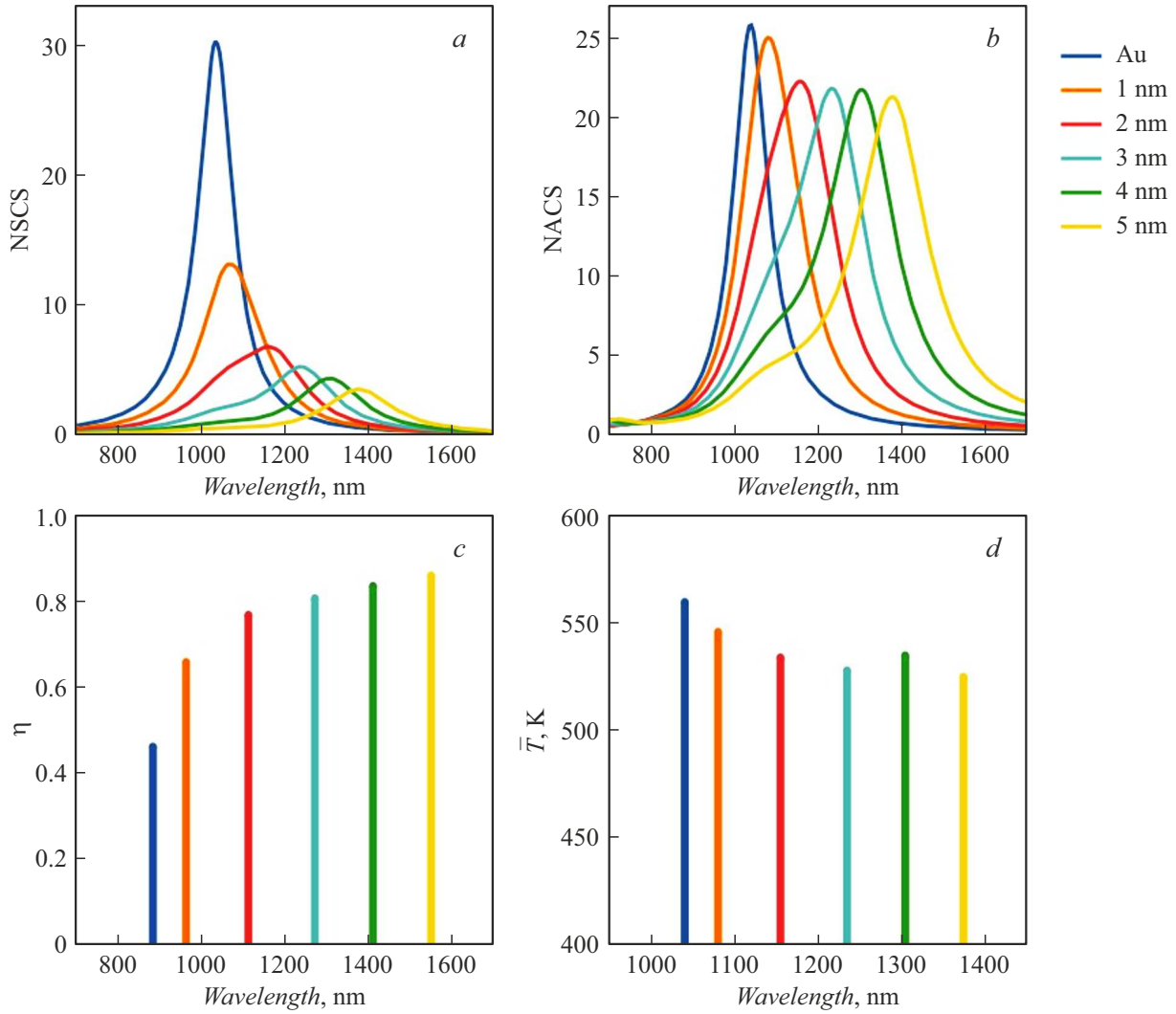


**Рис. 3.** Оптические и фототермические свойства наностержней типа ядро–оболочка Au@$TaS_2$ ($L = 160$ nm, $W = 32$ nm) в зависимости от толщины оболочки (0–5 nm) при падении линейно поляризованной вдоль оси $x$ и распространяющейся вдоль оси $y$ электромагнитной волны: $a$ — сечение рассеяния, $b$ — сечение поглощения, $c$ — величина $\eta = \sigma_{abs}/(\sigma_{sct} + \sigma_{abs})$ в резонансе, $d$ — усредненная равновесная температура $\overline{T}$.

**Таблица 2.** Основные оптические и фототермические параметры наностержней типа ядро–оболочка Au@$TaS_2$ ($L = 160$ nm, $W = 32$ nm) в зависимости от толщины оболочки при длине волны падающей волны $\lambda_{abs}$, соответствующей максимальному поглощению

| Толщина оболочки (nm) | $\lambda_{abs}$ (nm) | NSCS | NACS | $\eta$ | $\overline{T}$ (K) | $\overline{T}$/NACS (K) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 1040 | 29.0 | 24.8 | 0.46 | 560 | 22.6 |
| 1 | 1080 | 12.5 | 24.1 | 0.66 | 546 | 22.7 |
| 2 | 1155 | 6.5 | 21.4 | 0.77 | 534 | 25 |
| 3 | 1235 | 5.0 | 21.0 | 0.81 | 528 | 25.1 |
| 4 | 1305 | 4.2 | 20.9 | 0.83 | 535 | 25.6 |
| 5 | 1375 | 3.4 | 20.5 | 0.86 | 525 | 25.6 |

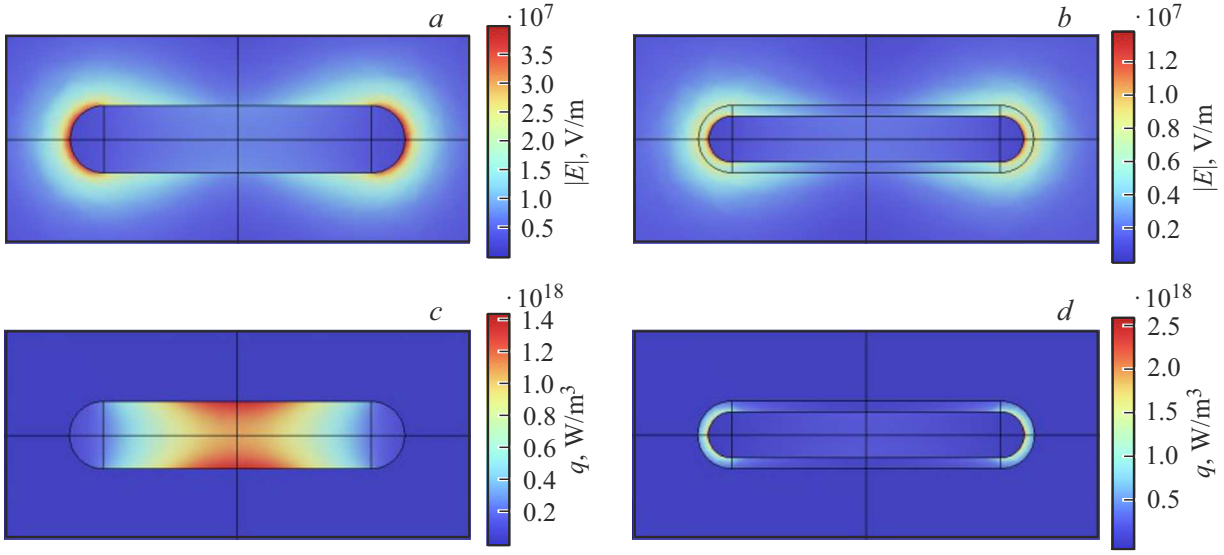


**Рис. 4.** Распределение интенсивности электрического поля в разрезе частицы в плоскости $xOy$ в максимуме поглощения $\lambda_{abs}$ в случае: *a* — чисто золотого наностержня, *b* — Au@TaS$_2$. Плотность объемного теплового потока для: *c* — чисто золотого наностержня, *d* — Au@TaS$_2$.

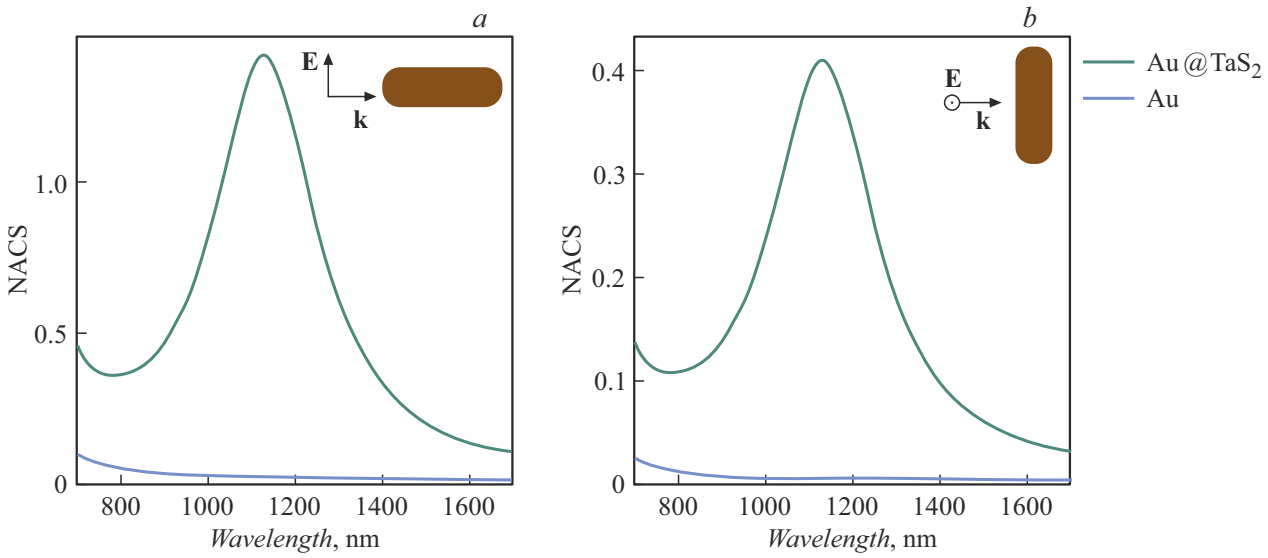


**Рис. 5.** Сечение поглощения для чисто золотых (темно-синяя линия) и Au@TaS$^2$ наностержней ($L = 160$ nm, $W = 32$ nm) с толщиной оболочки из 5 nm при освещении: *a* — вдоль оси наностержня, *b* — перпендикулярно к оси наностержня.

цы, из чего следует, что их резонансные длины волн $\lambda_{abs}$ не сильно отличаются от резонансных длин волн сферы. Важно, что даже сферические частицы Au@TaS$_2$ заметно поглощают в NIR-II диапазоне, что в среднем увеличивает поглощение остальных (не продольных) мод и, следовательно, величину $\eta$, в случае разных направлений освещения частицы.

Чтобы сравнить эффективность стержней типа ядро–оболочка Au@TaS$_2$, мы рассчитали свойства аналогичных фототермических устройств типа ядро–оболочка с теми же геометрическими параметрами ($L = 160$ nm, $W = 32$ nm, толщина оболочки $t = 5$ nm). Сечения рассеяния и поглощения, оценка ФТК и равновесная температура были вычислены при освещении на длине волны, соответствующей максимальному поглощению, $\lambda_{abs}$. Результаты приведены на рис. 6 и в табл. 3. Из трех структур исследуемые наностержни Au@TaS$_2$ показывают наиболее сильное поглощение: его сечение поглощения на 36 % выше, чем у TiN@Au, и на 64 % выше, чем у Au@TiN. Также крайне важно, что пик поглощения попадает в NIR-IIa диапазон, подходящий для применений в глубоких тканях и в мозге. При этом, несмотря на разницу в сечениях поглощения, все три структуры демонстрируют близкие значения

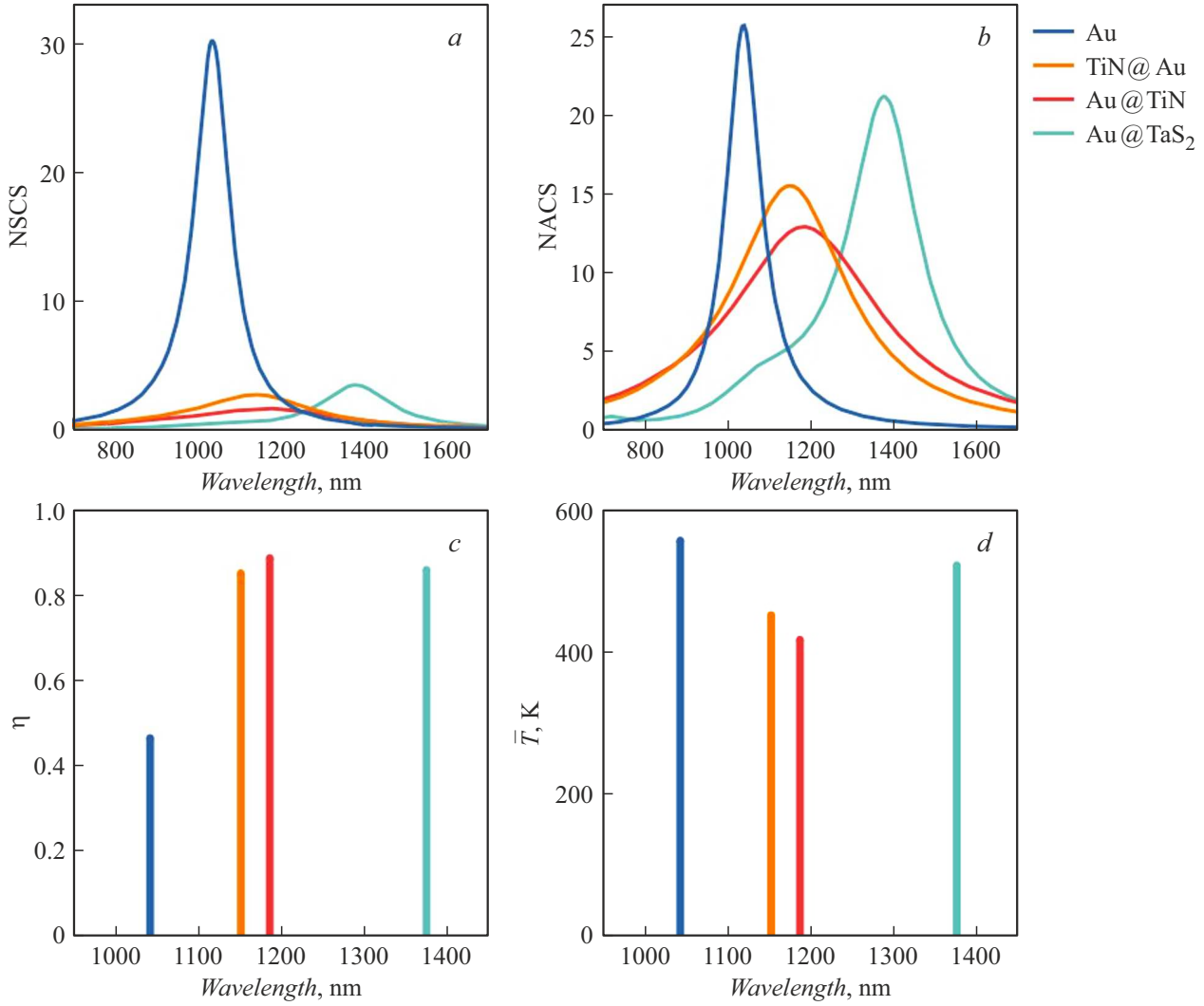


**Рис. 6.** Оптические и фототермические свойства чисто золотых наностержней и наностержней типа ядро–оболочка TiN@Au, Au@TiN и Au@$TaS_2$ ($L = 160$ nm, $W = 32$ nm, $t = 5$ nm) при освещении поляризованной вдоль $x$ и распространяющейся вдоль $z$ волной: $a$ — сечение рассеяния; $b$ — сечение поглощения; $c$ — косвенная оценка ФТК при освещении на длине волны $\sigma_{abs}$; $d$ — средняя равновесная температура.

**Таблица 3.** Основные оптические и фототермические показатели структур с геометрическими параметрами $L = 160$ nm, $W = 32$ nm и $t = 5$ nm в из пиках поглощения ($\lambda_{abs}$)

| Структура | $\lambda_{abs}$ (nm) | NSCS | NACS | $\eta$ | $\overline{T}$ (K) | $\overline{T}$/NACS (K) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Au@$TaS_2$ | 1375 | 3.4 | 20.5 | 0.86 | 525 | 25.6 |
| Au@TiN | 1185 | 1.6 | 12.5 | 0.89 | 419 | 33.5 |
| TiN@Au | 1150 | 2.6 | 15.0 | 0.85 | 454 | 30.3 |
| Au | 1040 | 29.0 | 24.8 | 0.46 | 560 | 22.6 |

используемой в работе метрики эффективности ФТК ($\eta = 0.85–0.89$).

Равновесные средние температуры образцов тем не менее различаются: температура наностержней Au@$TaS_2$ достигает 525 K, что выше, чем у других двух образцов, температура структуры TiN@Au, наоборот, наименьшая — 419 K. Хотя сильное оптическое поглощение полезно для ФТТ, поскольку поглощенный свет в конечном итоге преобразуется в тепло, чрезмерное повышение температуры на уровне наночастиц может

привести к нежелательному повреждению окружающих здоровых тканей. Для корректного сравнения теплового отклика частиц при различном уровне поглощения мы используем величину $\overline{T}$/NACS, т. е. равновесную температуру, нормированную на нормированное сечение поглощения. Согласно этой метрике, Au@TaS$_2$ демонстрирует самую низкую нормированную температуру (26 K) среди структур типа ядро–оболочка, уступая только эталонному образцу чистого AuNR (23 K). Напротив, гибридные структуры на основе TiN показывают более высокие значения: 30 K для Au@TiN и 34 K для TiN@Au. Это указывает на то, что при одинаковом количестве поглощенного света Au@TaS$_2$ демонстрирует меньший температурный отклик и имеет меньший риск локального перегрева по сравнению с гибридными наностержнями TiN-Au.

В совокупности из вышесказанного вытекает, что тонкая оболочка из TaS$_2$ (около 5 nm) придает фототермическим устройствам свойства (оптические и температурные), наиболее подходящие для фототермической тераностики: (1) — ЛППР смещается в подходящий для использования в тканях мозга NIR-IIa диапазон, (2) — возрастает доля поглощения в экстинкции, используемая в работе как косвенная оценка эффективности ФТК, (3) — умеренное падение поглощения и (4) — более распределенное и безопасное тепловыделение. В сравнении с другими аналогичными системами, основанными на TiN, наностержни Au@TaS$_2$ характеризуются более высоким значением метрики оценки эффективности ФТК $\eta$, а их пик поглощения находится в более предпочтительной части спектра, что делает Au@TaS$_2$ перспективной платформой для ФТТ и фотоакустической диагностики опухолей мозга. В дальнейшем результаты моделирования, изложенные в настоящей работе, будут проверяться экспериментальными измерениями оптического отклика и нагрева в близких к реальным физиологическим условиях, а *in-vitro* и *in-vivo* исследования определят фотостабильность, безопасность и биосовместимость таких структур.

## Заключение

В работе предложены и численно промоделированы наностержни Au@TaS$_2$ типа ядро–оболочка как перспективная платформа для плазмонной фототермической тераностики в диапазоне NIR-IIa. Применение тонкой ($\sim 5$ nm) оболочки TaS$_2$ приводит к красному смещению продольного ЛППР в предпочтительный для ФТТ диапазон NIR-IIa ($\approx 1.38\,\mu$m), увеличению используемой в работе косвенной оценки эффективности ФТК с 0.46 до 0.86 (относительное повышение $\approx 87\,\%$) при лишь умеренном снижении поглощения ($\sim 17\,\%$).

Оболочка TaS$_2$ также ослабляет и пространственно расширяет области максимальной локализации электрического поля, формируя более равномерный профиль тепловыделения, что снижает риск локального перегрева и сопутствующего повреждения окружающих тканей.

По сравнению с недавно предложенными гибридными структурами TiN-Au наностержни Au@TaS$_2$ демонстрируют существенно более высокое оптическое поглощение и наименьший нормированный прирост равновесной средней температуры ($\overline{T}$/NACS $\approx 26$ K), что свидетельствует о более благоприятном и безопасном для окружающих тканей температурном отклике при фиксированной поглощенной мощности. В совокупности данные свойства — резонанс поглощения в диапазоне NIR-IIa, высокая фототермическая эффективность, повышенная фотостабильность и более безопасное тепловое поведение — делают наностержни Au@TaS$_2$ перспективным кандидатом для фототермических и фотоакустических применений в глубоких тканях, включая потенциальные применения в области опухолей мозга.

Следующими этапами должны стать экспериментальный синтез однородных наностержней Au@TaS$_2$, всесторонняя оптическая и фототермическая характеризация в биологически релевантных условиях, а также систематические исследования биосовместимости и терапевтической эффективности (*in-vitro* и *in-vivo*) с дозиметрией, оценкой биораспределения и долговременной стабильности.

Эти исследования позволят определить практический потенциал Au@TaS$_2$ для клинически ориентированной плазмонной фототермической тераностики.

### Финансирование работы

Исследование оптического отклика и температурных свойств наностержней выполнено при поддержке гранта РНФ (проект № 25-79-10108), численная валидация оптических свойств наночастиц выполнена при поддержке гранта РНФ (проект № 24-72-00028).

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

[1] A.S. Ahmad, N. Ormiston-Smith, P.D. Sasieni. Br. J. Cancer, **112** (5), 943 (2015).
[2] X. Huang, P.K. Jain, I.H. El-Sayed, M.A. El-Sayed. Lasers Med. Sci., **23** (3), 217 (2008).
[3] S. Sharma, S. Batra, M.K. Chauhan, V. Kumar. *Photothermal therapy for cancer treatment. Biological and Medical Physics, Biomedical Engineering. Singapore* (Springer Nature, Singapore, 2023), p. 755–780.
[4] F. Hong, X. Geng, G. Min, X. Sun, B. Zhang, Y. Yao, R. Li, J. Wang, H. Zhao, P. Guo, Zh. Yuan, X. Wen, L. Nie, G. Liu, X. Chen, Q. Zhao. Chem. Eng. J., **449**, 137846 (2022).
[5] X. Yang, E.W. Stein, S. Ashkenazi, L.V. Wang. Wiley Interdiscip. Rev. Nanomed. Nanobiotechnol., **1** (3), 360 (2009).
[6] W. Li, X. Chen. Nanomedicine (Lond), **10** (3), 299 (2015).

[7] G. Hong, A.L. Antaris, H. Dai. Nat. Biomed. Eng., **1**, 0010 (2017).
[8] G. Hong, Sh. Diao, J. Chang, A.L. Antaris, Ch. Chen, B. Zhang, S. Zhao, D.N. Atochin, P.L. Huang, K.I. Andreasson, C.J. Kuo, H. Dai. Nat. Photon., **8** (9), 723 (2014).
[9] S. He, J. Song, J. Qu, Z. Cheng. Chem. Soc. Rev., **47** (12), 4258 (2018).
[10] X. Wu, Y. Suo, H. Shi, R. Liu, F. Wu, T. Wang, L. Ma, H. Liu, Zh. Cheng. Nanomicro Lett., **12** (1), 38 (2020).
[11] H. Liu, X. Wang, Ya. Huang, H. Li, Ch. Peng, H. Yang, J. Li, H. Hong, Zh. Lei, X. Zhang, Z. Li. ACS Appl. Mater. Interfaces, **11** (33), 30511 (2019).
[12] Q. Luo, Y. Liu, N. Chen, X. Wu. Intern. J. Thermal Sci., **204**, 109242 (2024).
[13] A. Abdulkareem Ghassan, N.-A. Mijan, Y. Hin Taufiq-Yap. *Nanomaterials: An overview of nanorods synthesis and optimization, in Nanorods and Nanocomposites*. IntechOpen (2020).
[14] H. Chen, L. Shao, Q. Li, J. Wang. Chem. Soc. Rev., **42** (7), 2679 (2013).
[15] R. Weissleder. Nat. Biotechnol., **19** (4), 316 (2001).
[16] Q. Jiang, X. Li, C. Yin. Materials (Basel), **14** (9), 2407 (2021). DOI: 10.3390/ma14092407
[17] M.N. Gjerding, R. Petersen, T.G. Pedersen, N.A. Mortensen, K.S. Thygesen. Nat. Commun., **8**, 320 (2017).
[18] M.N. Gjerding, M. Pandey, K.S. Thygesen. Nat. Commun., **8**, 15133 (2017).
[19] Y. Liu, X. Ji, J. Liu, W.W.L. Tong, D. Askhatova, J. Shi. Adv. Funct. Mater., **27** (39), 1703261 (2017). DOI: 10.1002/adfm.201703261
[20] A. Eghbali, N.V. Pak, A.V. Arsenin, V. Volkov, A.A. Vyshnevyy. Nanomaterials (Basel), **15** (12), 942 (2025). DOI: 10.3390/nano15120942
[21] L. Gong, L. Yan, R. Zhou, J. Xie, W. Wu, Z. Gu. J. Mater. Chem. B, **5** (10), 1873 (2017).
[22] A. Meetsma, G.A. Wiegers, R.J. Haange, J.L. de Boer. Acta Crystallogr. C, **46** (9), 1598 (1990).
[23] M.T. Agne, K. Imasato, Sh. Anand, K. Lee, S.K. Bux, A. Zevalkink, A.J.E. Rettie, D.Y. Chung, M.G. Kanatzidis, G.J. Snyder. Mater. Today Phys., **6**, 83 (2018).
[24] Y. Zhang, Z. Tong, A. Pecchia, C. Yam, T. Dumitrică, T. Frauenheim. Nanoscale, **14** (35), 13053 (2022).
[25] Y. Ren, Q. Chen, H. Qi, L. Ruan. Nanomaterials (Basel), **7** (12), 416 (2017). DOI: 10.3390/nano7120416
[26] M. Salimi, S. Mosca, B. Gardner, F. Palombo, P. Matousek, N. Stone. Nanomaterials (Basel), **12** (6), 922 (2022). DOI: 10.3390/nano12060922
[27] H. Chen, L. Shao, T. Ming, Z. Sun, C. Zhao, C.B. Yang, J. Wang. Small, **6** (20), 2272 (2010).
[28] E. Prodan, P. Nordlander. J. Chem. Phys., **120** (12), 5444 (2004).