

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ

**САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ**



ПОБЕДИТЕЛЬ КОНКУРСА ИННОВАЦИОННЫХ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ПРОГРАММ ВУЗОВ

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК

Выпуск 37

**СОВРЕМЕННАЯ ФИЗИКА
Труды молодых ученых**



**САНКТ-ПЕТЕРБУРГ
2007**

Выпуск содержит материалы **IV межвузовской конференции молодых ученых.**, организованной 10–13 апреля 2007 года Санкт-Петербургским государственным университетом информационных технологий, механики и оптики в сотрудничестве с Балтийским государственным техническим университетом «Военмех»

Башкирским государственным университетом

Белорусским государственным педагогическим университетом им. Максима Танка

Белорусским государственным технологическим университетом

Белорусским государственным университетом информатики и радиоэлектроники

Дальневосточным государственным университетом

Дальневосточной академией государственной службы

Институтом аналитического приборостроения Российской Академии Наук (РАН)

Институтом Солнечно-Земной Физики СО РАН

Институтом химии высокочистых веществ РАН (г. Нижний Новгород)

Казанским государственным техническим университетом им. А.Н. Туполева

Казанским государственным университетом

Карельским государственным педагогическим университетом

Костромским государственным технологическим университетом

Красноярским государственным техническим университетом

Ленинградским государственным университетом им. А.С. Пушкина

Магнитогорским государственным техническим университетом им. Г.И. Носова

Морской государственной академией им. адмирала Ф.Ф. Ушакова

Московским государственным институтом электронной техники (техническим университетом)

Московским государственным техническим университетом им. Н.Э. Баумана

Московским педагогическим государственным университетом

Муромским институтом Владимирского государственного университета

Петербургским государственным университетом путей сообщения

Пятигорским государственным лингвистическим университетом

Российским государственным гидрометеорологическим университетом

Самарским государственным архитектурно-строительным университетом

Санкт-Петербургским государственным горным институтом им. Г.В. Плеханова (техническим университетом)

Санкт-Петербургским государственным инженерно-экономическим университетом (ИНЖЭКОН)

Санкт-Петербургским государственным политехническим университетом

Санкт-Петербургским государственным университетом

Санкт-Петербургским государственным университетом аэрокосмического приборостроения

Санкт-Петербургским институтом машиностроения (ЛМЗ-ВТУЗ)

Санкт-Петербургским университетом кино и телевидения

Санкт-Петербургской государственной академией физической культуры им. П.Ф. Лесгафта

Санкт-Петербургской государственной педиатрической медицинской академией

Северо-Западной академией государственной службы

Северо-Осетинским государственным университетом им. К.Л. Хетагурова

Тамбовским государственным университетом им. Г.Р. Державина

Татарским государственным гуманитарно-педагогическим университетом

Университетом Aix-Marseille II (Франция)

Университетом Прованса (Франция)

ФГУП "ЦНИИ им. академика А.Н. Крылова"

Энгельским технологическим институтом Саратовского государственного технического университета

В выпуске представлены работы, поддержанные финансированием в рамках:

- инновационной образовательной программы «Инновационная система подготовки специалистов нового поколения в области информационных и оптических технологий» вузов России на 2007–2008 гг.
- аналитической ведомственной целевой программы «Развитие научного потенциала высшей школы (2006–2008 гг.)» (Федеральное агентство по образованию);
- Федеральной целевой программы развития образования на 2006–2010 гг. (Федеральное агентство по образованию);
- Федеральной целевой программы развития научно-технологического комплекса России на 2007–2012 гг. (Федеральное агентство по науке и инновациям);
- Российского фонда фундаментальных исследований, а также инициативные разработки.

ПРОГРАММНЫЙ КОМИТЕТ КОНФЕРЕНЦИИ

Председатель – ректор СПбГУ ИТМО, д.т.н., профессор **В.Н. Васильев**

Сопредседатели – проректор по развитию, д.т.н., профессор **В.О. Никифоров**,
проректор по УО и АР, д.ф.-м.н., профессор **Ю.Л. Колесников**,
проректор по УМР, к.т.н., профессор **А.А. Шехонин**,
декан факультета ППО, д.т.н., профессор **В.Л. Ткалич**

Члены программного комитета – д.т.н., профессор **Ю.А. Гатчин**, д.т.н., профессор **В.М. Мусалимов**, д.т.н., профессор **С.Б. Смирнов**, д.т.н., профессор **С.К. Стафеев**, д.т.н., профессор **В.А. Тарлыков**, д.т.н., профессор **Е.Б. Яковлев**, к.т.н., доцент **Т.В. Точилина**, директор инновационно-технологического центра **Ю.В. Цыпкин**

ОРГАНИЗАЦИОННЫЙ КОМИТЕТ КОНФЕРЕНЦИИ

Председатель – начальник НИЧ **Л.М. Студеникин**

Зам. председателя – к.т.н., доцент **Т.В. Точилина**, научный сотрудник **Е.Ю. Ютанова**

Члены организационного комитета – **П.А. Борисов**, **Н.Н. Валентик**, **О.В. Елисеев**, **И.Н. Жданов**, **С.Ю. Кerpелева**, **Н.В. Когай**, **А.В. Козаченко**, **Д.В. Лукичѳв**, **Л.В. Можжухина**, **Н.Б. Нечаева**, **М.В. Никитина**, **А.В. Черныш**



В 2007 году СПбГУ ИТМО стал победителем конкурса инновационных образовательных программ вузов России на 2007–2008 годы. Реализация инновационной образовательной программы «Инновационная система подготовки специалистов нового поколения в области информационных и оптических технологий» позволит выйти на качественно новый уровень подготовки выпускников и удовлетворить возрастающий спрос на специалистов в информационной, оптической и других высокотехнологичных отраслях экономики.

ISSN 1819-222X

© Санкт-Петербургский государственный университет
информационных технологий, механики и оптики, 2007

АНАЛИЗ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫХ СИГНАЛОВ МАЛОЙ КОГЕРЕНТНОСТИ НА ОСНОВЕ МОДЕЛЕЙ ЛИНЕЙНОЙ И НЕЛИНЕЙНОЙ СТОХАСТИЧЕСКОЙ ФИЛЬТРАЦИИ

М.А. Волынский, А.С. Захаров

Научный руководитель – д.т.н., профессор И.П. Гуров

Предложены модель многослойной среды и модели интерференционных сигналов малой когерентности. Представлены результаты восстановления параметров интерференционных сигналов с использованием линейной и нелинейной дискретной фильтрации Калмана. Приведены характерные численные значения погрешностей оценки параметров сигналов.

Введение

Бесконтактный анализ внутренней микроструктуры неоднородных сред необходим для биомедицинских приложений, при исследовании свойств материалов и в других задачах. Весьма высокие требования предъявляются к точности и быстродействию методов восстановления структуры среды. Как известно, самыми точными из оптических являются интерференционные методы. Интерференционные сигналы малой когерентности [1–4] в системах оптической когерентной томографии (ОКТ) [1, 5] содержат информацию о свойствах исследуемых сред.

Быстродействие и устойчивость к шумам методов ОКТ во многом определяются математическими моделями и алгоритмами обработки сигналов, получаемых на выходе интерферометра. Известные методы, основанные, например, на преобразовании Фурье [1], не всегда устойчивы к шумам, а их разрешающая способность сопоставима с классическими ограничениями, накладываемыми критерием Рэля [3, 6]. Необходимость больших вычислительных ресурсов для реализации этих методов снижает быстродействие [7].

В настоящее время широкое распространение получила адаптивная рекурсивная фильтрация, при которой коррекция предыдущих оценок происходит в зависимости от новой информации, поступающей на вход фильтра.

При обработке стохастических сигналов особый интерес представляет алгоритм фильтрации Калмана-Бьюси [8–10], который можно применять для обработки интерференционных сигналов и изображений [11].

В настоящей работе представлены результаты анализа интерференционных сигналов малой когерентности с использованием дискретной фильтрации Калмана.

Модели интерференционных сигналов при анализе характеристик многослойных сред

Каждая точка среды характеризуется координатой по глубине слоя и координатой в боковом направлении. Для каждой точки среды было проведено моделирование интерференционного сигнала, получаемого в соответствующей точке плоскости наблюдения при изменении положения опорного отражателя. Этот сигнал описывается формулой

$$s(x, z) = s_0(x, z) + s_m(x, z) \cos(\Phi(z) + \delta\varphi(z)) + n(x, z), \quad (1)$$

где s_0 – фоновая составляющая сигнала; $s_m(x, z)$ – огибающая; z – координата по высоте слоя; $\Phi(z)$ – фаза сигнала; $\delta\varphi(z)$ – флуктуации фазы, распределенные по равновероятному закону, вызванные движением опорного отражателя в интерферометре с частично когерентным освещением; $n(x, z)$ – случайный белый гауссовский шум наблюдения [12]. Фаза сигнала равна

$$\Phi(z) = 2\pi f_0 z + \varphi,$$

где f_0 – несущая частота, которой соответствует центральная длина волны $\langle \lambda \rangle = c / f_0$, φ – начальная фаза сигнала.

В случае многослойной среды огибающую сигнала (1) можно определить в виде суммы гауссовских кривых

$$s_m(x, z) = \sum_i A_i \exp \left[-\frac{(z - z_i(x))^2}{\sigma^2} \right], \quad (2)$$

представляющих отдельные слои среды. В выражении (2) A_i – постоянные, σ – параметр, зависящий от свойств источника излучения и имеющий смысл длины когерентности [2–3, 6], $z_i(x)$ – координата по глубине i -ого слоя. Коэффициенты A_i учитывают эффекты, связанные с отражением от исследуемого слоя и от предыдущих слоев, а также поглощение между слоями.

При дискретном перемещении опорного отражателя сигнал (1) принимает вид

$$s(x, k) = s_0 + s_m(x, k) \cos(2\pi f k \Delta z + \varphi + \delta\varphi(k)) + n(x, k),$$

где Δz – шаг смещения опорного отражателя, k – номер дискретного отсчета сигнала, амплитуда сигнала

$$s_m(x, k) = \sum_i A_i \exp \left[-\frac{(k\Delta z - z_i(x))^2}{\sigma^2} \right]. \quad (3)$$

Можно показать, что информацию о границах слоев $z_i(x)$ можно получать из данных о положении максимумов огибающей. При достаточном удалении максимумов друг от друга производная амплитуды каждого сигнала по $z(x)$ равна

$$\frac{\partial s_m(x, k)}{\partial z(x)} = \frac{2A}{\sigma^2} (k\Delta z - z(x)) \exp \left[-\frac{(k\Delta z - z(x))^2}{\sigma^2} \right], \quad (4)$$

откуда

$$z = k_{\max} \Delta z,$$

где k_{\max} – точка, в которой функция $s_m(x, k)$ имеет максимум (в общем случае экстремум), т.е. производная (4) равна нулю.

При случайном отклонении параметров сигналов целесообразно использовать дискретную фильтрацию Калмана.

Метод дискретной фильтрации Калмана

Линейный фильтр Калмана определяется векторным уравнением наблюдения

$$\mathbf{s}(k) = \mathbf{C}(k)\boldsymbol{\theta}(k) + \mathbf{n}(k), \quad (5)$$

и уравнением системы

$$\boldsymbol{\theta}(k+1) = \mathbf{B}(k+1)\boldsymbol{\theta}(k) + \mathbf{w}(k). \quad (6)$$

В уравнениях (5) и (6) $\mathbf{s}(k)$ – векторная последовательность регистрируемых дискретных значений сигнала, $\mathbf{C}(k)$ – матрица измерений, $\boldsymbol{\theta}(k)$ – вектор параметров, $\mathbf{n}(k)$ – шум наблюдения, $\mathbf{B}(k)$ – матрица перехода, $\mathbf{w}(k)$ – шум системы, $k = 1, \dots, K$ – номер отсчета дискретного сигнала.

Нелинейный фильтр предназначен для динамического оценивания параметров, нелинейно связанных со значением сигнала. Такой фильтр определяется уравнением наблюдения

$$\mathbf{s}(k)=\mathbf{h}(\boldsymbol{\theta}(k))+\mathbf{n}(k), \quad (7)$$

и уравнением системы

$$\boldsymbol{\theta}(k+1)=\boldsymbol{\theta}(k)+\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}(k))\Delta x+\mathbf{w}(k). \quad (8)$$

В уравнениях (7) и (8) $\mathbf{h}(\boldsymbol{\theta}(k))$ и $\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}(k))$ – известные нелинейные векторные функции, Δx – шаг дискретизации. Если удастся найти решение уравнения $\boldsymbol{\theta}(k+1)=\boldsymbol{\theta}(k)+\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}(k))\Delta x$ и использовать это решение $\boldsymbol{\theta}_{pr}(k)$ как оценку вектора параметров, то задача сводится к линейной фильтрации.

Подробно линейная и нелинейная дискретная фильтрация Калмана описана в [13]. В работе [2] показано, что дискретная фильтрация Калмана для случая гауссовских некоррелированных шумов обеспечивает оптимальную оценку параметров сигнала в линейном случае и асимптотически оптимальную – в нелинейном.

Ниже представлены результаты обработки интерференционных сигналов с использованием линейной и нелинейной фильтрации Калмана.

Результаты обработки сигналов

Рассмотрим случай, когда предметная волна почти не проникает внутрь среды, т.е. на вход фильтра подаются сигналы с одним истинным максимумом.

На рис. 1 представлен пример сигнала с одним максимумом. При моделировании использовались следующие характеристики: центральная длина волны 0,8 мкм, шаг смещения опорного отражателя $\Delta z = 0,016$ мкм, длина когерентности излучения источника 6 мкм, флуктуации фазы, распределенные по равновероятному закону, от 0 до 0,5 рад, максимум огибающей находится в точке 32 мкм.

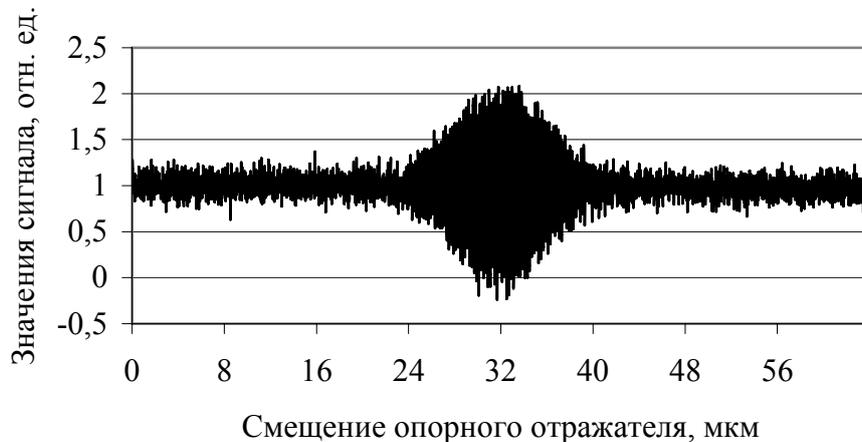
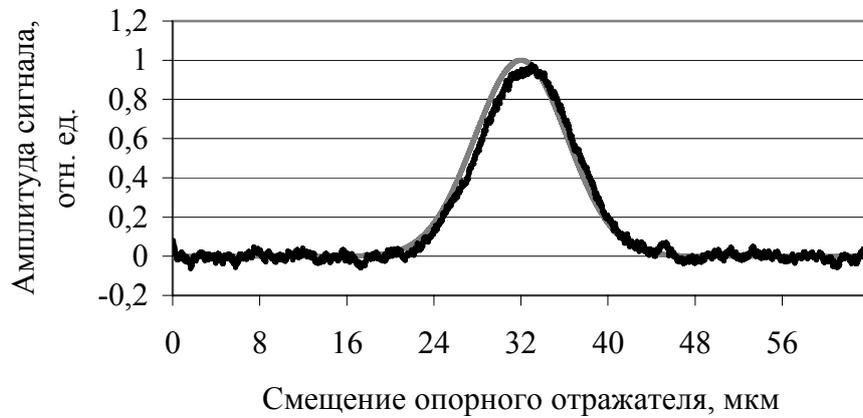


Рис. 1. Зашумленный сигнал с одним максимумом

На рис. 2, а, б представлены оценки огибающей сигнала рис. 1, полученные с помощью линейной фильтрации (5), (6) и нелинейной фильтрации Калмана (7), (8), соответственно. Среднее квадратическое отклонение (СКО) оценки амплитуды от истинного значения, вычисленное для каждой точки и усредненное по всему сигналу, составило 3,9 % и 2,9 % для линейной и нелинейной фильтрации, соответственно. СКО при восстановлении рельефа составило 0,8 мкм при диапазоне отклонения поверхности 88 мкм (одинаково для обоих методов).

Видно, что из-за присутствия флуктуаций фазы ошибка линейного фильтра больше, чем нелинейного, однако на точность восстановления положения максимума фазовые отклонения практически не влияют.

Следует отметить, что в задаче восстановления рельефа необходим поиск максимумов оценки амплитуды, т.е. дополнительные действия над данными, получаемыми на выходе фильтра. С этой точки зрения предпочтительно непосредственное восстановление координаты максимума $z_i(x)$ в (3), однако в рамках линейной задачи это невозможно.



а) Линейная фильтрация



б) Нелинейная фильтрация

Рис. 2. Оценка огибающей интерференционного сигнала с одним максимумом

СКО оценки фазы сигнала в случае нелинейной фильтрации составила 0,17 рад, предельная погрешность оценки фазы составила 0,47 рад.



Рис. 3. Зашумленный сигнал с двумя максимумами

Рассмотрим сигнал, полученный при отражении предметной волны от слоя среды с отражающими границами (простейший вариант многослойной среды). Такой сигнал имеет два истинных максимума различной интенсивности, что обусловлено поглощением в слое. При наличии шума наблюдения и случайных флуктуаций фазы вид сигнала искажается, как это иллюстрируется на рис. 3. При моделировании использовались те же характеристики, что и выше. Максимумы расположены в точках 30 мкм и 40 мкм.

Из-за сложения сигналов, сформированных при отражении излучения от разных границ слоя, происходит смещение истинного положения максимумов. Для коррекции оценки положения второго максимума из исходного сигнала вычитается оцененная составляющая с первым максимумом [4]. На рис. 4 представлена оценка огибающей, полученная с помощью фильтрации Калмана.



Рис. 4. Оценка огибающей интерференционного сигнала с двумя максимумами

Погрешности восстановления огибающих и максимумов с помощью линейной и нелинейной фильтрации Калмана представлены в таблице.

	СКО положения максимума, мкм		СКО при восстановлении слоя переменной толщины, мкм	
	Первый максимум	Второй максимум	Верхняя граница слоя	Нижняя граница слоя
Линейный фильтр	0,95	0,63	2,21	1,36
Нелинейный фильтр	0,85	0,60	1,91	1,13

Таблица. Сравнение СКО оценок, полученных с помощью линейной и нелинейной фильтрации Калмана

Диапазон отклонения рельефа, как и раньше, составил 88 мкм.

Из представленных результатов видно, что при наличии случайных флуктуаций фазы, вызванных, например, перемещением опорного отражателя и неточностью этого перемещения, с точки зрения наименьшей ошибки предпочтительна нелинейная фильтрация Калмана с коррекцией фазы сигнала.

Заключение

Алгоритм фильтрации Калмана-Бьюси позволяет реализовать динамическую обработку интерференционных сигналов малой когерентности.

В реальных интерферометрических системах движение опорного отражателя вносит флуктуации фазы, коррекция которых невозможна при использовании метода ли-

нейной фильтрации. В этом случае использование нелинейной дискретной фильтрации Калмана предпочтительнее с точки зрения минимизации ошибки.

При восстановлении внутренней структуры среды целесообразна коррекция оценок максимумов огибающей, полученных на выходе фильтра.

Литература

1. Васильев В.Н., Гуров И.П. Компьютерная обработка сигналов в приложении к интерферометрическим системам. // СПб: БХВ-Санкт-Петербург, 1998. 237 с.
2. Захаров А.С. Нелинейный анализ стохастических параметров интерференционных систем: дис. ... канд. техн. наук: 05.13.05: защищена 20.12.05. – СПб., 2005. – 157 с.
3. Коломийцов Ю.В. Интерферометры: основы инженерной теории, применение // Л.: Машиностроение, 1976. 296 с.
4. Вольнский М.А., Захаров А.С. Исследование разрешающей способности метода дискретной линейной фильтрации Калмана при обработке сигналов в оптической когерентной томографии. В кн.: Проблемы когерентной и нелинейной оптики / Под ред. И.П. Гурова и С.А. Козлова, СПб: СПбГУ ИТМО, 2006. С. 246–255.
5. Гуров И.П. Оптическая когерентная томография: принципы проблемы и перспективы. В кн.: Проблемы когерентной и нелинейной оптики. / Под ред. И.П. Гурова и С.А. Козлова, СПб: СПбГУ ИТМО, 2004. С. 6–30.
6. Борн М., Вольф Э. Основы оптики // М.: Наука, 1970. 856 с.
7. Таратин А.М., Гуров И.П., Захаров А.С. Анализ производительности вычислений при динамической обработке сигналов методом нелинейной фильтрации Калмана. В сб.: Труды Всероссийской научно-методической конференции «Телематика 2004». – Санкт-Петербург, 2004. – Т. 1. – С. 197–198.
8. Kalman R.E. A new approach to linear filtering and prediction problems, Trans. ASME, J. Basic Eng. 82, 1960. P. 35–45.
9. Калман Р.Э., Фалб П.Л., Арбиб М.А. Очерки по математической теории систем // М.: Едиториал УРСС, 2004. 400 с.
10. Балакришнан А.В. Теория фильтрации Калмана // М.: Мир, 1988. 169 с.
11. Гуров И.П., Захаров А.С. Анализ характеристик интерференционных полос методом нелинейной фильтрации Калмана // Оптика и Спектроскопия. – 2004. – Т. 96, № 2. – С. 210–216.
12. Tuzlukov V.P. Signal Detection Theory // Boston: Birkhaser, 2001. 725 p.
13. Справочник по прикладной статистике / под ред. Э. Ллойда, У. Лидермана. – М.: Финансы и статистика, 1989. Т. 2. С. 421–470.

МЕТОД ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЙ ОБРАБОТКИ МЕДИКО-БИОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОБРАЖЕНИЙ

**А.М. Малов, Т.А. Шереметьева (ФГУП НИИ комплексных испытаний оптико-электронных приборов и систем), Г.Н. Филиппов (ФГУП НИИ комплексных испытаний оптико-электронных приборов и систем)
Научный руководитель – д.т.н., профессор И.П. Гуров**

Представлен метод, предназначенный для анализа изображений препаратов, используемых в медико-биологических исследованиях. Основной решаемой задачей является выделение интересующих исследователей объектов для дальнейшего измерения их морфометрических параметров. Метод основан на визуализации меры сходства (расстояния в признаковом пространстве) с эталоном и на пороговой бинаризации преобразованного изображения с использованием интерактивного управления.

Ключевые слова: предварительная обработка, выделение объектов на изображении, медико-биологические изображения, микроскопия.

Введение

Объекты на медицинских изображениях обладают большой сложностью, полностью автоматизировать процесс измерения оптических и морфометрических параметров разнотипных медико-биологических микрообъектов на сегодняшний день затруднительно. Основным препятствием является сложность выполнения сегментации и выделения объектов интереса. Удовлетворительное дешифрирование во многих случаях не может быть осуществлено без участия человека, Визуальный анализ изображений препаратов, используемых в медико-биологических исследованиях, требует напряжения зрения и трудоемок. Предварительная обработка медицинских изображений с использованием вычислительной техники и математических методов в этой отрасли позволяет не только ускорить процесс обработки, но и повысить точность результатов исследования. Необходимо, используя цифровую обработку, привести изображение к такому виду, где не только хорошо различимы объекты интереса, но и, по возможности, удалено все лишнее, чтобы количественное вычисление морфометрических параметров в дальнейшем могло бы быть произведено автоматически.

Известные методы предобработки изображений [1, 2] обеспечивают большой набор функций: изменение яркости, цветности, контраста; арифметических операций с изображениями, выравнивания гистограмм, фильтрации. С помощью этих методов можно выделять объекты интерактивным методом при постоянном контроле полученного результата, но действия пользователя трудно сделать целенаправленными. Пользователь может лишь улучшать или отбраковывать результат.

При любом методе предварительной обработки выделение объектов интереса производят при помощи порогового преобразования. Пороги определяются разными способами, наиболее универсальный из которых – по гистограмме значений какого-либо из параметров (например, яркости). Гистограмму анализируют визуально, выбирая порог, или автоматически, находя минимумы и максимумы.

В отличие от монохромного изображения, где каждый пиксель определяется значением яркости, в цветном RGB-изображении каждый пиксель характеризуется значениями яркости трех цветовых компонент: R, G и B (красного, зеленого и синего). Поэтому для сегментации цветных изображений одной гистограммы яркости недостаточно (пиксели с одинаковой яркостью могут иметь разный цвет). Если же изображение многозонально, то размерность ячеек соответствующей гистограммы яркостей равна количеству спектральных зон. Для интерактивного выбора порога трудно придумать удобное визуальное представление таких гистограмм.

Для выбора порога при сегментации цветных изображений в работе [3] предложен способ предварительной обработки, переводящей изображение в другое цветовое про-

странство, а именно – в пространство HSV (Hue, Saturation, Value – цветность, насыщенность, уровень). Затем получают цветовые плоскости HS и HV. Для выделения объекта выбирают цветовую плоскость, в которой области, соответствующие объекту и фону, максимально удалены друг от друга. Выбор порога осуществляют методом обучения с учителем, классифицируя пиксели изображения в двумерном пространстве признаков с помощью линейной решающей функции. Такой способ также основан на переборе вариантов и для спектральнональных изображений большого числа спектральных зон малоприменим.

При обработке спектральнональных изображений применяют метод разложения на главные компоненты, но для этого необходимо знание ковариационной матрицы спектральнональных компонент [1].

Существуют узкоспециализированные методы, которые позволяют решить задачу автоматического выделения объектов интереса для конкретных задач, например, программные продукты фирм ВИДЕОТЕСТ, МЕКОС (Россия) [4, 5]. Но и этим методам требуются входные изображения высокого качества, что в реальных условиях далеко не всегда возможно.

Универсальных подходов к выбору алгоритма для сегментации произвольного изображения не известно.

Следовательно, существует необходимость развития алгоритмов общего и универсального характера для выделения широкого класса объектов.

Такой алгоритм может быть реализован с помощью предварительной обработки, основанной на методе преобразования изображений, который визуализирует меру сходства с эталоном [6]. Мера сходства характеризуется расстоянием до эталона в пространстве признаков. Выбор эталона производится пользователем либо заданием априорно известных значений признаков объекта интереса, либо с помощью указания на один из узанных пользователем выделяемый объект, признаки которого и используются в качестве эталона.

В результате такой обработки получают изображение в градации серого, и, поскольку яркость пикселя характеризует его сходство с эталоном, становится достаточно просто выбрать порог для бинаризации и, следовательно, выделения объекта, схожего с эталоном.

Метод универсален по общему построению алгоритма и может быть легко адаптирован к задачам обработки медико-биологических изображений.

Метод применим для проведения предварительной обработки не только одного изображения, но и группы совмещенных попиксельно изображений, полученных с помощью электронного микроскопа в разных спектральных диапазонах. Его реализация весьма проста и может быть осуществлена в интерактивном режиме за время, сравнимое со временем экспонирования изображений.

Интерактивное выделение объектов на медико-биологических изображениях

Большинство известных методов сегментации изображений основываются на алгоритмах, при которых изображение разбивается на области по сходству признаков их пикселей. При анализе медико-биологических изображений необходимо выделить на изображении те области, с которыми связана существенная для данной задачи информация, при этом можно пренебречь несущественными деталями.

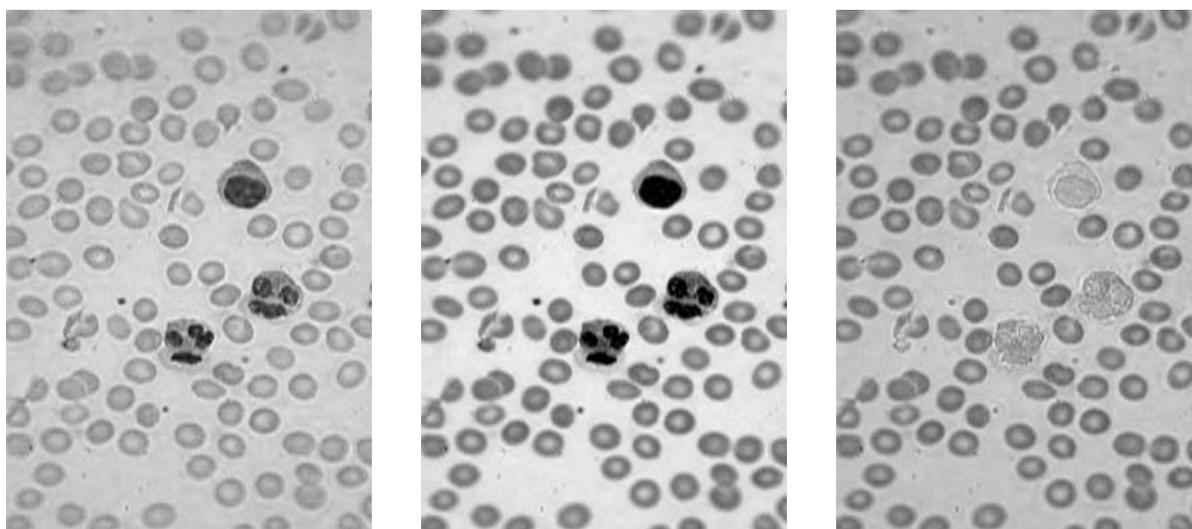
Для выполнения интерактивной сегментации медико-биологических изображений предлагается использовать метод, сочетающий визуализацию меры сходства с эталоном [6] с выбором порога по гистограмме меры сходства.

Метод визуализации меры сходства заключается в следующем. Каждый пиксель обрабатываемого изображения с конкретными пространственными координатами обла-

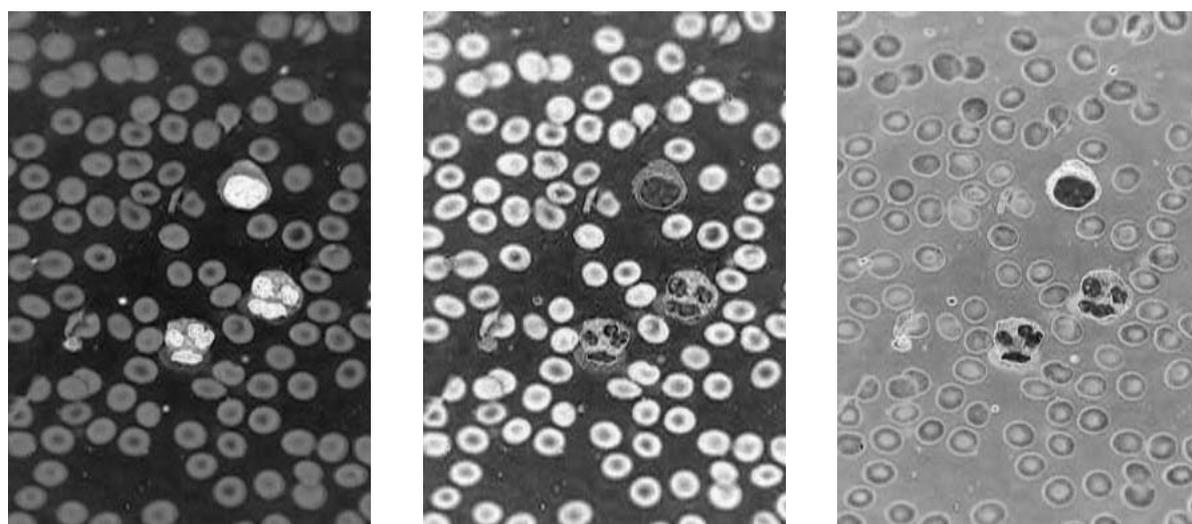
дает координатами в пространстве признаков. В качестве признаков могут быть выбраны либо яркостные характеристики (когда исходные данные представлены одним цветным изображением), либо спектральные характеристики (когда исходные данные представлены несколькими изображениями, полученными в нескольких спектральных диапазонах). Кроме этих характеристик, в признаковое пространство можно включить и другие характеристики, например, текстурные. Конкретная точка признакового пространства может быть принята за эталон, и тогда каждый пиксель обрабатываемого изображения может быть охарактеризован мерой сходства – расстоянием до эталона в признаковом пространстве. В качестве яркости пикселя на итоговом изображении выбирается величина, пропорциональная расстоянию. Пикселям, наиболее близким к эталону в пространстве признаков, присваивается наибольшая яркость, остальным пикселям присваивается яркость в соответствии со степенью их сходства с эталоном.

Этот метод удобен для интерактивной обработки. Действительно, выбор эталона может быть произведен на основе визуального анализа исходных изображений, а выбор порога для выделения объектов – на основе визуального анализа одномерной гистограммы меры сходства исходных пикселей с эталоном.

Варьировать реализацию метода, адаптируя его к конкретной задаче, можно при помощи выбора пространства признаков, меры сходства, способа выбора эталона.



а) Исходное цветное изображение, разложенное на RGB-составляющие



б) Итоговые изображения – визуализация для различных эталонов

Рис. 1. Пример обработки цветного изображения

Метод весьма просто реализуется при обработке одного цветного изображения, когда в качестве признаков используют только значения интенсивностей каждой RGB-составляющей цвета, в качестве эталона берут вектор признаков, соответствующий некоторому пикселю на изображении, а расстояние в пространстве признаков определяется как расстояние в n -мерном евклидовом пространстве.

Рис. 1 демонстрирует идею метода на примере обработки цветного изображения, разложенного на цветовые RGB составляющие (рис. 1, а). Для синтеза итоговых изображений в качестве эталона были взяты яркостные признаки объектов разных типов. Результат синтеза представлен на рис. 1, б).

После такой обработки легко произвести бинаризацию изображения, выделив объекты интереса с помощью порога по яркости. Выбор порога может быть произведен как с визуальным контролем, так и автоматически. Результаты бинаризации синтезированных изображений показаны на рис. 2.

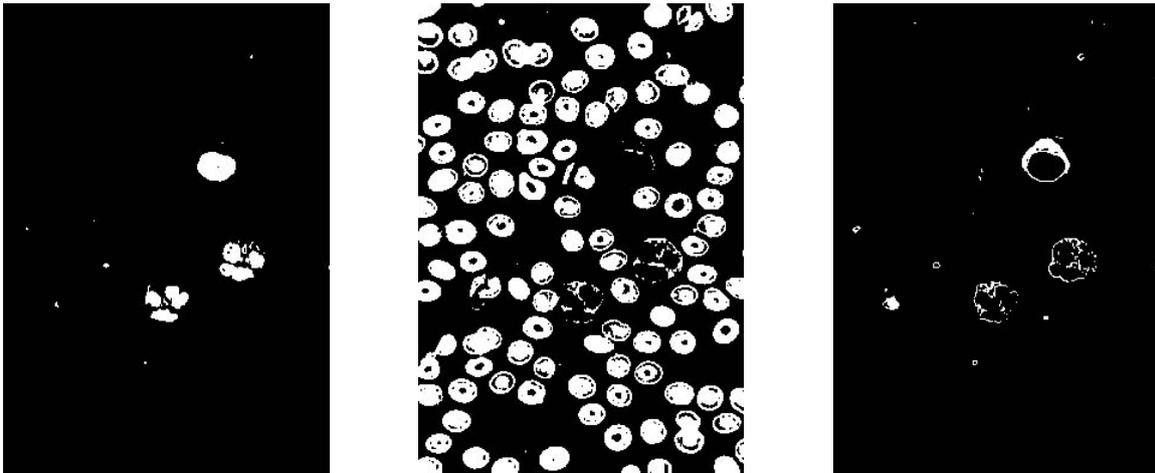


Рис. 2. Бинаризация. Выделение объектов разных типов

В качестве признаков, кроме яркости, в различных диапазонах могут быть включены также и другие признаки: корреляционные, текстурные, признаки формы.

Выбор эталона и меры сходства позволяют адаптировать визуализацию для конкретных задач. Эталон может быть выбран на основе визуального анализа исходного изображения, а также признаков, взятых из специально созданной базы данных.

Отметим, что в предлагаемом методе визуализации меры сходства с эталоном качество визуализации и последующей бинаризации зависит не только от выбранного эталона, но и от выбора меры сходства. Известно множество мер сходства, среди которых можно выделить такие, как евклидово расстояние в многомерном пространстве признаков

$$d_1(\bar{e}, \bar{x}) = \sqrt{(e_1 - x_1)^2 + (e_2 - x_2)^2 + \dots + (e_n - x_n)^2} \quad (1)$$

или максимальная абсолютная разность координат в признаковом пространстве

$$d_2(\bar{e}, \bar{x}) = \max \{|e_1 - x_1|, |e_2 - x_2|, \dots, |e_n - x_n|\}. \quad (2)$$

Мера сходства может также определяться как угол между векторами в многомерном признаковом пространстве [7]:

$$d_3(\bar{e}, \bar{x}) = \arccos \frac{e_1 x_1 + e_2 x_2 + \dots + e_n x_n}{\sqrt{e_1^2 + e_2^2 + \dots + e_n^2} \cdot \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2}}. \quad (3)$$

В том случае, когда область интереса неоднородна, в качестве эталона следует брать соответствующую совокупность точек признакового пространства, а расстояние

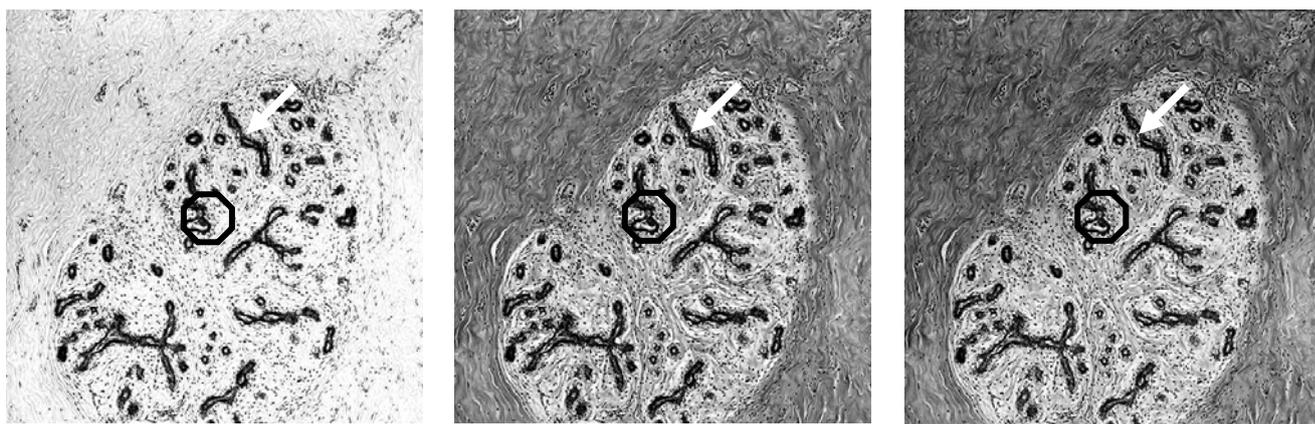
текущей точки до эталона может быть определено как минимальное расстояние от текущей точки до точек эталонной области в признаковом пространстве.

Если имеется информация о распределении вероятностей значений признаков эталона, то может быть использована мера, основанная на условных вероятностях (байесовский подход). В создании меры могут участвовать любые априорно оцененные характеристики исследуемых объектов. В качестве меры сходства можно принять, например, расстояние Махаланобиса, которое определяется по формуле:

$$d_4(\bar{y}, \bar{x}) = \sqrt{(\bar{y} - \bar{x})^T C^{-1} (\bar{y} - \bar{x})}, \quad (4)$$

где \bar{y} – текущий вектор признаков, \bar{x} – вектор средних признаков эталонной области, C – матрица ковариации векторов эталонной области. Вектор \bar{x} и матрица C могут быть взяты из априорно составленной базы данных или вычислены по визуально узанному объекту интереса.

На рис. 3 продемонстрирован результат предобработки и выделения сложной неоднородной области. На рис. 3, а приведено исходное изображение молочной железы, разложенное на RGB составляющие. Чтобы выделить весь объект, на нем выделена наиболее представительная область этого объекта (на исходных изображениях она обведена круглой рамкой). В качестве меры сходства использовалось расстояние Махаланобиса. После предобработки для выделения были применены операции бинаризации и медианной фильтрации. Результаты предобработки и выделения объекта представлены на рис. 3, б.



а) Исходное цветное изображение, разложенное на RGB составляющие



Результат предобработки

Результат бинаризации после предобработки

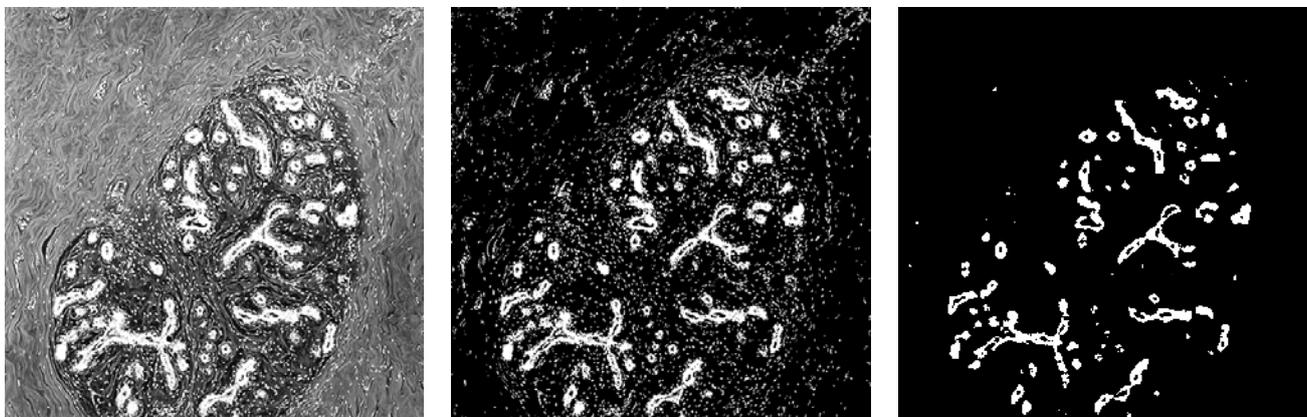
Результат предобработки, бинаризации и медианной фильтрации

б) Результаты последовательности действий выделения сложного объекта

Рис. 3. Выделение сложной неоднородной области

Представленное на рис. 3 изображение содержит и другие объекты, которые могут быть выделены для последующих измерений. Эти объекты более однородны и могут быть выделены по эталону-вектору с использованием мер $d_1 - d_3$.

На рис. 4 приведен результат выделения объектов на том же исходном RGB-изображении, представленном на рис. 3, с использованием меры d_1 и с интерактивным выбором эталона, который на рис. 3 отмечен стрелкой.



Результат предобработки

Результат бинаризации после предобработки

Результат предобработки, бинаризации и медианной фильтрации

Рис. 4. Результат выделения однородных относительно признакового пространства объектов. Исходное RGB-изображение то же, что и на рис. 3

После такой предварительной обработки морфометрические признаки могут быть легко вычислены автоматически без выделения объектов вручную.

Метод предварительной обработки реализован в программе, которая позволяет:

- просмотреть обрабатываемое изображение;
- выбрать эталон на исходном изображении либо задать значения вектора признаков;
- выбрать способ расчета меры сходства (расстояния в признаковом пространстве);
- получить синтезированное изображение в шкале серого;
- выделить объекты, сходные с эталоном, в соответствии с выбранным по гистограмме меры сходства пороговым ограничением;
- представить итоговое изображение в псевдоцвете, где каждому эталону присваивается свой цвет, что делает результат предварительной обработки более удобным для восприятия человеческим глазом.

Заключение

Представленный интерактивный метод предварительной обработки предназначен для подготовки к автоматической морфометрии медико-биологических изображений. От известных способов он отличается целенаправленностью визуализации, позволяющей быстро выделить объекты интереса. Наиболее эффективно использование метода для решения задач анализа многозональных изображений.

Итоговое изображение может быть адаптировано к конкретной задаче дешифрирования с помощью выбора признакового пространства, эталона и меры сходства. Мера сходства может быть подобрана в соответствии с априорными сведениями о признаках исследуемого объекта, фона и шумовой компоненты. Выбор эталона может быть осуществлен с помощью априорных сведений о численных значениях признаков объекта или интерактивно пользователем, который выбирает характерный объект или характерную часть объекта на исходном изображении.

Следует отметить работоспособность метода при анализе сложных и низкоконтрастных медицинских изображений, а также компактность представления информации, позволяющую экономно хранить и передавать многозональные изображения по каналам связи.

В статье были использованы изображения (рис. 3, а), представленные на сайте <http://lab.wolf.ru>

Литература

1. Прэнт У. Цифровая обработка изображений. Т. 2. М.: Мир, 1982. 790 с.
2. Шапиро Л., Стокман Дж. Компьютерное зрение. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006.
3. Попова Г.М., Степанов В.Н. Анализ и обработка изображений медико-биологических микрообъектов. // Автоматика и телемеханика. 2004. № 1. С. 131–142.
4. http://www.akond.ru/soft_size.html
5. <http://www.mecos.ru/>
6. Шереметьва Т.А., Филиппов Г.Н. Способ преобразования изображений. Патент РФ № 2267232. Бюллетень изобретений № 36, 2005. С. 265.
7. Дуда Р., Харт П. Распознавание образов и анализ сцен. М.: Мир, 1976. 512 с.

ФОРМИРОВАНИЕ НАНО-МИКРОСТРУКТУР И ПЛАНАРНЫХ ВОЛНОВОДОВ МЕТОДОМ КОПИРОВАНИЯ РЕЛЬЕФА МАТРИЦЫ УФ-ОТВЕРЖДАЕМОЙ ПОЛИМЕРНОЙ КОМПОЗИЦИЕЙ

Е.Ю. Золотова

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор И.Ю. Денисюк

В работе рассмотрено применение метода наноимпринтинга для изготовления микрооптики, а конкретно оптического волновода, с задаваемыми параметрами. Отражены условия подготовки и протекания процесса вакуумирования и УФ-отверждения для более точной передачи формы оптической поверхности. Приведены возможности варьирования параметрами с целью улучшения эксплуатационных показателей.

Введение

Развитие компьютеров и Интернета требует передачи все больших объемов информации. Вначале для передачи использовались высокочастотные линии связи, однако в этом случае допустимая полоса частот лимитирована излучением СВЧ и, соответственно, повышением потерь при увеличении частоты.

Выйти на принципиально новые уровни скорости передачи позволило использование оптических линий связи. Здесь свет (световая частота) используется в качестве несущей СВЧ информационного сигнала. Для этого излучение лазера модулируется СВЧ информационным сигналом. Далее свет передается по оптоволокну на большие расстояния. В конце производится обратная демодуляция с использованием сверхбыстрых фотодиодов. Однако сейчас, несмотря на название, оптическая связь реально представляет собой гибридные системы, состоящие из оптических линий связи и электронных систем модуляции и коммутации, которые и лимитируют суммарное быстродействие.

Использование непосредственной модуляции ИК света в волокне могло бы существенно повысить полосу частот и, соответственно, скорость передачи. Существующие кристаллические электрооптические модуляторы на LiNbO_3 весьма дороги, критичны к вибрациям, имеют большие размеры и требуют высокого напряжения управления [1]. Это не дает возможности их широкого применения в устройствах телекоммуникации.

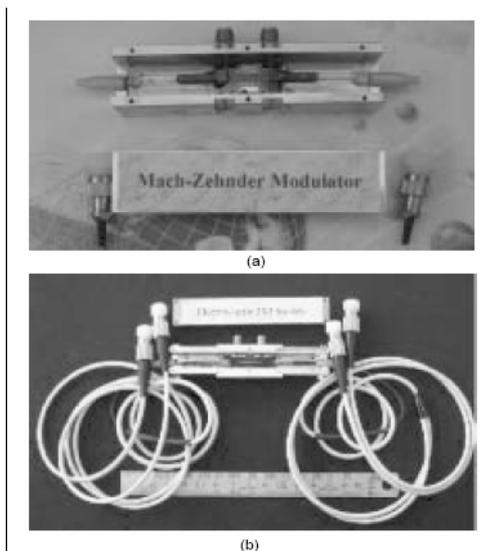


Рис. 1. (а) – модулятор Маха-Цендера, (б) – электрооптический переключатель каналов 2*2

В последние годы интенсивно исследуются электрооптические устройства на основе полимерных планарных волноводов. Сейчас есть уже первые примеры их применения (рис. 1) [2–4]. Для изготовления в основном используются такие процессы, как

микроштамповка, полутонная литография и soft lithography (наноимпринтинг). Возможности современной фотолитографии позволяют с высокой точностью создать прототип необходимого волноводного устройства (Y – разветвитель, модулятор Маха-Цендера и др.) на фоторезисте, которое, благодаря таким методам, как наноимпринтинг, может быть воспроизведено из необходимого полимерного материала на желаемом носителе с минимальными искажениями формы [5]. Это позволяет получать сколь угодно большое число копий хорошего качества с единичной матрицы, тем самым удешевляя процесс производства. В данной работе рассматривается применимость процесса наноимпринтинга для получения полимерных планарных волноводов.

Метод soft lithography

По существу, метод наноимпринтинга заключается в перенесении топологии необходимой схемы (элемента) на полимер, который становится штампом для многократного использования. Возможность передачи суб-25 нм структур, высокая производительность и относительная дешевизна делают этот метод перспективным для серийного изготовления оптических интегральных схем [4]. Общая структура метода наноимпринта представлена на рис. 2.

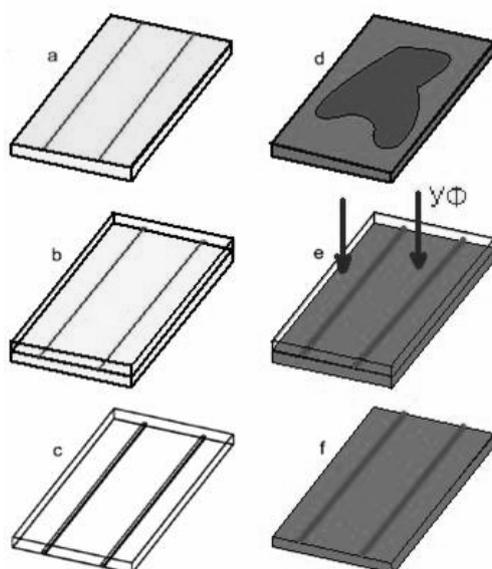


Рис. 2. Процесс изготовления копии микрооптики при помощи метода наноимпринта: а – изготовление шаблона для волновода методом фотолитографии; б – изготовление гибкого штампа из силиконового каучука; с – гибкий штамп из силиконового каучука; д, е – нанесение УФ-отверждаемого полимера на стеклянную подложку и формирование волновода из полимера; ф – полученный полимерный волновод на стеклянной подложке

Поскольку получаемая структура является полимерной, то использование схожих веществ для получения штампа является нецелесообразным, так как могут возникнуть химические связи между штампом и формирующейся структурой. Исходя из этого, для получения штампа нами был выбран высокопрочный прозрачный силиконовый каучук (Silastic T-4). Данное вещество представляет собой двухкомпонентный материал, состоящий из основы, которая при смешивании со сшивающим агентом вулканизируется при комнатной температуре по реакции присоединения с линейной усадкой вещества менее 0,01 %. Silastic T-4 является прозрачным для УФ-излучения, что позволяет использовать его для получения элементов из УФ-отверждаемых полимерных композиций даже при использовании непрозрачных подложек. Гибкость и прочность Silastic

T-4 позволяет легко снимать его как с фотолитографического шаблона (при изготовлении штампа), так и с полимерной копии (при получении копии) (рис. 2, с, f) без повреждения топографии штампа [5].

УФ-полимеризуемые композиции

В работе в качестве основного оптического материала используются УФ-полимеризуемая композиция.

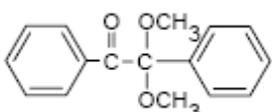
	Название	Производитель	Показатель преломления	Химическая формула	Назначение
1	2-carboxyethyl acrylate	Aldrich, США № 552348	1.4570	$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{OCH}_2\text{CH}_2-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{OH}$	Ненасыщенный мономер. Смачиватель
2	2-Phenoxyethyl acrylate	Aldrich, США № 40,833-6	1.5180	$\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\overset{\text{O}}{\parallel}{\text{C}}-\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{O}-\text{C}_6\text{H}_5$	Ненасыщенный мономер
3	Bisphenol A glycerolate 4,500 ppm monomethyl ether hydroquinone as inhibitor	Aldrich, США № 41,116-7	1.557		Ненасыщенный олигомер
4	Диметоксифенилацетофенон (инициатор, содержание 0,01 %)	Aldrich, США			Фотоиницирующая система

Таблица. Использованные компоненты УФ-отверждаемой композиции

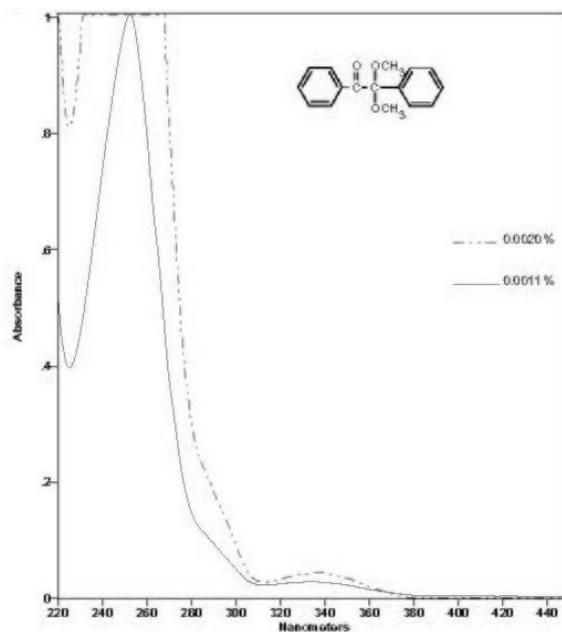


Рис. 3. Спектр поглощения диметоксифенилацетофенона

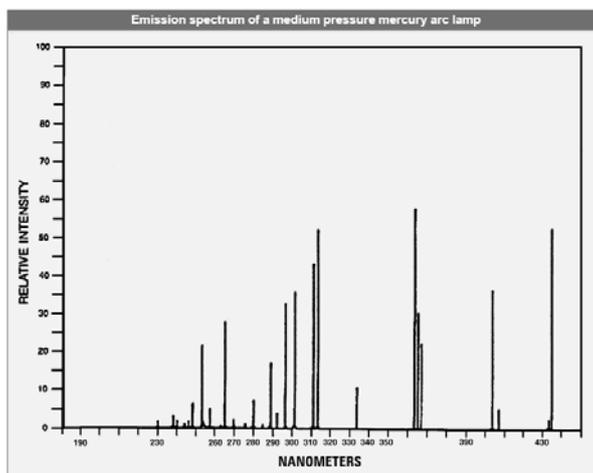


Рис. 4. Спектр излучения ртутной лампы

Преимущества использования УФ-отверждаемых акрилатов состоит в том, что они не требуют присутствия растворителей и не содержат выделяющихся летучих органических соединений. В основном такая композиция содержит олигомер, мономер и фотоинициатор. Под действием УФ излучения инициатор генерирует свободные радикалы, способные разрушить двойные углеродные связи мономера и инициировать образование полимерных цепей. Быстрое отверждение (порядка десятков минут) обеспечивает высокую производительность процесса.

В таблице приведены формулы используемых веществ.

Композиция, использованная в данной работе, состояла из компонентов в следующем соотношении № 1 – 10 %, № 2 – 40 %, № 3 – 50 %, № 4 – 0,1 %. Здесь ОН группы 2-carboxyethyl acrylate обеспечивают адгезию к стеклянной подложке, Bisphenol A glycerolate дает необходимую жесткость получаемому элементу, а с помощью 2-Phenoxyethyl acrylate можно подобрать необходимый показатель преломления всей композиции, который будет удовлетворять условию планарного волновода. Спектр поглощения инициатора Диметоксифенилацетофенон приведен на рис. 3. Его поглощение в области ультрафиолета определяет использование ртутной лампы для отверждения мономерной композиции, спектр которой приведен на рис. 4.

Описание эксперимента

Процесс Soft lithography при получения волноводной структуры с помощью разработанного прибора проводится в несколько этапов:

1. изготовление гибкого штампа;
2. изготовление волновода с использованием гибкого штампа из светоотверждаемых мономеров.

Изготовление гибкого штампа. Из литературы хорошо известен процесс изготовления гибкого штампа из силикона [6, 7] с использованием фотографического шаблона. Так как в литературе приводится только общая схема процесса, то в каждом конкретном случае приходится отрабатывать элементы технологии заново. В нашем случае использовался Силастик Т-4 с соответствующим отвердителем. Операции были проведены согласно технологическому регламенту.

Используется мастер-штамп, имеющий структуру будущих микрополосков, полученный методом фотолитографии на фоторезисте. Мастер-штамп на керамической подложке приведен на фотографии (рис. 5). Далее с мастер-штампа делается силиконовый гибкий штамп. Поверхность мастер-штампа должна быть чистой и свободной от загрязнений. Для этого проводится очищение его в составе растворителя (гексан или изопропиловый спирт) в течение нескольких минут.

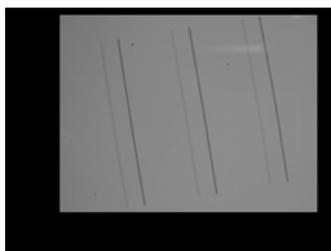


Рис. 5. Фотография керамического шаблона.
Высота полоска 2,7 мкм, ширина 5 мкм, длина 3 см

Для получения состава, из которого при последующих процедурах получается силиконовый штамп, следует провести смешение основы «Силастик Т-4» и отвердителя в пропорции 10:1 в чистой емкости с перемешиванием до полного диспергирования отвердителя в основе. Перемешивание может быть ручным или механическим. Повышать температуру выше +35°C не рекомендуется. Для обеспечения полного смешения основы и отвердителя рекомендуется работать с малыми количествами компонентов. Далее наносим состав на фотолитографический мастер-штамп, у которого перед этим следует сделать бортики, возможно, при помощи скотча, во избежание вытекания состава за пределы мастер-штампа при последующем вакуумировании. При смешивании силиксана с инициатором происходит активное выделение газовой фазы в объеме силиксана. Поскольку пузыри сильно искажают передачу топографии объекта, производим процесс вакуумирования при 10^{-3} мм. рт. ст. Для полного обезгаживания состава достаточно примерно 30 мин., при этом смесь будет увеличиваться в объеме, а затем оседать. После прекращения вакуумирования силиконовый штамп вулканизируется на воздухе в течение 18–24 часов при комнатной температуре (+22–24 °С) и отделяется от образца. Отделение происходит достаточно просто, так как силиксан не имеет адгезии к подложкам и является гибким и прочным. Под микроскопом видно, что силиксан полностью затекает во все мелкие элементы оригинала, и форма получаемого штампа передается с хорошей точностью (рис. 6).

Если рабочая температура ниже, то время отверждения увеличивается. Возможно тепловое ускорение процесса отверждения, но при этом будет происходить заметная усадка отливки из-за различий в коэффициентах термического расширения при охлаждении силиконового каучука и формы. Формы, сделанные из компаунда «Силастик Т-4», могут эксплуатироваться длительное время при повышенных температурах. Однако длительное использование форм при температурах выше +200°C приведет к потере их эластичности. Нагрев до температуры выше +250°C не рекомендуется. Эти данные приведены для понимания области и условий применения данного материала.

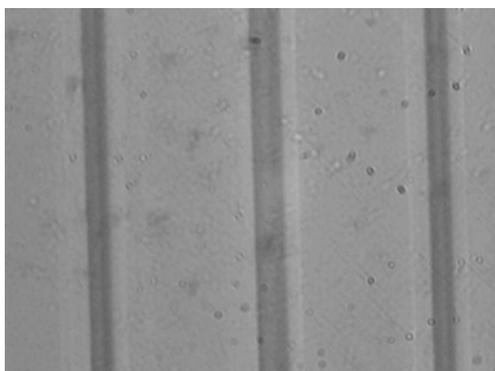


Рис. 6 Фотография полученного силиконового штампа

Таким образом, через сутки мы имеем маску с мастер-штампа для последующего изготовления волноводной структуры.

Установка. Установка для реализации процесса представлена на рис. 7.

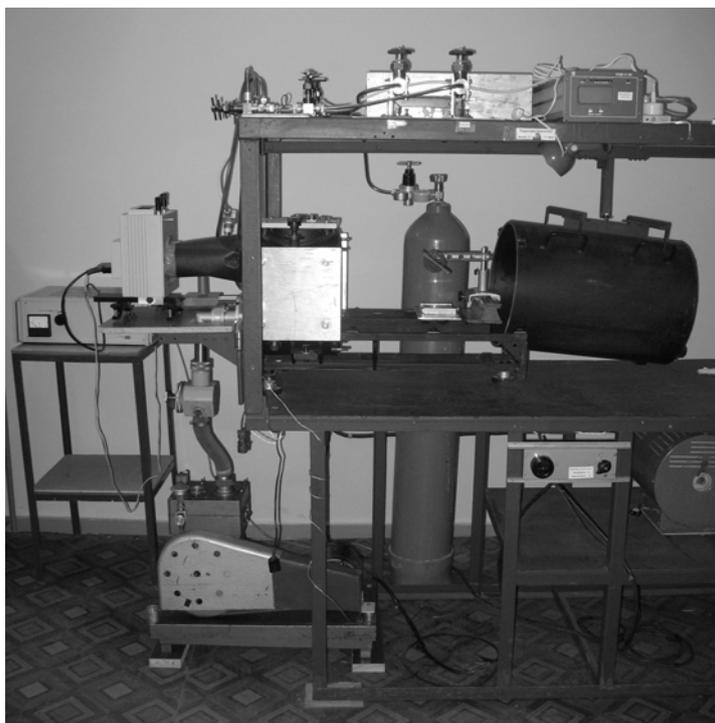


Рис. 7. Фотография установки

Установка представляет собой вакуумную камеру с форвакуумной откачкой (насос внизу). Принципиальная и оптическая схемы установки представлены в приложении. Система питания аргоном обеспечивает газонапуск и заполнение камеры до заданного давления. Давление в установке измеряется тепловыми датчиками. Образец, установленный на столике внутри камеры, экспонируется осветителем с ртутной лампой высокого давления (ДРШ-250). Осветитель (слева) представляет собой держатель лампы с системой конвекционного охлаждения и кварцевым конденсором, формирующим параллельный пучок света. Пучок вводится в камеру через кварцевое окно и направляется на образец поворотным зеркалом внутри камеры (чертежи отдельных элементов не приводятся, в силу их простоты).

Изготовление волновода с использованием гибкого штампа из светоотверждаемых мономеров. Волновод формируется на стеклянной подложке с помощью силикоханового штампа, как описано выше.

Процесс изготовления начинается с тщательного обезжиривания подложки из силикатного стекла. Может использоваться любой другой материал, стекло использовано как наиболее распространенный и доступный материал.

Описанный в литературе метод полностью повторить не удалось, так как при нанесении состава на подложку с последующим наложением штампа не передается заданная толщина объекта, так как не происходит полного вытекания состава из-под силикоханового штампа и образуется лишняя толщина. Наш опыт заключается в том, что приходится подгонять штамп, чтобы край капилляра под будущий волновод находился на краю подложки и обеспечивал попадание состава в капилляр. Полимеризующийся состав распределяется вдоль края подложки и штампа и закрывается тяжелым покровным стеклом для обеспечения плотного контакта. Комплект помещается в установку и полностью закрывается для проведения вакуумирования с целью избавления от кислорода, который ингибирует (препятствует) полимеризацию мономеров. В процессе вакуумирования происходит затекание состава в полосок волновода под действием капиллярного эффекта. Тем самым возможно полностью воспроизвести форму и добиться желаемой толщины волновода без лишних остаточных слоев.

Производится откачка до 1.2×10^2 кПа, при этом разряжении комплект выдерживается пять минут, причем при увеличении времени вакуумирования давление в вакуумной камере не изменяется. Вакуумирование необходимо для затекания жидкого акрилата под действием капиллярных сил. Для предотвращения кипения материала при его фотополимеризации камеру после вакуумирования и затекания акрилата заполняют инертным газом (аргон). Заполнение проводится до достижения давления в камере 1.02×10^3 кПа. Далее производится засветка ультрафиолетом в течение трех минут. По окончании экспозиции необходимо уравнивать давление в камере с атмосферным, чтобы открыть камеру и достать образец.

Поскольку акрилатная композиция не имеет адгезии к силиоксану и при этом образует химические связи с поверхностью стекла, то после полимеризации мы имеем полимерный микрополосок на стеклянной подложке, а силиоксановая маска легко отделяется от полученного элемента. В итоге получаем точную копию фотолитографического шаблона. На рис. 8 приведена фотография полученного волновода.



Рис. 8. Фотография полученного волновода на стеклянной подложке

На фотографии представлены фотолитографический шаблон на керамической пластине, силиоксановая копия и полученный волновод на силикатном стекле (рис. 9).

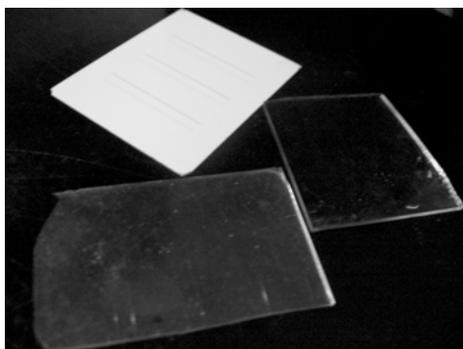


Рис. 9. Фотография керамического шаблона, силиоксанового штампа и полученных на стеклянной подложке волноводов

Обсуждение результатов

Проведенная работа показала, что описанный в литературе метод, заключающийся в изготовлении гибкого штампа рассмотренным выше способом и последующем его нанесении на каплю жидкого акрилата, находящегося на поверхности стекла, дает остаточный слой акрилата, который растекается из-под штампа и принципиально не может быть уменьшен при повышении давления, поскольку поверхностное натяжение в тонком слое не позволяет акрилату вытечь полностью. Аналогичные результаты получены также в зарубежных работах (рис. 10).

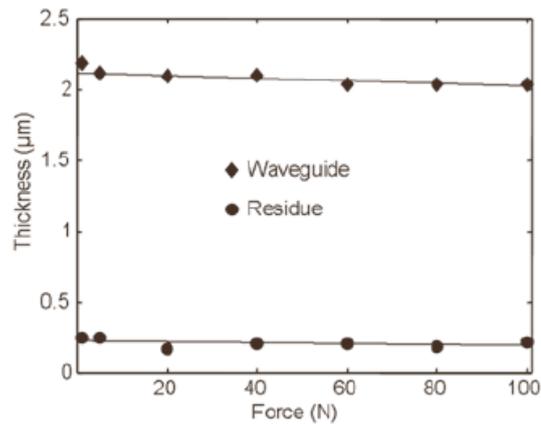


Рис. 10. График зависимости остаточного слоя от силы сжатия

Рассмотрена толщина остаточного слоя в зависимости от силы сжатия, приложенной к силиконовому штампу. Видно, что повышение давления на штамп приводит к уменьшению как высоты волновода, так и толщины остаточного слоя, причем устранить появление остаточного слоя полностью не удается. С другой стороны, повышение давления приводит к изгибу профиля волновода, как показано на рис. 11, что негативно сказывается на модовом составе и потерях проходящего света.

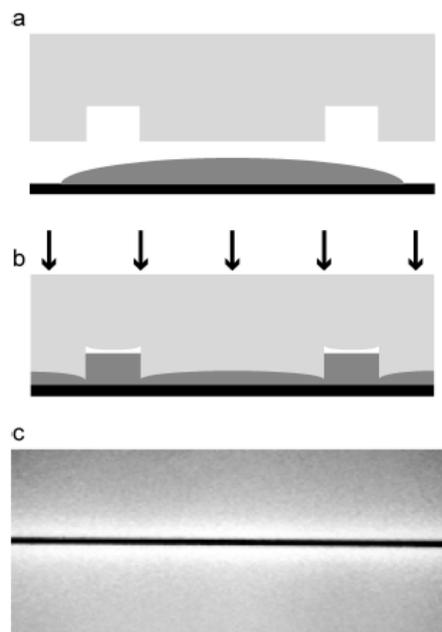


Рис. 11. Изгиб профиля волновода

В данной работе та же задача – уменьшение толщины остаточного слоя – была успешно решена иным способом: наполнение волноводной структуры силиконового штампа жидким акрилатом проводилось под действием капиллярных сил. Было обнаружено, что втягивание жидкого акрилата под силиконовый штамп происходит только в вакууме. Вероятно, при наличии воздуха он, с одной стороны, не дает втягиваться акрилату из-за ограниченного объема, с другой стороны, известно, что в вакууме поверхностное натяжение выше, следовательно, лучше будет и затекание состава. Если жидкий акрилат экспонировать в вакууме, то при газовой выделении происходит образование пузырей газовой фазы, которые затвердевают при фотополимеризации и портят образующуюся структуру. Поэтому после окончания процесса затекания акрилата в камеру напускается аргон до давления, большего, чем давление кипения состава. Газовыделе-

ние прекращается, и при экспонировании происходит затвердевание акрилата. После снятия штампа на поверхности стекла остается полимерный волновод, имеющий заданные размеры, которые не искажаются приложением значительного давления, как в предыдущем случае. Кроме того, затекание акрилата приводит к более чистой (беспыльной) структуре, поскольку пыль, содержащаяся в акрилате и на поверхности стекла, в этом случае не попадает в полосок.

Конечно, метод требует доработки. Затекание зависит от смачивания акрилат–стекло и акрилат-силоксан. Недостаточная очистка поверхностей препятствует затеканию. Поэтому в наших предварительных лабораторных экспериментах длина затекания составляла от 5 до 20 мм, что, во-первых, достаточно для практического использования, и, во-вторых, может быть улучшено при доработке технологического процесса.

Таким образом, в работе предложен и исследован метод создания планарных волноводов, основанный на затекании жидкого акрилата в структуру силоксанового штампа под действием капиллярных сил поверхностного натяжения. Данный метод даже в лабораторном исполнении дал хорошие результаты: получены микрополосковые полимерные волноводы на стекле, имеющие заданную конфигурацию и не имеющие остаточного слоя полимера за пределами волновода.

Были проведены эксперименты по введению света в сформированные волноводные структуры, которые показали, что сформированная структура имеет волноводные свойства и пропускает свет на десятки миллиметров. Фотография световода с введенным в него светом представлена на рис. 12. Видны точки ввода света (слева) и линии волноводов (слева направо).

Поиск аналогов показал, что данный способ не используется в зарубежных работах для изготовления микрополосковых волноводов.

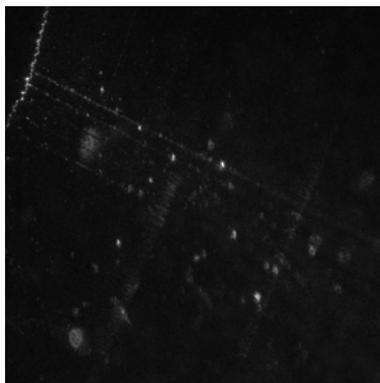


Рис. 12. Свет, проходящий через волноводы

Выводы

1. Исследован процесс затекания акрилата под силоксановый штамп. Показано, что традиционный способ дает принципиально неустраняемый остаточный слой акрилата вокруг полоска.

2. Предложен и экспериментально проверен новый метод формирования планарных полимерных волноводов, основанный на капиллярном затекании жидкого акрилата под силоксановый штамп, прижатый к стеклу. Метод неизвестен в зарубежных публикациях по формированию полимерных акриловых волноводов и может быть использован в практике.

3. Введение света в полученный волновод показало прохождение света на расстояние несколько десятков миллиметров, что вполне достаточно для практического использования.

4. Использованные вещества, структуры волноводов и длина прохождения света достаточны для реализации Y-разветвителей (несколько миллиметров длины) и интерферометра Маха-Цендера (10–15 мм).

Литература

1. Слепов Н. Оптические волновые конвекторы и модуляторы. // Электроника: наука, технология, бизнес. 2000. № 6, С. 6–10
2. T.C. Sum *, A.A. Bettiol, H.L. Seng, I. Rajta 1, J.A. van Kan, F. Watt Proton beam writing of passive waveguides in PMMA Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 210 (2003) 266–271.
3. G. Paloczi, Y. Huang, A. Yariv/ Replica – molded electro-optic polymer Mach-Zehnder modulator, 2004 Applied Physics Letters V.85, №10, p. 1662–1664.
4. Myung-Hyun Lee, Jung Jin Ju, Suntak Park, Jung Yun Do, and Seung Koo Park Polymer-Based Devices for Optical Communications ETRI Journal, Volume 24, Number 4, August 2002.
5. Аракчеева Е., Танклевская Е., Нестеров С., Максимов М., Гуревич С. Получение фотонных кристаллах в структурах на основе полупроводников и полимеров и использованием метода наноимпринта. // Журнал технической физики. 2005. Т. 75. № 8. С. 80–84.
6. G.T. Paloczi, Y. Huang, J. Scheuer, A. Yariv. Soft lithography molding of polymer integrated optical devices: Reduction of the background residue 2004 J. Vac. Sci. Technol. B, Vol.22 № 4 p. 1764–1769.
7. <http://www.pentasever.ru/product.php>

Приложение

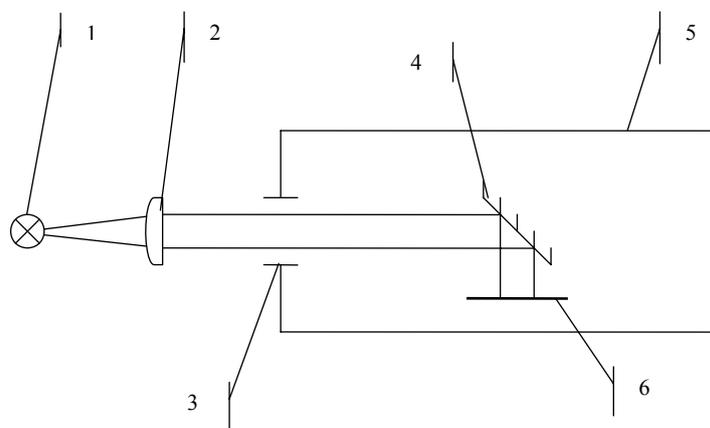


Рис. 13. Оптическая схема: 1 – источник света (ртутная лампа), 2 – конденсор, 3 – входное окно камеры, 4 – поворотное зеркало, 5 – вакуумная камера, 6 – образец

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В КРИСТАЛЛАХ 4-N,N-DIMETHYLAMINO-4'-N'-METHYL-4- STILBASOLIUM TOSYLATE (DAST)

И.А. Верзин

Научные руководители – д.ф.-м.н., профессор И.Ю. Денисюк,
к.т.н., ст.н.с. Л.Н. Аснис

В работе представлено исследование электрооптической эффективности в кристаллах DAST на длине волны 0,63 мкм и проведено сравнение с кристаллами ниобата лития Z-среза. Показано, что по параметрам DAST превышает ниобат лития Z-среза более чем в 40 раз, обеспечивая создание низковольтных СВЧ модуляторов света с управляющим напряжением на уровне жидкокристаллических модуляторов, порядка 2,5 В/мкм, при несравненно более широкой полосе модуляции – как минимум десятки мегагерц.

Введение

В последнее время большой интерес проявляется к нелинейно-оптическим молекулярным кристаллам как перспективным материалам СВЧ модуляторов ИК излучения для применения в системах оптической связи. Эти материалы, также как и электрооптические полимеры, отличаются исключительно высокими нелинейно-оптическими параметрами по сравнению с ранее используемыми неорганическими кристаллами КТР и ниобата лития. Так, электрооптический коэффициент молекулярных кристаллов составляет 100–700 пм/В, что превышает на порядок соответствующие параметры традиционных материалов [1]. Соотношение электрооптических коэффициентов молекулярных кристаллов с соответствующими параметрами ниобата лития приведено на рис. 1 (результаты разных источников).

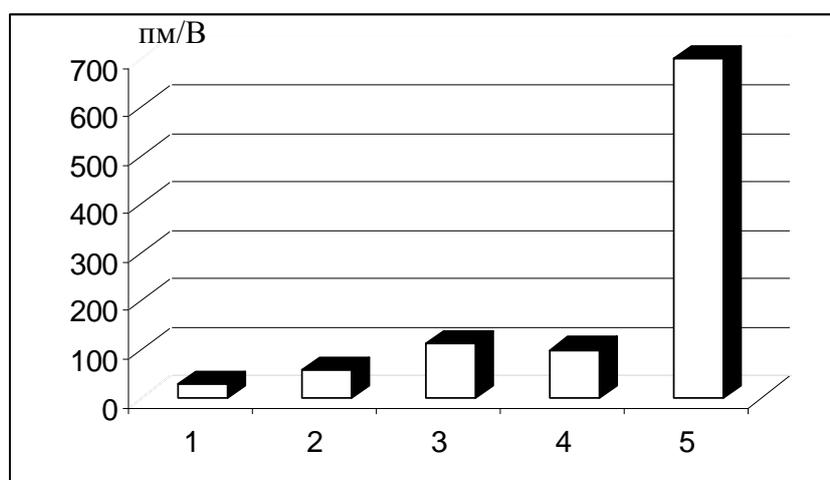


Рис. 1. Электрооптический коэффициент:
1 – LiNbO₃; 2, 3 – электрооптические полимеры DR1 и CLD-1;
4 – объемный кристалл DAST; 5 – тонкая пленка DAST

С учетом низкой величины диэлектрической проницаемости высокий электрооптический коэффициент обеспечивает создание модуляторов света с низким, на уровне единиц вольт, напряжением питания, что особенно важно для их применения совместно с СВЧ электронными схемами управления и исключительно широким частотным диапазоном. Например, в работе [2] показана возможность формирования модулятора с частотным диапазоном 0–1,5 ГГц.

Модуляторы подобного типа могут быть выполнены и как многоэлементные матрицы, что также является уникальным.

По сравнению с другими электрооптическими материалами кристаллы DAST имеют следующие преимущества:

- высокий электрооптический коэффициент $r = 100\text{--}530$ пм/В, что намного больше, чем у ниобата лития, электрооптический коэффициент которого не превышает 30 пм/В. Это позволяет создавать малогабаритные устройства управления параметрами лазерных пучков с малыми направляющими напряжениями;
- малые диэлектрические постоянные $\epsilon_a = 5,2$; $\epsilon_b = 4,1$; $\epsilon_c = 3$, что дает возможность работать на высоких частотах вплоть до ТГц диапазона. У ниобата лития диэлектрические постоянные равны $\epsilon_a = \epsilon_b = 44$, $\epsilon_c = 29$;
- высокая оптическая прозрачность в ближней ИК-области спектра, в частности, на наиболее часто используемых в оптоэлектронике длинах волн полупроводниковых лазеров;
- высокая тепловая стойкость (до 160 °С не происходит изменений оптических свойств кристалла);
- близость фазовых скоростей распространения ИК и ТГц излучения в кристалле, что позволяет получить длину когерентности до 10 мм.

В основном исследовании электрооптических свойств кристаллов DAST проводились на длинах волн 720–1500 нм. Исследования показали, что полоса поглощения у них начинается с 700 мкм и идет в сторону более коротких волн. Однако толщина используемых кристаллов составляет единицы и десятки микрон, что делает их достаточно прозрачными на длине волны 0,63 мкм.

Проблема применения этого перспективного материала связана в основном со сложностью получения однородных бездефектных кристаллов и монокристаллических пленок, необходимых для создания модуляторов света [3].

Данная работа является продолжением цикла исследований нелинейно-оптических молекулярных кристаллов, кристаллических красителей и нанокомпозитов на их основе, выполняемых коллективом кафедры оптики квантоворазмерных сред под руководством И.А. Акимова и затем И.Ю. Денисюка, начиная с 1992 г. [4–9]. В предыдущих работах были исследованы методы синтеза монокристаллов и нанокомпозитов на основе DAST и POM, а также методы их ориентации и нелинейно-оптические свойства кристаллов. В данной работе приведены первые полученные нами результаты по модуляции света электрооптическими кристаллами DAST. Методы получения монокристаллов DAST описаны в работе [6].

Целью данной работы явилось исследование кристаллов DAST в модуляционном режиме на длине волны 0,63 мкм и сравнение его электрооптической эффективности ($r_{\text{эфф}}n_o^3$, где n_o – коэффициент преломления, $r_{\text{эфф}}$ – действующий электрооптический коэффициент) с ниобатом лития.

Исследование

Кристаллы DAST представляли собой тонкие пластины толщиной около 40 мкм с относительно плоскими прозрачными поверхностями, перпендикулярными оптической оси кристалла (рис. 2). Размеры кристаллов составляли 300–400 мкм. В работе исследовался поперечный электрооптический эффект. Применялась оптимальная для получения модуляции по интенсивности ориентация кристаллов, указанная на рис. 3, когда свет распространялся вдоль оси \mathbf{c} , направление поляризации света $\mathbf{E}_{\text{св}}$ составляло угол 45° к оси \mathbf{b} , а электрическое поле $\mathbf{E}_{\text{эл}}$ было направлено вдоль оси \mathbf{a} .

Электрическое поле создавалось между двумя электродами, нанесенными методом вакуумного напыления на тонкую стеклянную пластинку. Расстояние между электродами составляло 45 мкм. Кристалл устанавливался на этих электродах с учетом заданной ориентации. Схема измерения электрооптического эффекта и модуляционных характеристик показана на рис. 4.

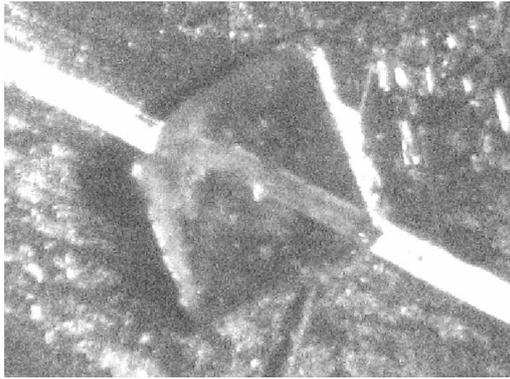


Рис. 2. Кристалл DAST, расположенный на электродах

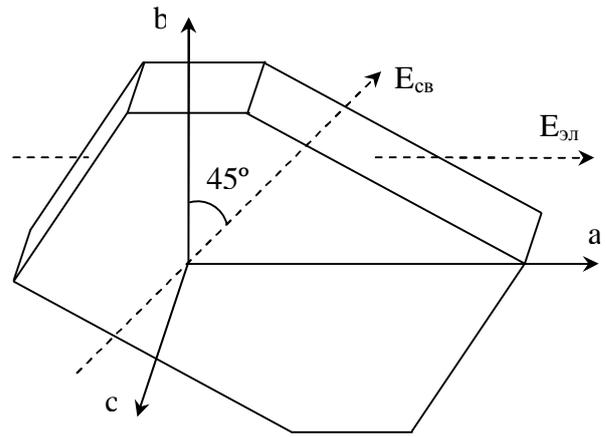


Рис. 3. Схематическое изображение кристалла DAST

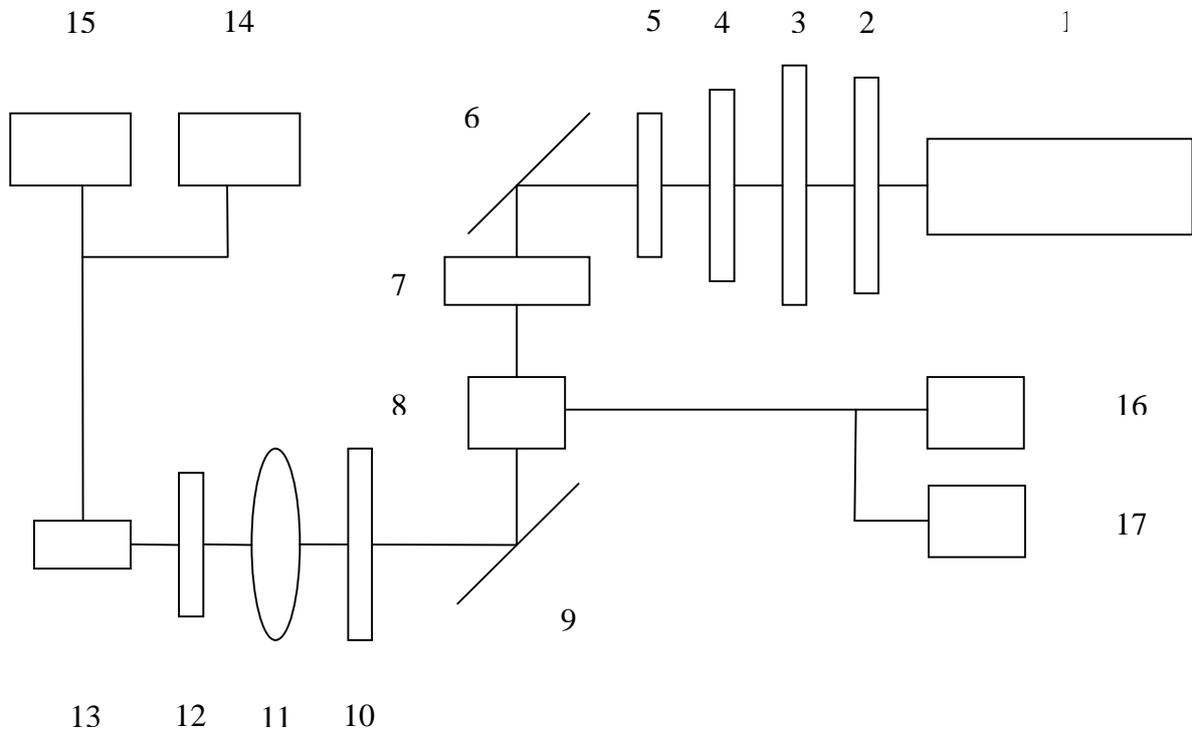


Рис. 4. Схема лабораторной установки: 1 – лазер, 2 – механический модулятор, 3 – $\lambda/4$ пластинка, 4 – поляризатор, 5 – фазовая пластинка, 6, 9 – система зеркал, 7 – объектив, 8 – модулятор, 10 – анализатор, 11 – фокусирующая линза, 12 – светофильтр, 13 – фотоприемное устройство, 14 – осциллограф, 15 – спектроанализатор, 16 – генератор импульсного напряжения, 17 – генератор синусоидального напряжения

В качестве источника излучения использовался He-Ne лазер. Световой пучок проходил через механический модулятор, позволяющий получать 100 % модуляцию света, пластинку $\lambda/4$, поляризатор, позволяющий выбрать необходимую плоскость поляризации света на входе электрооптического кристалла, фазовую пластинку, позволяющую выбрать рабочую точку на линейном участке модулятора. После отражения от зеркала свет фокусировался объективом на модулятор, затем вторым зеркалом направлялся на анализатор. Свет после анализатора собирался линзой и попадал на светочувствительную площадку ФЭУ, перед которым для уменьшения фоновой засветки был установлен светофильтр. На модулятор от генератора подавалось переменное напряжение с частотой

той 15 кГц и амплитудой до 100 В или импульсное напряжение с амплитудой 30 В. Сигнал с ФЭУ мог регистрироваться на осциллографе или на спектроанализаторе.

Измерения проводились относительно кристалла LiNbO_3 Z-среза, электрооптические параметры которого известны [10]. Кристалл имел толщину 1 мм (длина электрооптического взаимодействия) и размер пластинки $2 \times 3 \text{ мм}^2$. Кристалл размещался на тех же электродах, что и исследуемые кристаллы DAST.

Расчетная и экспериментальная оценка величины глубины проникновения электрического поля в кристалл (длины взаимодействия) показала, что практически эта величина не превышает 5–7 мкм. Учитывая тот факт, что толщина кристаллов DAST и LiNbO_3 намного превышает данную величину, можно считать, что у этих кристаллов одинакова длина электрооптического взаимодействия и на выбранной схеме можно достаточно достоверно сравнивать эти кристаллы по электрооптической эффективности.

Сравнение эффективности проходило по переменному сигналу с выхода приемного тракта при работе на линейном участке характеристики модуляторов. В этом случае при не очень высоких индексах модуляции выходной сигнал с ФЭУ имеет частоту управляющего электрического сигнала. При одинаковых управляющих напряжениях на модуляторах амплитуда сигнала пропорциональна электрооптической эффективности. Учитывая оптическое пропускание кристаллов, по величине сигнала можно сравнить эффективность кристаллов DAST и ниобата лития. В режиме линейной модуляции было получено, что электрооптическая эффективность кристаллов DAST в 42 раза лучше ниобата лития Z-среза. Вид модуляционного сигнала на линейном участке характеристики модулятора на DAST показан на рис. 5. При напряжении 120 В в модуляторе на DAST получена почти 50 % глубина модуляции.

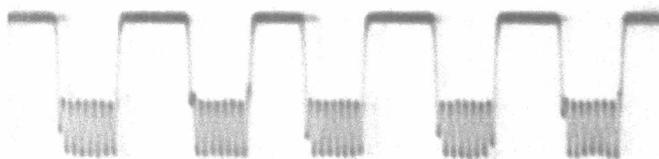


Рис.5. Модуляционный сигнал на кристалле DAST при напряжении 70 В на частоте 1,5 кГц (прямоугольные импульсы – 100 % модуляция)

На рис. 6 и 7 представлены модуляционные сигналы со спектроанализатора (шкала логарифмическая). При повышении напряжения начинают появляться искажения модуляционного сигнала, что наблюдается по возникновению гармоник частоты сигнала (рис. 7).

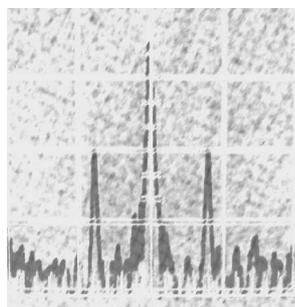


Рис. 6. Спектр модуляционного сигнала при малых индексах модуляции

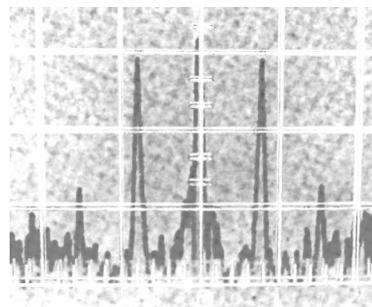


Рис. 7. Появление второй гармоники частоты модуляции

Импульсная работа модулятора на DAST демонстрируется рис. 8 (длительность импульса 1 мкс, амплитуда управляющего напряжения 30 В).

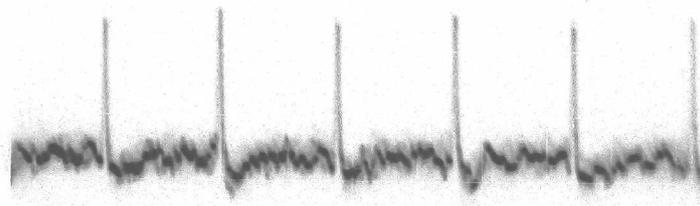


Рис. 8. Модуляция света короткими (1 мкм) импульсами напряжения

Заключение

Таким образом, в работе показано, что кристаллы DAST имеют преимущество по электрооптической эффективности в сравнении с кристаллами ниобата лития Z-среза примерно в 40 раз и перспективны для применения в различных схемах оптоэлектроники как модуляторы с низким управляющим напряжением. Достигнутые в настоящее время параметры показывают возможность низковольтной модуляции света (3–5 В) при уменьшении зазора между электродами до единиц микрон, что и предполагается выполнить в ближайшее время. Фактически данный модулятор при напряжении управления, сравнимом с жидким кристаллом, обеспечивает полосу частот до мегагерц при всех преимуществах твердотельного прибора.

Работа выполнялась при поддержке по гранту РФФИ офи-п № 05-02-08048 и проекту Рособразования № 01.03.06.

Литература

1. Achintya K. Bhowmik, Shida Tan, A. Claude Ahyi On the electro-optic measurements in organic single-crystal films // *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2004. Vol.37. P.3330–3336.
2. Thakur M., Mishra A., Titus J., Ahyi A.C. Electro-optic modulation at 1.5 GHz using single-crystal film of an organic molecular salt // *Applied physics letters*, 2002. Vol.81. No.20. P.3738–3740.
3. Yoshinori Takahashi, Hiroaki Adachi, Tetsuo Taniuchi etc. Organic nonlinear optical DAST crystals for electro-optic measurement and terahertz wave generation // *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 2006. Vol.183. P.247–252.
4. Акимов И.А., Денисюк И.Ю., Мешков А.М. Нанокристаллы полупроводников в полимерной матрице – новые оптические среды // *Опт. и спектр.* 1992. Т.72. №4. С.1026–1032.
5. Акимов И.А., Денисюк И.Ю., Мешков А.М. Создание оптических сред из композиций нанокристаллов красителей в полимерных матрицах // *Опт. и спектр.* 1994. Т.77. №6. С.954–958.
6. Денисюк И.Ю., Бурункова Ю.Э., Смирнова Т.В. Новые электрооптические материалы на основе тонких пленок молекулярных кристаллов – преимущества и перспективы использования // *Оптический журнал*, 2007. № 2.
7. Denisyuk I.Yu., Burunkova Ju.E. Molecular organic crystals DAST and POM in the form of thin crystalline film and nanocrystals composition – the new and promising medium for NLO application *Molecular Crystals and Liquid Crystals* // 2007, в печати.
8. Denisyuk I.Yu., Burunkova Ju.E. Molecular organic crystals DAST and POM in the form of thin crystalline film and nanocrystals composition – the new and promising medium for NLO application // *Ukrainian Physical Journal*, 2007, в печати.
9. Denisyuk I.Yu., Burunkova Ju.E. Organic nanocrystals in polymeric matrix: synthesis, photonic, areas of application // *XII Conference on Laser Optics St. Petersburg*, 2006. June 26–30, invited.
10. Кузьминов Ю.С. Электрооптический и нелинейнооптический кристалл ниобата лития. М.: Наука, 1987. 264 с.

МЕТОД ДИСПЕРСИОННОГО АНАЛИЗА СПЕКТРА СТЕКОЛ. ЗАДАЧА ВЫЧИСЛЕНИЯ ИНТЕГРАЛА СВЕРТКИ И ЕГО РЕАЛИЗАЦИЯ В ПРОГРАММЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ СПЕКТРА КОМПЛЕКСНОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ В ШИРОКОМ ИНТЕРВАЛЕ ЧАСТОТ

И.А. Чернов

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор А.М. Ефимов

В рамках решения более широкой проблемы создания Windows-ориентированной пользовательской программы метода дисперсионного анализа оптических спектров стеклообразных материалов исследован и реализован на языке программирования C++ эффективный алгоритм вычисления оптических постоянных в широком интервале их значений. Нестандартный характер решенной задачи определялся тем, что для вычисления требовалась модель комплексной диэлектрической проницаемости стекол (модель свертки), существенно превосходящая по уровню сложности известные модели для кристаллов. Рабочий вариант программы дисперсионного анализа, использующий реализованный алгоритм, успешно опробован на примере спектров отражения боратных стекол, включая промышленные стекла типа СТК.

Введение

Оптические постоянные материала полностью определяют его отклик на воздействие электромагнитного поля световой волны и тем самым задают значения всех его оптических свойств. Поэтому знание спектров оптических постоянных крайне важно для самых различных областей применения оптических материалов.

Метод дисперсионного анализа основывается на использовании аналитической модели комплексной диэлектрической проницаемости вещества, наиболее подходящей для материала исследуемого типа. Данная работа была направлена на развитие метода дисперсионного анализа для стеклообразных материалов. Поэтому в качестве основы метода использовалась разработанная ранее профессором Ефимовым аналитическая модель дисперсии комплексной диэлектрической проницаемости стекол, известная как модель свертки. Компьютерная программа дисперсионного анализа спектров отражения стеклообразных материалов была впервые создана еще в 1983 г. А.М. Ефимовым с сотрудниками. Эта модель включает интеграл свертки, не имеющий аналитического решения, что обуславливает существенно более высокую сложность процедуры вычислений по сравнению с теми, которые осуществляются при использовании известных моделей для кристаллических материалов.

Актуальность и практическая значимость работы. Знание оптических постоянных, вычисляемых с помощью метода дисперсионного анализа, позволяет решать целый ряд практически важных задач.

Настоящее сообщение посвящено одному из этапов создания рабочей версии новой Windows-ориентированной программы дисперсионного анализа спектров стекол с использованием современного языка программирования C++. Необходимость разработки новой программы обусловлена тем, что использование в прежней программе языка ФОРТРАН для системы MS DOS существенно ограничивает возможности ее применения в современных условиях широким кругом пользователей.

Всю задачу моделирования спектра комплексной диэлектрической проницаемости можно разделить на две части: вычисление интеграла свертки и минимизацию отклонения расчетного спектра от экспериментального. Задача вычисления интеграла свертки является основополагающей в данной программе, о ней дальше и пойдет речь, эффективность и скорость алгоритма во многом определяет аппаратные затраты ЭВМ, что особенно ярко проявляется в случае использования модели свертки.

Формализм

Оптические постоянные

Важнейшим прикладным результатом метода дисперсионного анализа является получение достоверных значений оптических постоянных материала в широком интервале частот, которые полностью характеризуют все его оптические свойства. Такими величинами являются постоянные стекла – пара чисел, которые зависят от частоты света и являются действительной и мнимой частями либо комплексного показателя преломления $n(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$, либо комплексной диэлектрической проницаемости $\epsilon(\omega) = \epsilon'(\omega) + i\epsilon''(\omega)$. Связь между действительной и мнимой частью констант определяется следующим образом:

$$\epsilon'(\omega) = n^2(\omega) - k^2(\omega), \quad \epsilon''(\omega) = 2 \cdot n(\omega) \cdot k(\omega).$$

Знание оптических постоянных материалов необходимо для расчета:

- (1) коэффициентов пропускания и отражения оптических деталей при любых углах падения и состояниях поляризации падающего света;
- (2) характеристик просветляющих и отражающих многослойных покрытий на оптических деталях;
- (3) радиационной теплопроводности в расплавах, знание которой необходимо для моделирования промышленных процессов синтеза, выработки и отжига стекол.

Модель свертки для комплексной диэлектрической проницаемости

Модели диэлектрической проницаемости, известные для кристаллов [1, 2], непригодны для стеклообразных материалов, что определяется спецификой их взаимодействия с электромагнитным излучением. А.М. Ефимовым была впервые предложена [3–5] аналитическая модель комплексной диэлектрической проницаемости стеклообразных материалов (так называемая модель свертки):

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + \sum_{j=1}^J \frac{S_j}{\sqrt{2\pi}\sigma_j} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp[-(x - \omega_{0j})^2 / 2\sigma_j^2]}{x^2 - \omega^2 - i\gamma_j\omega} dx. \quad (1)$$

Здесь ω – частота падающего луча, ϵ_∞ – высокочастотная компонента диэлектрической проницаемости, которая учитывает вклад высокочастотных компонент спектра, так как спектр рассчитывается в узком интервале частот, $\omega_j, \gamma_j, \delta_j$ – собственная частота, коэффициент затухания, среднеквадратичное отклонение переменной резонансной частоты для j -го осциллятора, соответственно, S_j – интенсивность j -го оптического возбуждения, x – переменная частота осциллятора. Ширина полосы определяется не только γ_j (как в классическом дисперсионном уравнении для кристаллов), но и σ_j . Вследствие этого полоса дополнительно уширяется. В случае же $\sigma_j \rightarrow 0$ уравнение (1) переходит в классическое, что соответствует упорядоченной структуре вещества. Таким образом, данная модель может с успехом описывать как стеклообразные, так и кристаллические материалы.

Метод дисперсионного анализа

Для восстановления спектра диэлектрической проницаемости из экспериментального спектра отражения $R(\omega)$ или пропускания $\tau(\omega)$ в работе используется модель свертки (1). В данной модели каждый осциллятор, входящий в расчетный спектр, характеризуется набором собственных параметров $\omega_{0j}, S_j, \sigma_j, \gamma_j$, и задача вычисления спектра отражения $R(\omega)$ или пропускания $\tau(\omega)$ сводится к подбору параметров значений $\omega_{0j}, S_j, \sigma_j, \gamma_j$ каждого осциллятора, таких, чтобы, согласно уравнению модели

свертки (1) и формулам Френеля, спектры отражения $R(\omega)$ или пропускания $\tau(\omega)$ были наиболее близки к экспериментальному.

Отсюда вытекают две задачи, решение которых и представляет наибольшую трудность: вычисление интеграла свертки и задача минимизации отклонения расчетного спектра от экспериментального. Вычисление интеграла свертки (1) является сложной математической задачей, не имеющей аналитического решения.

Задача минимизации отклонения расчетного спектра от экспериментального

Алгоритм минимизации отклонений расчетного спектра отражения от экспериментального

Процедура любой версии дисперсионного анализа должна включать два основных алгоритма, один из которых обеспечивает вычисление модельных спектров оптических постоянных (и далее через них – спектры отражения $R(\omega)$ или пропускания $\tau(\omega)$) с помощью выбранной модели диэлектрической проницаемости по значениям ее параметров. Ключевой задачей этого алгоритма в случае модели свертки (1) является вычисление интеграла, который без дополнительных упрощений не имеет аналитического решения, решается численно и имеет следующий вид:

$$I(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left[-(x - \omega_0)^2 / 2\delta^2\right]}{x^2 - \omega^2 - i\gamma\omega} dx.$$

Для вычисления интеграл можно представить в виде суммы двух интегралов вероятности от комплексного аргумента z .

$$I(\omega) = \frac{\pi}{2i\sqrt{\omega^2 - i\gamma\omega}} \left[\frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-t^2)}{z_1 - t} dt + \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-t^2)}{z_2 - t} dt \right].$$

Комплексный аргумент z , имеет следующий вид:

$$z_{1,2} = \frac{\sqrt{\omega^2 - i\gamma\omega}}{\sqrt{2\delta}} \pm \frac{\omega_0}{\sqrt{2\delta}}, \quad \text{Im}(z_{1,2}) > 0.$$

В программе А.М. Ефимова [4, 5] интеграл свертки вычислялся с помощью одного из трех возможных в данном случае методов прикладной математики, выбор которого осуществлялся в зависимости от соотношения численных значений параметров, определяющих ширину полосы в спектре, т.е. от величины комплексного аргумента z .

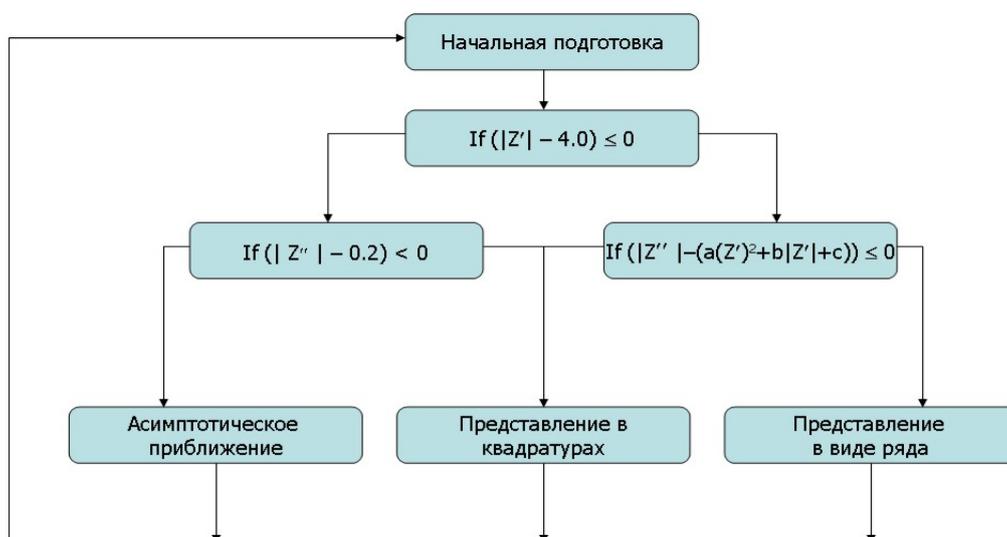


Рис. 1. Блок-схема нахождения пути численного интегрирования по значению комплексного аргумента z

В результате уровень сложности вычисления модельных спектров существенно превосходил тот, который требовался ранее при использовании известных моделей для кристаллов. Центральной задачей докладываемого этапа исследований было переформулирование этого сложного алгоритма в терминах языка программирования C++ и обеспечение управления процедурой вычислений с помощью современного Windows-ориентированного интерфейса.

Автором доклада было реализовано следующее:

- непосредственно написан алгоритм вычисления модельных спектров оптических постоянных (и далее через них – спектра отражения или поглощения);
- по сравнению с прежней программой все этапы подгонки визуализированы;
- добавлена возможность изменения параметров при подгонке как каждого осциллятора, так и параметров в целом;
- написан вывод результатов, а также возможность создавать файлы проекта с использованием программного интерфейса.

Апробация реализованного алгоритма

Работоспособность реализованного алгоритма вычисления модельных спектров оптических постоянных с помощью параметров модели свертки (1) была первоначально опробована на примере спектра отражения одного из силикатных стекол системы $\text{Na}_2\text{O-SiO}_2$. Было показано, что значения оптических постоянных этого стекла, вычисляемые по заданным параметрам модели диэлектрической проницаемости с помощью реализованного алгоритма, практически не отличаются от получаемых с помощью прежней программы А.М. Ефимова [4, 5] для операционной системы MS DOS.

Как следует из вышеизложенного, другим необходимым алгоритмом процедуры дисперсионного анализа является алгоритм минимизации отклонений расчетного спектра от экспериментального (см. статью Е.С. Постникова в настоящем сборнике). Рабочий вариант программы, включающий оба реализованных алгоритма, тестировался на примере обработки не анализировавшихся ранее экспериментальных ИК спектров отражения боратных стекол.

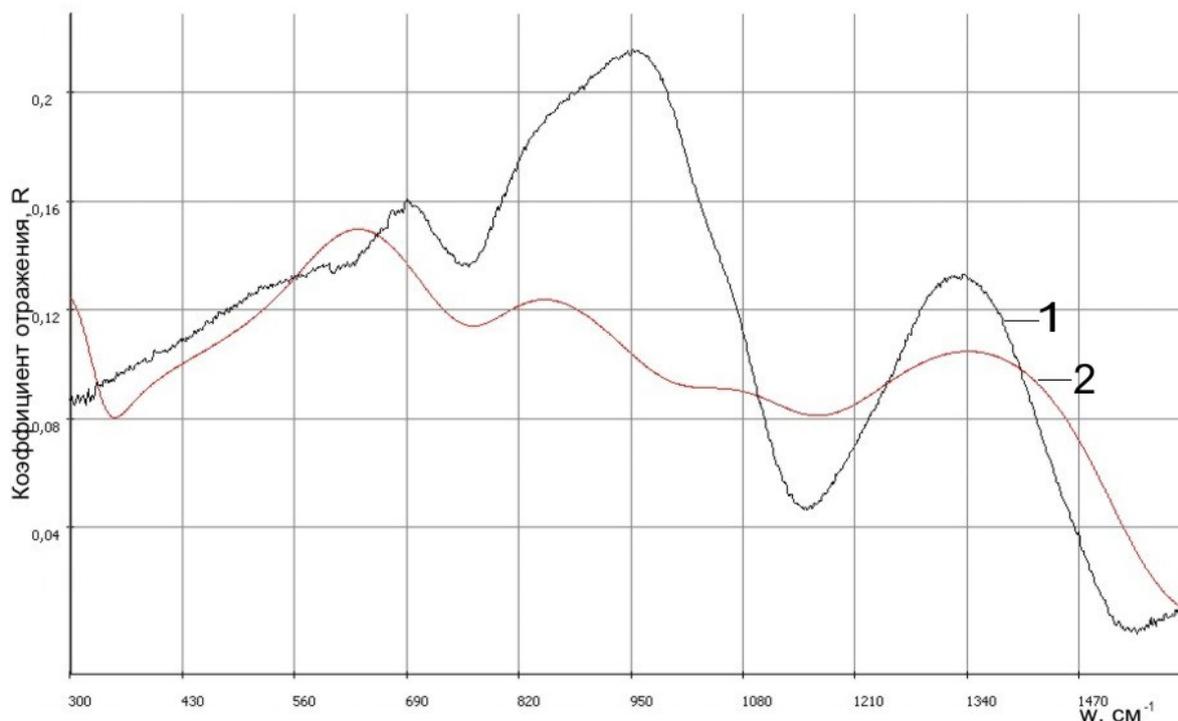


Рис. 2. Спектр отражения (кривая 2), построенный по начальным параметрам, вручную установленным пользователем, и экспериментальный спектр отражения (кривая 1)

Выбор боратных стекол в качестве объектов исследования был обусловлен тем, что новейшие высокопреломляющие стекла, используемые ведущими фирмами в элементах оптоинформатики и оптоэлектроники (например, стекла японских фирм Ohara, Hoya, Sumita и Hikari, формируемые низкотемпературной прессовкой) – это, как правило, именно боратные стекла. Поэтому обеспечение возможности надежного расчета их оптических постоянных является актуальной задачей. Выявление набора частот и возможных пределов значений остальных параметров для осцилляторов, формирующих типичные спектры класса боратных стекол, может служить базисом для быстрого решения этой задачи для каждого конкретного промышленного стекла этого типа.

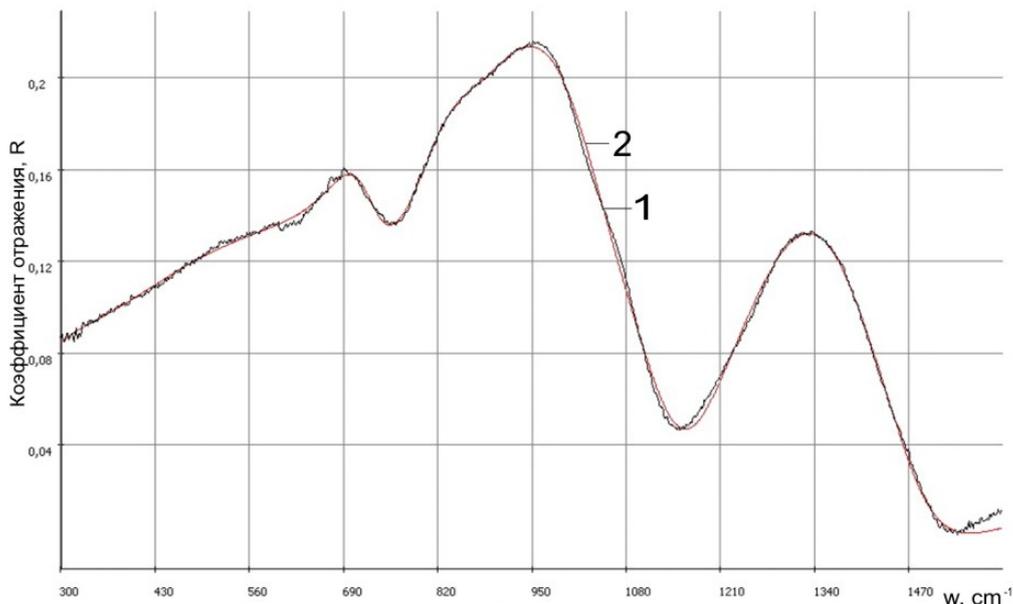


Рис. 3. График спектра отражения, подогнанного с использованием написанной программы. Кривые 1 и 2 практически не различаются, что говорит о правильности работы алгоритма

Соответственно, на рис. 3 приведены графики постоянных данного спектра, с помощью которых формируется спектр отражения.

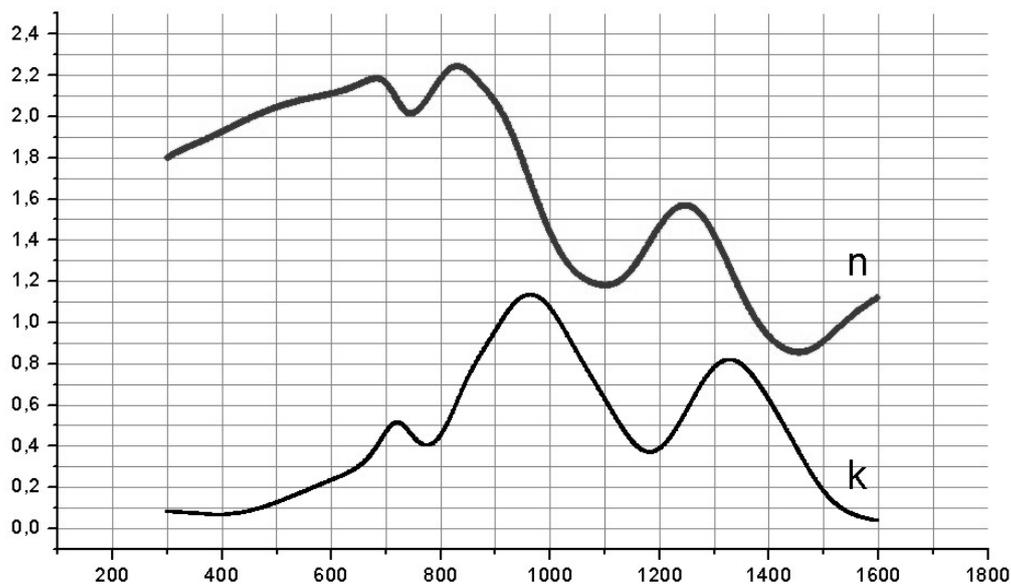


Рис. 4. Спектры показателя преломления и показателя поглощения

Параметры осцилляторов (в относительных единицах, как они и представлены в программе), формирующих спектры на рис. 3 и 4, отображены в таблице.

$\omega_j, \text{см}^{-1}$	$\frac{S_j}{\omega_j^2}$	$\frac{\gamma_j}{\omega_j}$	$\frac{\sigma_j}{\omega_j}$
323,189	0,048109	0,012745	0,185509
648,150	0,230006	0,111804	0,150969
716,490	0,145821	0,114345	0,014226
844,528	0,057473	0,055728	0,026750
935,103	0,616375	0,084673	0,063746
1087,64	0,088764	0,031882	0,057024
1298,13	0,169834	0,021916	0,045473
1413,46	0,044842	0,030133	0,040261

Таблица. Спектроскопические параметры осцилляторов

Заключение

Автором проанализирован вариант реализации алгоритма вычисления интеграла свертки в существующей программе дисперсионного анализа для MS-DOS. Реализован алгоритм вычисления интеграла свертки на языке высокого уровня C++ для среды Windows. Проведена апробация реализованного алгоритма в ходе создания Windows-ориентированной пользовательской программы метода дисперсионного анализа оптических спектров стеклообразных материалов в широком интервале частот. Продемонстрированы высокая скорость и наглядность работы программы при подгонке спектров боратных стекол. Программа дисперсионного анализа, использующая разработанный алгоритм, может успешно использоваться для вычисления спектров оптических постоянных и параметров осцилляторов, формирующих ИК спектры стекол различных марок.

Литература

1. W.G. Spitzer, D.A. Kleinman, Infrared lattice bands of quartz. Phys. Rev. 1961. V. 121. N5. P. 1324–1335.
2. D.W. Berreman, F.D. Unterwald. Adjusting poles and zeros of dielectric dispersion to fit reststrahlen of PrCl_3 . Phys. Rev. 1968. V. 174. N3. P. 791–799.
3. Ефимов А.М., Хитров В.Н. Аналитические формулы для описания дисперсии показателя преломления с учетом непрерывного характера спектра поглощения. // Физ. и хим. стекла. 1979. Т. 5. № 5. С. 583–588.
4. Ефимов А.М., Макарова Е.Г. Стеклообразное состояние вещества и теория дисперсии. / Стеклообразное состояние. Труды VII Всесоюз. совещ. (Л., 1981). Л.: Наука, 1983. С. 165–171.
5. Ефимов А.М., Макарова Е.Г. Дисперсионное уравнение для комплексной диэлектрической проницаемости стеклообразных веществ и дисперсионный анализ их спектров отражения. //Физ. и хим. стекла. 1985. Т. 11. № 4. С. 385–401.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРА КОМПЛЕКСНОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ СТЕКЛООБРАЗНЫХ МАТЕРИАЛОВ. РЕАЛИЗАЦИЯ И АПРОБАЦИЯ АЛГОРИТМА МИНИМИЗАЦИИ ОТКЛОНЕНИЙ МОДЕЛЬНОГО СПЕКТРА ОТ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО

Е.С. Постников

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор А.М. Ефимов

В рамках решения более широкой проблемы создания Windows-ориентированной пользовательской программы метода дисперсионного анализа оптических спектров стеклообразных материалов исследован и реализован на языке программирования C++ эффективный алгоритм минимизации отклонений расчетного спектра отражения от экспериментального. Рабочий вариант программы дисперсионного анализа, использующий реализованный алгоритм, успешно опробован на примере фундаментальных спектров отражения фосфатных стекол.

Введение

Оптические постоянные вещества полностью описывают его оптические свойства, поэтому нередко возникает потребность знать спектр этих постоянных на определенном интервале частот. Имея экспериментальный спектр отражения (пропускания), мы можем с помощью аналитической модели взаимодействия света с веществом рассчитать оптические постоянные этого вещества методом дисперсионного анализа. В данной работе в качестве такой модели используется разработанная А.М. Ефимовым модель свертки для стеклообразных материалов. Компьютерная программа дисперсионного анализа спектров отражения стеклообразных материалов была впервые создана еще в 1983 г. А.М. Ефимовым с сотрудниками. Настоящее сообщение посвящено одному из этапов создания рабочей версии новой Windows-ориентированной программы дисперсионного анализа спектров стекол с использованием современного языка программирования C++. Необходимость разработки новой программы обусловлена тем, что использование в прежней программе языка ФОРТРАН для системы MS DOS существенно ограничивает возможности ее применения в современных условиях широким кругом пользователей.

Всю задачу моделирования спектра комплексной диэлектрической проницаемости можно разделить на две части: вычисление интеграла свертки и минимизацию отклонения расчетного спектра от экспериментального. Задача минимизации отклонения расчетного спектра от экспериментального является типичной задачей оптимизации целевой функции. Эффективность выбранного метода оптимизации во многом определяет скорость достижения и качество конечного результата, а также аппаратные затраты ЭВМ, что особенно ярко проявляется в случае использования модели свертки. В силу особенностей интеграла свертки целевая функция очень неудобна для оптимизации, и для нее пригодны только некоторые прямые методы (методы спуска) нулевого порядка. Применяемый основной метод оптимизации, использованный в [1, 2] и охарактеризованный ранее авторами [3] как «самосогласованный поиск с переменным шагом по параметрам», представляет собой модифицированный метод циклического покоординатного спуска с учетом характерных для этого интеграла особенностей.

Формализм взаимодействия электромагнитного излучения с веществом

Оптические постоянные

К оптическим постоянным относятся показатель преломления n и показатель поглощения k , являющиеся реальной и мнимой частью, соответственно, комплексного

показателя преломления $\kappa(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$. Величина $\mathfrak{E}(\omega) = \kappa^2(\omega)$ называется комплексной диэлектрической проницаемостью. Поэтому оптические постоянные можно определить и как реальную и мнимую части комплексной диэлектрической проницаемости $\mathfrak{E}(\omega) = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega)$. Между оптическими постоянными существует связь: $\varepsilon'(\omega) = n^2(\omega) - k^2(\omega)$, $\varepsilon''(\omega) = 2n(\omega)k(\omega)$.

Модель свертки для комплексной диэлектрической проницаемости

Эта модель, учитывающая влияние случайного разупорядочения структуры вещества на вид функции $\mathfrak{E}(\omega)$, представляет собой свертку лоренцевой и гауссовой функций:

$$\mathfrak{E}(\omega) = \varepsilon_{\infty} + \sum_{j=1}^J \frac{S_j}{\sqrt{2\pi}\sigma_j} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp\left[-(x - \omega_{0j})^2 / 2\sigma_j^2\right]}{x^2 - \omega^2 - i\gamma_j\omega} dx. \quad (1)$$

Здесь x – переменная резонансная частота, ω_{0j} – центральная частота для расщепления j -го осциллятора, J – число осцилляторов, σ_j – среднеквадратичное отклонение переменной резонансной частоты, S_j – интенсивность, γ_j – коэффициент затухания. Измерения спектра производятся в ограниченном конечном диапазоне частот, поэтому вводится слагаемое ε_{∞} (высокочастотная диэлектрическая проницаемость), учитывающее вклад высокочастотных компонент спектра. В первом приближении S_j и γ_j не зависят от x . Ширина полосы определяется не только γ_j (как в классическом дисперсионном уравнении), но и σ_j . Следовательно, полоса дополнительно уширяется. В случае же $\sigma_j \rightarrow 0$ уравнение (1) переходит в классическое, что соответствует упорядоченной структуре вещества. Таким образом, данная модель может с успехом описывать как стеклообразные материалы, так и кристаллические.

Метод дисперсионного анализа

Метод дисперсионного анализа служит для вычисления спектра оптических постоянных и значений спектроскопических параметров полос из экспериментального спектра отражения $R(\omega)$ или пропускания $\tau(\omega)$. Спектроскопические параметры полос – функции состава и структуры вещества. В данной работе в качестве выбранной модели взаимодействия света с веществом используется модель свертки (1). В рамках этой модели каждый осциллятор характеризуется четырьмя видами спектроскопических параметров ω_{0j} , S_j , σ_j , γ_j . Процедура дисперсионного анализа сводится к подбору таких значений ω_{0j} , S_j , σ_j , γ_j , чтобы вычисляемый по ним, согласно (1) и формулам Френеля, спектр $R_{расч}(\omega)$ или $\tau_{расч}(\omega)$ был наиболее близок к экспериментальному. Отсюда логически вытекают две задачи, решение которых и представляет наибольшую трудность: вычисление интеграла свертки и задача минимизации отклонения расчетного спектра от экспериментального. Вычисление интеграла свертки (1) является сложной математической задачей, не имеющей аналитического решения.

Алгоритм минимизации отклонений расчетного спектра отражения от экспериментального

Задача минимизации отклонения расчетного спектра от экспериментального

Под этой задачей подразумевается не только осуществление минимизации путем подбора подходящих значений ω_{0j} , S_j , σ_j , γ_j , характеризующих данный материал, но и выбор процедуры такого подбора, обеспечивающей лучшую скорость, эффектив-

ность и наименьшие затраты ресурсов ЭВМ. Полное совпадение расчетного спектра с экспериментальным невозможно, что обусловлено множеством причин: приближениями выбранной модели, погрешностями измерений, малой информативностью экспериментального спектра и прочими. Поэтому стоит задача отыскания лишь наилучшего, оптимального решения. Математическая задача оптимизации состоит в том, чтобы минимизировать целевую функцию с учетом ограничений на управляемые переменные. Управляемыми переменными в нашей работе являются спектроскопические параметры, а также высокочастотная диэлектрическая проницаемость ϵ_∞ . Ограничения на них накладываются исходя из общего физического смысла этих величин. Целевой функцией должна быть такая функция, значение которой характеризовало бы близость расчетного спектра к экспериментальному.

Такой целевой функцией является функция невязки

$$Q(\{a_m\}_1^M) = \|R_{расч}(\omega; \{a_m\}_1^M) - R_{эксп}(\omega)\|,$$

где a_m – управляющая переменная, M – количество управляющих переменных, $\|\varphi(\omega)\|$ – та или иная норма $\varphi(\omega)$. В работе в качестве функции невязки бралась функция

$$Q(\{a_m\}_1^M) = \sqrt{\frac{1}{b-a} \int_a^b [R_{расч}(\omega; \{a_m\}_1^M) - R_{эксп}(\omega)]^2 d\omega}. \quad (2)$$

Достоинства такого выбора невязки – уменьшение влияния случайных ошибок измерения на подгонку, соизмеримость с $R(\omega)$. Чем меньше значение функции невязки, тем более близок расчетный спектр к экспериментальному. Именно поэтому процедура оптимизации также называется процедурой минимизации функции невязки.

Минимизация функции невязки

Конечный вид невязки (2) с учетом формул Френеля и функции (1) является очень неудобным для оптимизации. Основные причины, усложняющие оптимизацию и ограничивающие круг доступных методов – сильная нелинейность конечного вида невязки, отсутствие аналитического решения (1), множество параметров подгонки (например, для 6 осцилляторов их будет 25), наличие локальных минимумов, работа со спектром не $\mathcal{E}(\omega)$, а коэффициента отражения (пропускания), большие диапазоны допустимых значений параметров, наличие различных погрешностей.

С учетом этого алгоритм минимизации производится модифицированным методом циклического покоординатного спуска. Осуществляется поочередное изменение каждого параметра $a_m = a_m + da_m$ при фиксированных остальных параметрах в соответствии с указанным для каждого параметра шагом da_m . При уменьшении значения невязки изменения параметра остаются в силе, в противном же случае производится уменьшение шага или изменение его знака на противоположный. Изменения параметров целесообразно продолжать циклически до тех пор, пока значение функции невязки не достигнет приемлемой величины или его изменение будет слишком слабым. В последнем случае значение невязки может быть далеким от оптимальной величины. Это самая главная проблема в процедуре минимизации невязки – функция попадает в один из своих локальных минимумов.

Реализация процедуры минимизации в программе

Если самостоятельно программа не может выйти из локального минимума, то используются такие средства, как ручная корректировка параметров, установка запретов на изменение конкретных параметров и смена режимов алгоритма минимизации. Под последними подразумеваются: режим с подгонкой высокочастотной составляющей или

без нее, режим общей подгонки (a и b в (2) берутся по всему измеренному спектру) или режим поосциляторной подгонки (a и b в (2) выбираются для параметров каждого осциллятора), режим с изменением шагов параметров или нет, введение относительных весов точек.

Как видно, роль пользователя в процедуре минимизации довольно велика. Его вмешательство (корректировка оперируемых алгоритмом величин и смена режимов) наравне с алгоритмом минимизации определяет конечный результат и время подгонки. Существует несколько ситуаций, где оно необходимо, например, начальная установка значений параметров осцилляторов, попадание функции в локальный минимум.

Начальная установка значений параметров осцилляторов осуществляется «на глаз» и является отправным пунктом для начала процедуры минимизации. Здесь не последнюю роль играет опыт работы пользователя со спектрами, позволяющий наиболее точно определить параметры и заметить слабые осцилляторы.

Таким образом, процедура минимизации состоит из машинного алгоритма минимизации и ручного вмешательства пользователя через интерфейс программы.

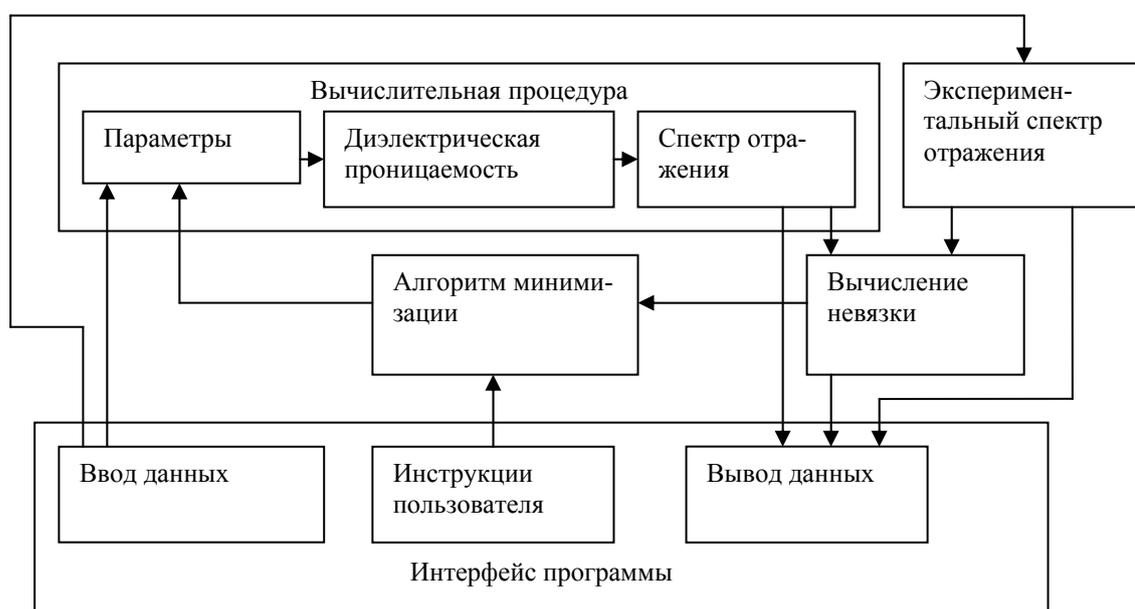


Рис. 1. Общая структура программы ЭВМ

Для оценки качества подгонки и ее корректировки, а также для начальной установки параметров в программе предусмотрены средства вывода данных – вывод значения функции невязки и графическое отображение экспериментального и расчетного спектров.

Апробация реализованного алгоритма

Работоспособность реализованного алгоритма минимизации отклонений расчетного спектра отражения от экспериментального была первоначально опробована на примере спектра отражения одного из силикатных стекол системы $\text{Na}_2\text{O}-\text{SiO}_2$. Было показано, что достигаемая эффективность минимизации отклонений не уступает той, которая обеспечивалась прежней программой А.М. Ефимова [1,2] для операционной системы MS DOS.

Рабочий вариант программы тестировался автором доклада на примере обработки не анализировавшихся ранее экспериментальных ИК-спектров отражения фосфатных стекол.

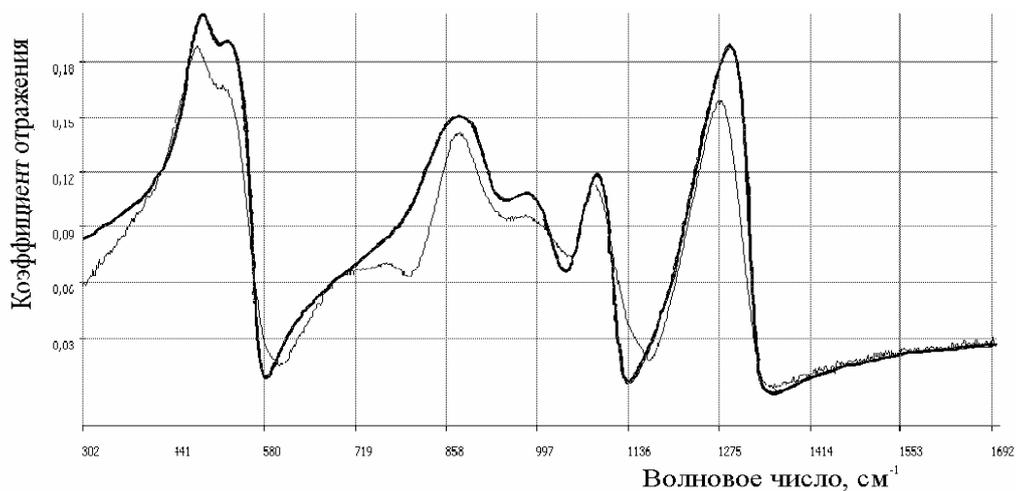


Рис. 2. Начало подгонки. Функции невязки имеет значение 0,00014

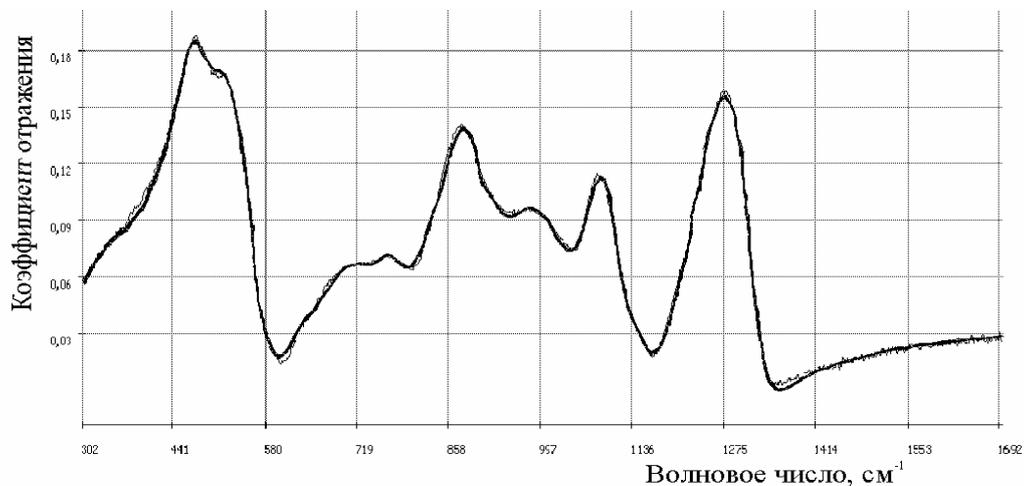


Рис. 3. Конечная стадия подгонки. Невязка принимает значение 0,0000082

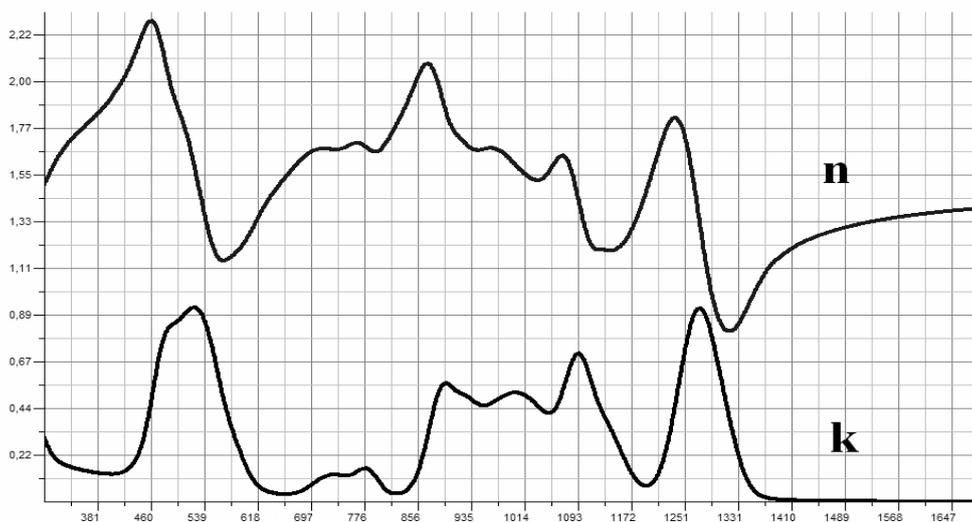


Рис. 4. Спектры показателя преломления n и показателя поглощения k

Выбор фосфатных стекол в качестве объектов исследования был обусловлен тем, что промышленные стекла, используемые в качестве активных сред современных лазеров – это, как правило, именно стекла на фосфатной основе [4, 5]. Поэтому обеспечение воз-

возможности надежного расчета их оптических постоянных является актуальной задачей. Выявление набора частот и возможных пределов значений остальных параметров для осцилляторов, формирующих типичные спектры класса фосфатных стекол, может служить базисом для быстрого решения этой задачи для каждого конкретного лазерного стекла.

На рис. 2 показан спектр отражения (жирная линия), построенный по начальным параметрам, вручную установленным пользователем, и экспериментальный спектр отражения (тонкая линия). График спектра отражения, подогнанного с помощью процедуры минимизации, показан на рис. 3, а на рис. 4 изображены соответствующие ему спектры оптических постоянных.

Параметры осцилляторов, формирующих спектры на рис. 3 и на рис. 4, отображены в таблице.

$\omega_j, \text{см}^{-1}$	$\frac{S_j}{\omega_j^2}$	$\frac{\gamma_j}{\omega_j}$	$\frac{\sigma_j}{\omega_j}$
346,612	0,153549	0,020704	0,2172
475,013	0,1389	0,054297	0,023653
518,583	0,332019	0,052385	0,052205
585,988	0,009052	0,006433	0,028079
729,129	0,023506	0,005741	0,037014
780,798	0,015848	0,005565	0,021547
888,044	0,053809	0,005242	0,019543
924,069	0,016369	0,005414	0,016732
995,445	0,171021	0,005664	0,063
1087,74	0,036266	0,006867	0,015419
1129,84	0,032483	0,005095	0,026635
1261,11	0,083778	0,006208	0,017905
1307,16	0,014533	0,006284	0,017216

Таблица. Спектроскопические параметры осцилляторов

Заключение

Рассмотрена проблематика минимизации отклонения расчетного спектра отражения от экспериментального в методе дисперсионного анализа с учетом особенностей специальной сложной модели комплексной диэлектрической проницаемости (модели свертки). Исследован и реализован на языке программирования C++ алгоритм минимизации отклонения расчетного спектра отражения от экспериментального.

Нестандартный характер решенной задачи определялся требованием обеспечить высокую скорость этого алгоритма при вычислении спектра с помощью модели свертки. Проведена апробация реализованного алгоритма в ходе создания Windows-ориентированной пользовательской программы метода дисперсионного анализа оптических спектров стекол в широком интервале частот.

Эффективность данного алгоритма подтверждена достижением значений функции невязки ниже погрешности эксперимента при подгонке спектров фосфатных стекол. Найдены значения параметров полос поглощения, формирующих исследованные спектры, а также вычислены спектры оптических постоянных.

Результаты показывают эффективность использования разрабатываемой программы в качестве инструмента вычисления спектров оптических постоянных стеклообразных материалов.

Литература

1. Ефимов А.М., Макарова Е.Г. Стеклообразное состояние вещества и теория дисперсии. / Стеклообразное состояние. Труды VII Всесоюзн. совещ. (Л., 1981). Л.: Наука, 1983. С. 165–171.
2. Ефимов А.М., Макарова Е.Г. Дисперсионное уравнение для комплексной диэлектрической проницаемости стеклообразных веществ и дисперсионный анализ их спектров отражения. //Физ. и хим. стекла. 1985. Т. 11. № 4. С. 385–401.
3. L.R. Brantley, G. Andermann, P. Sakamoto. A self-bracketing search technique for the classical dispersion analysis of infrared reflectance data. Spectr. Lett. 1971. V. 3–4. P. 47–56.
4. V.I. Arbuzov, Yu.K. Fyodorov, S.G. Lunter, S.I. Nikitina, V.S. Shashkin, A.V. Shashkin, A.V. Charukhchev, V.S. Sirazetdinov. Neodymium phosphate glasses for high-energy and high-pick-power lasers. Glass Sci. Technol. (Proc. 7th Internat. Otto Schott Coll.). 2002. V. 75C2. P. 209–214.
5. C.A. Click, W.J. Rechman, R.K. Brow, P.E. Ehrmann, T.I. Suratwala, J.H. Campbell. Influence of hydroxyl contamination on neodymium fluorescence lifetime in potassium–magnesium alumino–metaphosphate glasses. Glass Sci. Technol. (Proc. 7th Internat. Otto Schott Coll.). 2002. V. 75C2. P. 215–220.

СПЕКТРОЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ИЗЛУЧЕНИЯ, ОТРАЖЕННОГО ОТ УЧАСТКА СРЕДЫ С ДИНАМИЧЕСКОЙ НЕОДНОРОДНОСТЬЮ СФЕРИЧЕСКОЙ ФОРМЫ

Ал.С. Киселев, Ан.С. Киселев

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор Н.Н. Розанов

В сообщении рассматриваются релятивистские эффекты первого порядка при распространении излучения через прозрачную среду, включающую неоднородность скорости ее движения сферической формы ограниченных геометрических размеров. Показано, что прямолинейно распространяющийся объект, представляющий собой неоднородность, способствует отражению электромагнитного излучения от его поверхности. Изучена аналитическая теория и продемонстрированы результаты численного моделирования эффекта отражения от сферических частиц различных размеров при различных состояниях поляризации падающего излучения. Выведено выражение для доплеровской поправки частоты излучения при его отражении от такого рода объектов.

Введение

Теория электромагнитных явлений в движущихся сплошных средах, основывающаяся на дифференциальных уравнениях Максвелла и материальных уравнениях Минковского [1, 2], описывает целый ряд эффектов, но количество выполненных экспериментов невелико. Исследования ограничивались случаем пространственно однородной скорости движения среды, влияние неоднородности движения на распространение оптического излучения рассмотрено недостаточно полно. Еще в 1818 г. Френель на основе теории частичного увлечения эфира движущейся средой получил выражение для показателя преломления n в этой среде [3]. Это явление экспериментально подтверждено Физо в 1851 г. Интересно, что, несмотря на отказ от теории эфира, в дальнейшем формула Френеля оказалась верной и была выведена в частной теории относительности.

В работах [4–7] рассмотрены релятивистское рассеяние и дифракция электромагнитного излучения на неоднородностях скорости движения среды для частиц цилиндрической и сферической формы различных размеров. В случае неоднородности цилиндрической формы получены аналитические выражения для напряженностей рассеянного электромагнитного поля, а для случая сферической частицы не удалось получить решения задачи в явной форме, поэтому продемонстрировано влияние неоднородности скорости движения среды сферической формы на результат рассеяния световой энергии численно.

В данном сообщении мы рассмотрим релятивистские эффекты, связанные с отражением электромагнитного излучения от поверхности движущейся неоднородности, окруженной средой с теми же электрической и магнитной постоянными, что и у самой неоднородности. Также описаны соотношения для доплеровской поправки частоты оптического излучения, сформировавшейся вследствие отражения света от поверхности неоднородности скорости движения среды.

Подобный эффект описывался ранее при рассмотрении отражения от поверхности неоднородности, не ограниченной по размеру в поперечном направлении относительно волнового вектора падающего излучения [8]. В данном сообщении в рассмотрение включены дифракционные эффекты, связанные с конечными размерами неоднородности скорости движения среды в поперечных направлениях по отношению к распространению падающего излучения в принятой системе координат. В используемой модели мы ограничимся рассмотрением случая однонаправленного распространения рассматриваемого объекта и падающей волны. Это связано с тем, что продольные составляющие вектора скорости движения объекта по отношению с волновым вектором падающего излучения приводят к доплеровскому смещению частоты первого порядка малости по параметру v/c (v, c – соответственно, скорость движения объекта и ско-

рость света в вакууме), а ортогональные компоненты того же вектора – к смещению второго порядка малости по тому же параметру [9], что в данной работе не рассматривается.

Общие соотношения

Как уже отмечалось ранее, в качестве исходных соотношений будем использовать уравнения Максвелла в дифференциальной форме (1) и приближенные с точностью до первого порядка по параметру v/c материальные уравнения Минковского (2) [10]:

$$\begin{aligned} \text{rot}\mathbf{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \text{div}\mathbf{B} = 0, \\ \text{rot}\mathbf{H} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad \text{div}\mathbf{D} = 0, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \frac{\varepsilon_0 \mu_0 - 1}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{H}] + \delta \mathbf{D}, \quad \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} + \frac{\varepsilon_0 \mu_0 - 1}{c} [\mathbf{E} \times \mathbf{v}] + \delta \mathbf{B}, \quad (2)$$

где \mathbf{E} , \mathbf{H} – напряженности электрического и магнитного полей; \mathbf{D} , \mathbf{B} – электрическая и магнитная индукции; ε_0 и μ_0 – диэлектрическая и магнитная проницаемости однородной неподвижной среды (при $\mathbf{v} = 0$); t – время. Величины $\delta \mathbf{D}$ и $\delta \mathbf{B}$, соответственно, описывают динамооптические и гиромангнитные явления, а также другие возможные малые возмущения среды. Эти величины характеризуют нерелятивистские эффекты, которые при условии малости скорости v по отношению к скорости света в вакууме c вызовут незначительное по сравнению с релятивистскими возмущение среды. Влияние этих эффектов в дальнейшем не рассматривается.

В случае малых скоростей движения среды v из уравнений (1) и (2) получаем волновые уравнения для \mathbf{D} и \mathbf{B} :

$$\square \mathbf{D} = \mathbf{f}_D, \quad \square \mathbf{B} = \mathbf{f}_B, \quad (3)$$

где

$$\square = \Delta - \frac{\varepsilon_0 \mu_0}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}, \quad \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

$$\mathbf{f}_D = -\frac{\varepsilon_0 \mu_0 - 1}{c} \left[\text{rot rot} [\mathbf{v} \times \mathbf{H}] - \frac{\varepsilon_0}{c} \frac{\partial}{\partial t} \text{rot} [\mathbf{E} \times \mathbf{v}] \right], \quad (4)$$

$$\mathbf{f}_B = -\frac{\varepsilon_0 \mu_0 - 1}{c} \left[\text{rot rot} [\mathbf{E} \times \mathbf{v}] + \frac{\mu_0}{c} \frac{\partial}{\partial t} \text{rot} [\mathbf{v} \times \mathbf{H}] \right]. \quad (5)$$

Для решения (3) воспользуемся теорией возмущения и положим, что $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_{omp} + \dots$ и $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_{omp} + \dots$, где \mathbf{E}_{omp} , \mathbf{H}_{omp} – напряженности поля отраженной от поверхности неоднородности волны. В нулевом порядке по параметру v/c теории возмущений решение \mathbf{E}_0 и \mathbf{H}_0 считаем известным, а излучение отраженной волны находится из первого порядка теории возмущений решением (3). Тогда запишем:

$$\square \mathbf{E}_{omp} = \mathbf{f}_E, \quad \square \mathbf{H}_{omp} = \mathbf{f}_H. \quad (6)$$

Здесь величины \mathbf{f}_E и \mathbf{f}_H определяются из выражений

$$\mathbf{f}_E = -\frac{\varepsilon_0 \mu_0 - 1}{c \varepsilon_0} \left[\text{grad div} [\mathbf{v} \times \mathbf{H}_0] - \frac{\varepsilon_0 \mu_0}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} [\mathbf{v} \times \mathbf{H}_0] - \frac{\varepsilon_0}{c} \frac{\partial}{\partial t} \text{rot} [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{v}] \right], \quad (7)$$

$$\mathbf{f}_H = -\frac{\varepsilon_0 \mu_0 - 1}{c \mu_0} \left[\text{grad div} [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{v}] - \frac{\varepsilon_0 \mu_0}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{v}] + \frac{\mu_0}{c} \frac{\partial}{\partial t} \text{rot} [\mathbf{v} \times \mathbf{H}_0] \right]. \quad (8)$$

Решение уравнения (6) дается в форме запаздывающих потенциалов [11]:

$$\mathbf{E}_{omp} = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\mathbf{f}_E(t + R/c)}{R} dV, \quad (9)$$

$$\mathbf{H}_{omp} = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{\mathbf{f}_H(t + R/c)}{R} dV. \quad (10)$$

В выражениях (9) и (10) интегрирование ведется по объему движущейся области неоднородности. Здесь R – расстояние от объема интегрирования dV до точки непосредственной регистрации поля отраженной волны. Обозначим через \mathbf{R}_0 радиус-вектор из начала координат в точку наблюдения, так что $\mathbf{R}_0 = \mathbf{R} + \mathbf{v}t + \mathbf{r}$, где \mathbf{R} – радиус-вектор от объема интегрирования в точку наблюдения, \mathbf{v} – вектор скорости движения рассматриваемого объекта, \mathbf{r} – радиус-вектор объема интегрирования. На большом расстоянии от области неоднородности скорости движения R в (9) и (10) можно заменить на R_0 . Тогда в случае отражающей поверхности сферической формы указанные интегралы преобразуются к виду:

$$\mathbf{E}_{omp} = -\frac{1}{4\pi R_0} \int \mathbf{f}_E \left(t + \frac{R_0}{c} - \frac{\mathbf{n}\mathbf{r}}{c} - \frac{v}{c}t \right) dV, \quad (11)$$

$$\mathbf{H}_{omp} = -\frac{1}{4\pi R_0} \int \mathbf{f}_H \left(t + \frac{R_0}{c} - \frac{\mathbf{n}\mathbf{r}}{c} - \frac{v}{c}t \right) dV, \quad (12)$$

где $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ – орт в направлении вектора наблюдения.

Падающую на поверхность неоднородности скорости движения среды плоскую монохроматическую волну следует записать в виде:

$$\mathbf{E}_0 = \exp(-i\omega t + ikz)(b_1; b_2; 0), \quad (13)$$

$$\mathbf{H}_0 = \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}} \exp(-i\omega t + ikz)(b_2; -b_1; 0), \quad (14)$$

где ω – частота излучения; $k = 2\pi/\lambda = n\omega/c$ – волновое число (n – показатель преломления однородной неподвижной среды; λ – длина волны излучения); b_1, b_2 – параметры, характеризующие поляризацию падающего излучения (в общем виде – комплексные функции).

Ввиду определенной геометрии и конечных геометрических размеров движущейся неоднородности вектор скорости \mathbf{v} в волновых уравнениях представляется в следующей форме:

$$\mathbf{v} = \Phi(x, y, z, t)(0, 0, v), \quad (15)$$

где $\Phi(x, y, z, t)$ – пространственно-временная функция роста.

Дальнейшие вычисления и расчеты целесообразно проводить только применительно к электрическому полю, поскольку для магнитного поля справедлива та же математика, за небольшой лишь разницей: напряженности магнитного и электрического полей связаны друг с другом посредством коэффициента пересчета [10]:

$$\varepsilon_0 \operatorname{Re}(\mathbf{E}_{omp})^2 = \mu_0 \operatorname{Re}(\mathbf{H}_{omp})^2. \quad (16)$$

Математическое моделирование

В данном разделе представлены результаты математического описания неоднородности скорости движения среды с определенным уточнением зависимости функции роста Φ от пространственных координат. Первая из них является случаем скачкооб-

разной формы функции роста (рис. 1а) [12], вторая – функция роста определяется выражением вида [13]:

$$\Phi_{\kappa} = \frac{1}{1 + \exp(-w\kappa)}, \quad \kappa = \{x, y, z - vt\}, \quad (17)$$

где v определяет крутизну подъема функции Φ (рис. 1, б). В частном случае (при $w \rightarrow \infty$) функция Φ_{κ} представляет собой ступенчатую функцию.

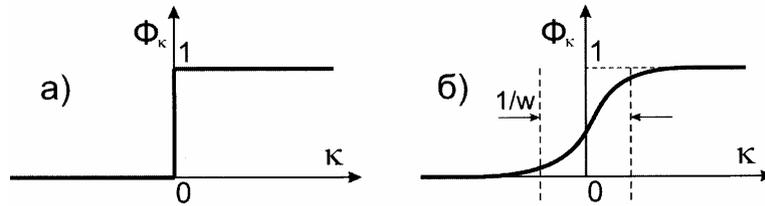


Рис. 1. Пространственно-временная функция роста Φ

При таких значениях нарастания скорости движения от пространственной координаты, для данного вида отражающей поверхности движущейся неоднородности решение (11) и (12) представляется тремя характерными ситуациями.

Первая из них заключается в том, что параметр w является малой величиной по отношению к величине волнового вектора падающей волны ($w \ll k$). При этом величины напряженности электрического и магнитного полей (в соответствии с (16)) являются ничтожно малыми и пропорциональны параметру $\exp(-\pi k/w)$. Поэтому данная ситуация не представляет теоретического и технологического интереса для дальнейшего ее рассмотрения. Чрезвычайная малость и такая зависимость отраженного излучения от пространственной координаты объясняется тем, что перепад скорости движения неоднородности среды и, соответственно, существенный скачок показателя преломления происходит на расстояниях, значительно превышающих длину волны излучения (в оптическом диапазоне длин волн). Поэтому поле очень слабо «чувствует» границы неоднородности. Однако при увеличении длины волны (переходим, например, от оптического диапазона к радиоволнам) ситуация существенным образом меняется, так как граница неоднородности становится сравнимой с длиной волны излучения.

Вторая ситуация описывает сравнимые значения параметров w и k ($w/k \approx 1$). В этом случае поле отраженной волны включает в себя пропорциональность величине $\text{csch}(\chi) = 1/\text{sh}(\chi)$ – гиперболический косеканс аргумента χ . Однако такая ситуация возможно только при таких значениях w , при которых границу неоднородности скорости движения среды можно считать резкой, т.е. ступенчатой функцией, описание которой захватывает третья характерная ситуация.

И, наконец, вариант, описанный несколько ранее, когда параметр $w \gg k$. Это отвечает резкой границе, результаты рассмотрения которой приводятся далее. В этом случае поле отраженной волны адекватно выражению (19).

Как уже отмечалось ранее, рассматриваемая неоднородность скорости движения среды имеет форму поверхности второго порядка, в частности, полусферы, поскольку влияние второй поверхности сферы (второй полусферы) на распределение интенсивности излучения в поле отраженной волны в данном сообщении не рассматривается. Далее, переходя от декартовой системы координат к системе сферических координат ($(x, y, z) \rightarrow (r, \theta, \varphi)$), функцию роста Φ необходимо представить в следующей форме:

$$\Phi(r, \theta, \varphi, t) = \begin{cases} 1, & \text{если } r \leq r_0 \\ 0, & \text{если } r > r_0 \end{cases}, \quad (18)$$

где r_0 – радиус движущейся сферической области неоднородности.

С учетом всего вышеизложенного и решением (11) и (12), поле отраженной волны E_{omp} будет определяться соотношением:

$$\mathbf{E}_{omp} = \frac{1}{8R_0} \frac{n^2 - 1}{n} \frac{v}{c} \exp \left[-i\omega t \left(1 - (n_z + 1) \frac{v}{c} \right) - ikR_0 \right] \{ \mathbf{e}_x A + \mathbf{e}_y B + \mathbf{e}_z C \}, \quad (19)$$

где параметры A , B , C численно находятся из следующих выражений:

$$\begin{aligned} A &= \int_0^{\pi/2} e^{-ikr_0(n_z+1)\cos\theta} \left[-2k \frac{n_x r_0^2}{\sqrt{n_x^2 + n_y^2}} J_1(\psi) \sin^2 \theta (2 + \sin^2 \theta) (b_1 n_x + b_2 n_y) + \right. \\ &+ \sin^3 \theta \left(b_1 \frac{n_x^2 - n_y^2}{n_x^2 + n_y^2} + b_2 \frac{2n_x n_y}{n_x^2 + n_y^2} \right) J_2(\psi) r_0 (1 + ikr_0 (n_z + 1) \cos \theta) - \\ &\left. - ikb_1 r_0^2 \sin^3 \theta \cos \theta (n_z + 1) J_0(\psi) + b_1 r_0 \sin \theta J_0(\psi) (\sin^2 \theta + 2 - 2ikr_0 \cos \theta) \right] d\theta. \\ B &= \int_0^{\pi/2} e^{-ikr_0(n_z+1)\cos\theta} \left[-2k \frac{n_y r_0^2}{\sqrt{n_x^2 + n_y^2}} J_1(\psi) \sin^2 \theta (2 + \sin^2 \theta) (b_1 n_x + b_2 n_y) - \right. \\ &- \sin^3 \theta \left(b_2 \frac{n_x^2 - n_y^2}{n_x^2 + n_y^2} - b_1 \frac{2n_x n_y}{n_x^2 + n_y^2} \right) J_2(\psi) r_0 (1 + ikr_0 (n_z + 1) \cos \theta) - \\ &\left. - ikb_2 r_0^2 \sin^3 \theta \cos \theta (n_z + 1) J_0(\psi) + b_2 r_0 \sin \theta J_0(\psi) (\sin^2 \theta + 2 - 2ikr_0 \cos \theta) \right] d\theta. \\ C &= \int_0^{\pi/2} e^{-ikr_0(n_z+1)\cos\theta} \left[-2ikr_0^2 J_0(\psi) \sin \theta \cos \theta (1 + \sin^2 \theta) (b_1 n_x + b_2 n_y) - \right. \\ &\left. - 2kr_0^2 (n_z + 1) \sin^2 \theta \left(\frac{b_1 n_x + b_2 n_y}{\sqrt{n_x^2 + n_y^2}} \right) J_1(\psi) (1 + \cos^2 \theta) + 2kr_0^2 \sin^2 \theta \left(\frac{b_1 n_x + b_2 n_y}{\sqrt{n_x^2 + n_y^2}} \right) J_1(\psi) \right] d\theta. \end{aligned}$$

В этих выражениях $J_0(\psi)$, $J_1(\psi)$ и $J_2(\psi)$ – функции Бесселя аргумента $\psi = kr_0 \sin \theta \sqrt{n_x^2 + n_y^2}$, а величины n_x , n_y и n_z определяются из соотношений

$$n_x(\theta, \varphi) = \sin \theta \cos \varphi, \quad n_y(\theta, \varphi) = \sin \theta \sin \varphi, \quad n_z(\theta, \varphi) = \cos \theta, \quad (20)$$

где θ , φ – угловые координаты точки наблюдения.

Дифференциальное сечение отражения $P(\theta, \phi)$ вводится соотношением [4, 5, 6]

$$P(\theta, \phi) = R_0^2 w/w_0, \quad (21)$$

где w_0 – плотность световой энергии в падающей волне [14]; w – плотность отраженной от поверхности неоднородности электромагнитной энергии, определяемая зависимостью

$$w = \frac{\varepsilon_0}{4\pi} (\text{Re } \mathbf{E}_{omp})^2 = \frac{\mu_0}{4\pi} (\text{Re } \mathbf{H}_{omp})^2. \quad (22)$$

Таким образом, продемонстрирован эффект отражения лучистой энергии от сферической поверхности пространственной неоднородности скорости движения среды. Однако при рассмотрении такого эффекта следует указать релятивистскую поправку частоты электромагнитного излучения при его отражении от такой неоднородности:

$$\delta\omega = (n_z + 1) \frac{v}{c} \omega. \quad (23)$$

После численного разрешения интегральных выражений [15] представим некоторые графические результаты математического моделирования эффекта отражения электромагнитной энергии от пространственной неоднородности скорости движения среды.

Обсуждение результатов моделирования

В процессе распространения в объеме среды и последующего релятивистского отражения электромагнитного излучения от неоднородности скорости ее движения сферической формы очень важную роль играют поляризационные характеристики опорного излучения. Поэтому далее проводится сравнительный анализ отраженного излучения, образованного при различных состояниях поляризации падающего излучения, а также попробуем определить причины и сделать выводы о поведенческих характеристиках рассматриваемой энергии отраженной от неоднородности скорости движения волны.

Первый из графических результатов описывает ситуацию отражения световой энергии от малой (по сравнению с длиной волны опорного излучения) сферической частицы. Опорная волна линейно поляризована ($b_1 = 1$ и $b_2 = 1$).

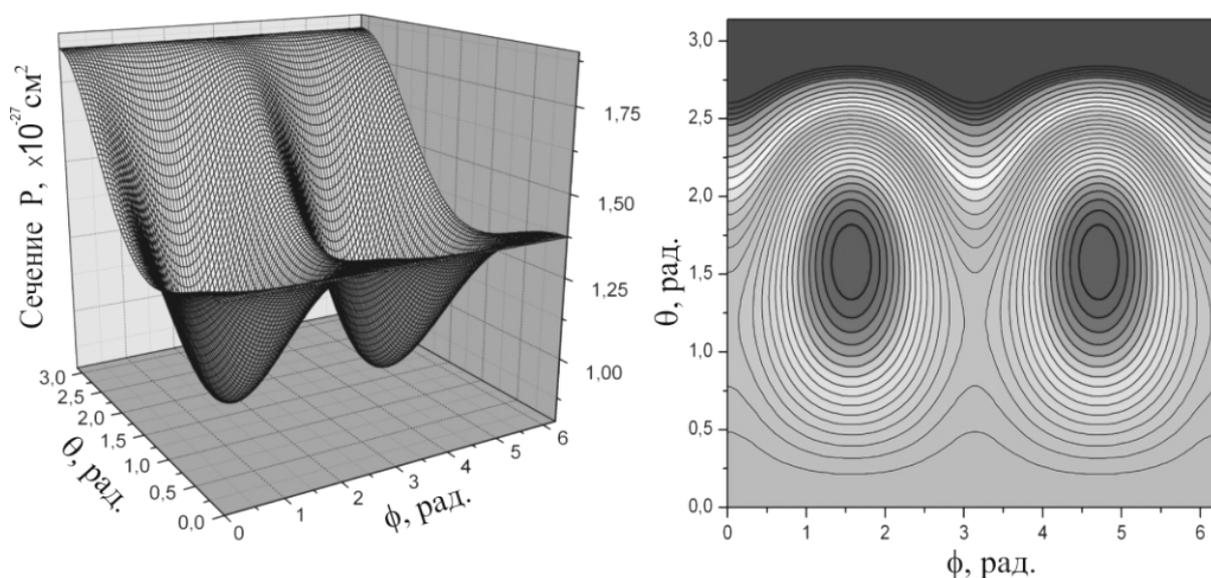


Рис. 2. Сечения отражения P . Радиус сферической частицы $r_0 = \lambda/8$

При рассмотрении приведенного рисунка следует отметить, что распределение интенсивности в пространстве имеет определенный профиль, симметричный относительно направления наблюдения $\phi = \pi$. Поэтому дальнейший анализ эффекта целесообразно проводить только в одном полупространстве по угловой координате ϕ . Изучение распределения интенсивности отраженного излучения от пространственной неоднородности скорости движения среды для всех угловых координат θ в диапазоне значений $[0 \pi]$ показывает, что при столь маленьких размерах движущейся частицы ($r_0 = \lambda/8$) наблюдается уменьшение энергии с ростом координаты θ от 0 до $\pi/2$. Однако при дальнейшем увеличении угла наблюдения опять происходит увеличение величины поля отраженной волны. Такое поведение объясняется тем, что отраженная волна, которая распространяется в направлении движения рассматриваемого объекта, интерферирует после дифракции на границах неоднородности с прошедшей через частицу падающей волной, увеличивая тем самым интенсивность отраженного поля.

Второй численный результат показывает распределение интенсивности отраженной волны при взаимодействии монохроматического, также линейно поляризованного опорного излучения со сферической частицей радиуса $r_0 = \lambda/4$.

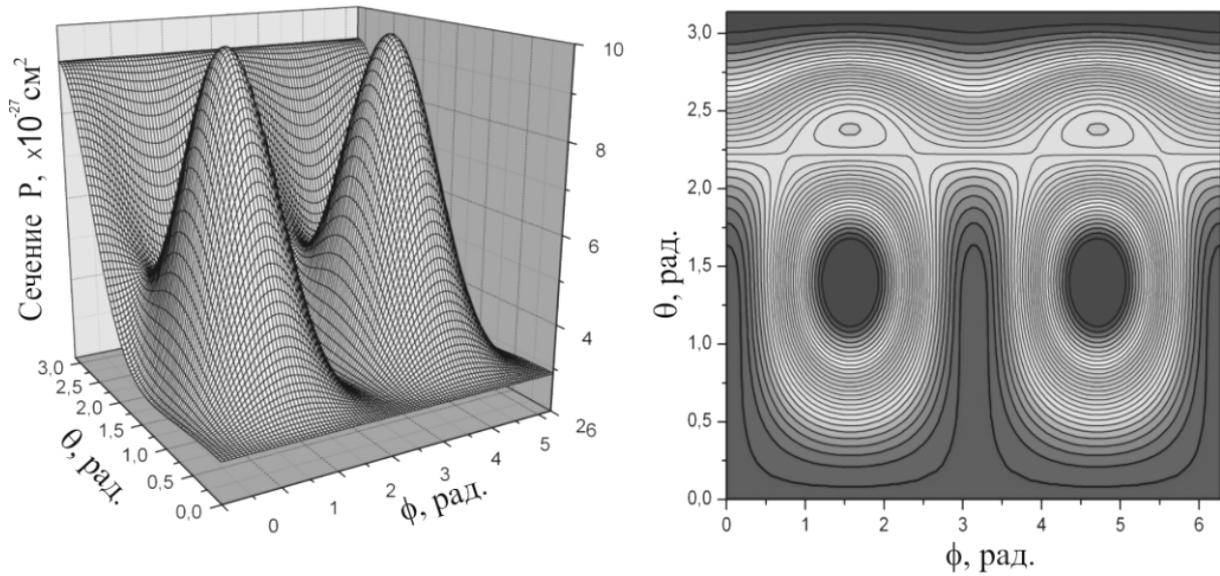


Рис. 3. Сечение отражение P . Радиус сферической частицы $r_0 = \lambda/4$

Такая ситуация демонстрирует совершенно иной результат, нежели предыдущий случай. Здесь, как видно из рис. 3, наблюдается рост интенсивности отраженного от неоднородности излучения при увеличении угловой координаты θ , дальнейший ее спад в ограниченном диапазоне угловых значений, после чего происходит выстраивание структуры распределения интенсивности вблизи углового пространства при $\theta \rightarrow \pi$. Схожее поведение описывалось прошлым рисунком, поэтому подробное описание поведения величины отраженного поля не требуется. Одним словом, на фоне определенного профиля распределения интенсивности поля отраженной волны в пространстве наблюдения проявляются дополнительные максимумы, что связано с процессом открывания зон Френеля с увеличением размера (радиуса) движущейся частицы. Стоит также отметить, что распределение поля в пространстве представленной системы координат также симметрично относительно одной из них, а именно угловой координаты ϕ .

Третий численный результат, демонстрирующий динамику рассматриваемого процесса при увеличении размеров отражающей поверхности движущейся частицы, приводится на рис. 4. Здесь также увеличен радиус сферической движущейся частицы, представляющей собой неоднородность скорости движения среды. Теперь диаметр численно представляет собой две длины волны опорного монохроматического излучения ($r_0 = \lambda$).

Такой профиль интенсивности поля отраженной от неоднородности волны подтверждает сделанное ранее высказывание о том, что данные дополнительные максимумы на фоне монотонно возрастающей интенсивности по угловой координате θ характеризуют открытые зоны Френеля. Как и в прошлых случаях, имеется симметрия пространственного распределения интенсивности по углу наблюдения ϕ .

Таким образом, мы продемонстрировали результаты моделирования эффекта отражения электромагнитного излучения от сферической поверхности пространственной неоднородности скорости движения среды. Для случая линейной поляризации падающего излучения приведены графические результаты моделирования, следуя которым, можно определить значение интенсивности поля отраженной волны в любой точке пространства.

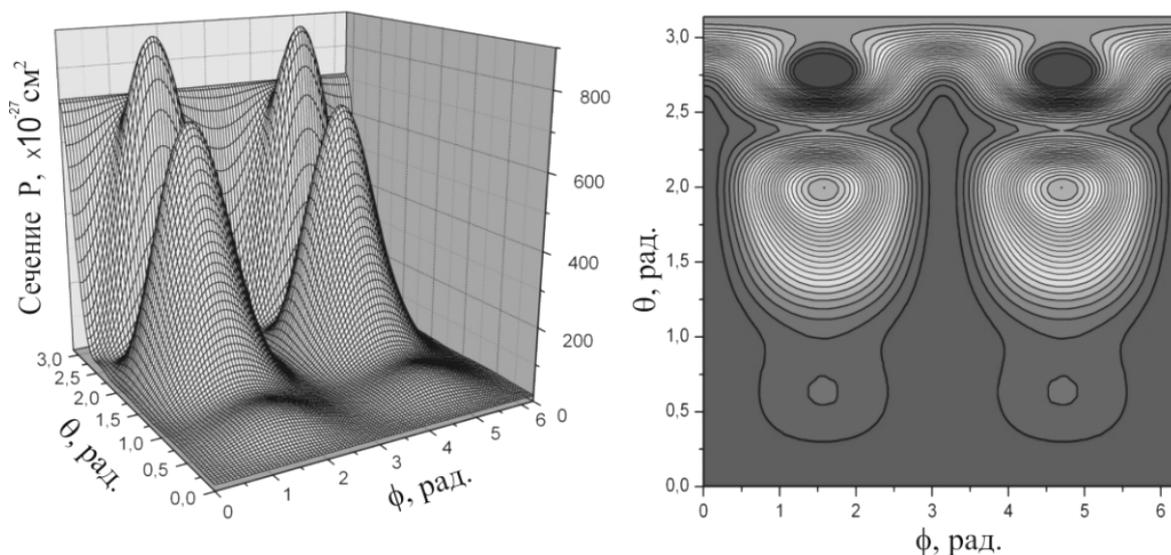


Рис. 4. Сечение отражения P . Радиус сферической частицы $r_0 = \lambda$

Однако несколько иная ситуация распространения опорного излучения, имеющего циркулярную поляризацию ($b_1 = i$ и $b_2 = 1$), приводит к другим пространственным характеристикам отраженного от неоднородности излучения. Результат численного моделирования такой ситуации приводится на рис. 5. В этом случае, в отличие от всех приведенных ранее, наблюдается независимость распределения интенсивности поля от угловой координаты ϕ в рассматриваемом пространстве. По мнению авторов, такая ситуация имеет теоретическое и технологическое значение, поскольку позволяет определить интенсивность отраженного поля, следуя только одной угловой координате, что значительно облегчает диагностику пространства.

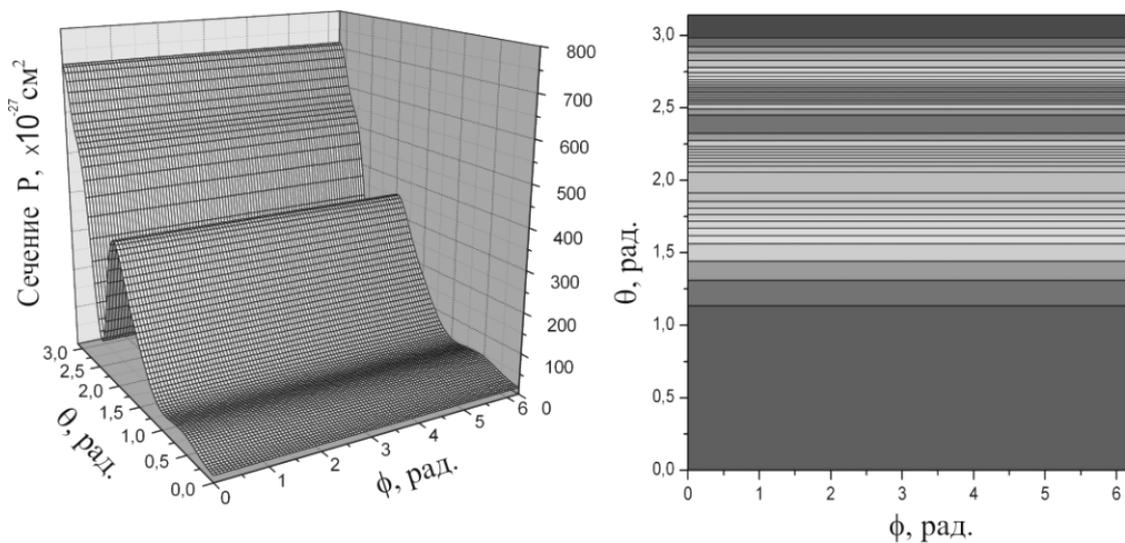


Рис. 5. Сечение отражения P . Радиус сферической частицы $r_0 = \lambda$.

Параметры поляризации $b_1 = i$ и $b_2 = 1$

Заключение

Резюмируя изложенное ранее, можно сказать, что учет неоднородности скорости движения среды приводит к широкому кругу релятивистских эффектов первого порядка, проявляющихся при взаимодействии электромагнитного излучения как с вращающимися частицами цилиндрической и сферической формы [4–7, 10], так и с прямолинейно движущимися неоднородностями с профилями поверхности в виде плоскости и

сферической формы. Представляется необходимой постановка опытов в этой области с целью экспериментального подтверждения электродинамических свойств движущихся сред, а также с целью разработки доплеровского метода анализа подводных течений [6]. Данное же сообщение направлено на разработку как раз доплеровского анализа движущихся сред, поскольку технологически проще организовать такой вид диагностики. Доплеровская поправка частоты оптического излучения, следуя (23), не представляется недостижимой для наблюдения.

Иными словами, мы сформировали целый комплекс представлений о релятивистских эффектах при диагностике слоя пространства с неоднородностью линейной и угловой скорости движения среды. Индикация таких эффектов при анализе интенсивности поля отраженной электромагнитной волны, с учетом современных состояний приемных устройств, затруднена ввиду ее малости, однако имеется выход – применение интерференционно-поляризационных или спектральных приемных устройств. В этом случае основной проблемой является доставка электромагнитной энергии отраженного излучения в зону приема, что представляется весьма простой задачей, следуя продемонстрированным результатам моделирования.

Литература

1. Тамм И.Е. Основы теории электричества. М.: Наука, 1989. 504 с.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Э.М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 2001. 661 с.
3. Вуд Р. Физическая оптика. М.: ОНТИ, 1936.
4. Киселев Ал.С., Киселев Ан.С., Розанов Н.Н., Сочилин Г.Б. // Известия РАН сер.физическая. 2005. Т. 69. №8. С. 1139–1142.
5. Киселев Ал.С., Киселев Ан.С., Розанов Н.Н., Сочилин Г.Б. // Оптика и спектроскопия. 2006, т. 101, №1, С. 124–136.
6. Розанов Н.Н., Сочилин Г.Б. // УФН. 2006. Т. 176. № 4. С. 421–439.
7. Киселев Ал.С., Киселев Ан.С. / В кн. «Проблемы когерентной и нелинейной оптики». Под ред. И.П. Гурова и С.А. Козлова. СПб: СПбГУ ИТМО, 2006.
8. Розанов Н.Н. // Оптика и спектроскопия. 2006. Т. 96. № 6. С. 1017–1018.
9. Джексон Дж. Классическая электродинамика. М.: МИР, 1965.
10. Розанов Н.Н., Сочилин Г.Б. // Оптика и спектроскопия. 2003. Т. 94. № 4. С. 624.
11. Ландау Л.Д., Лившиц Э.М. Теория поля. М.: Наука, 1988.
12. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике (для научных работников и инженеров). СПб: Лань, 2003.
13. Мигдал А.Б., Крайнов В.П. Приближенные методы квантовой механики. М.: Наука, 1966.
14. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М.: Наука, 1973. 719 с.
15. Березин И.С., Жидков Н.П., Методы вычислений. Т. 1. М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1962.

ОБЪЕМНОЕ СКАНИРОВАНИЕ И МОДЕЛИРОВАНИЕ

В.О. Тишкин

Научный руководитель – ген. директор ООО «Оптика-Сканер» О.В. Черепанова

Технология бесконтактного лазерного 3D-сканирования позволяет получать точные электронные копии реальных объектов в виде объемных компьютерных моделей. С помощью специализированных программных пакетов полученные модели могут подвергаться обработке, анализу, модификации, а также воспроизведены физически на специальном оборудовании (станки с ЧПУ). Условно сканируемые объекты можно разделить на художественные и технические. Различие в общем случае проявляется в наличии у последних граней, ребер, острых углов и т.д. В этом смысле технические объекты требуют более кропотливой обработки. О сложности в обработке и получении наилучшего качества сканирования и пойдет речь в работе.

Введение

3D-сканирование – это систематический процесс определения координат точек, принадлежащих поверхностям физических объектов, с целью последующего получения их пространственных математической моделей, которые могут модифицироваться с помощью САД-систем. Устройства, с помощью которых осуществляется сканирование объектов, называют 3D-сканерами. Эти устройства не только упрощают процесс создания 3D-моделей, но и позволяют решать эту задачу с максимальной степенью достоверности по отношению к исходному оригиналу.

Сегодня основными потребителями 3D-сканеров являются дизайнерские и кинематографические студии, а первыми заказчиками этих устройств стали автомобильные и конструкторские дизайн-бюро, потребность которых в оборудовании данного класса обусловила используемая ими технология работы.

Как известно, дизайн автомобилей и летательных аппаратов совершенствуется с помощью гидродинамических труб, где уровень обтекаемости форм определяется нагнетательным воздействием воздушного потока. Математические алгоритмы, моделирующие работу подобных систем, постоянно совершенствуются, но по уровню своей эффективности они далеки от настоящих гидродинамических обдувов и вряд ли когда-нибудь смогут заменить их полностью. Поэтому идеология работы современных дизайнерских бюро многие годы почти не меняется и в настоящее время состоит из трех основных этапов.

На первом этапе создается чертеж модели, которая затем выполняется из пластичного материала. Далее форма модели гидродинамически рационализируется в трубе обдува, а потом при помощи сканирующих приборов переносится и обрабатывается на компьютере. На основе объемных виртуальных моделей делаются новые, более точные чертежи, а по ним уже создаются серийные образцы автомобилей, самолетов и прочих конструкций, для которых важна обтекаемость форм.

О технологиях, позволяющих сканировать 3D-модели, а также продуктах, полученных на их базе, и пойдет речь в данной статье.

Принцип работы

В настоящее время существует целый ряд технологий, позволяющих создавать трехмерные образы аппаратными методами, т.е. без привычного 3D-моделирования в специализированных программных пакетах. Условно разделим технологии трехмерного сканирования на два типа: контактные и бесконтактные.

Первые подразумевают наличие механического устройства – «щупа», при помощи которого в компьютер передаются координаты выбранных оператором точек. Система позиционирования и координатоисчисления таких приборов построена на основе работы механических датчиков, аналогичных тем, что используются в оптико-механических

манипуляторах «мышь». Последние закреплены в каждом шарнире крепления «щупа», и именно от точности этих датчиков и зависит точность работы прибора пространственного сканирования в целом.

Бесконтактные 3D-сканеры являются значительно более сложными приборами, в которых заложены весьма изощренные алгоритмы создания пространственных каркасов. Так, во многих из них используется двойная (дополняющая основную) система ввода координат тела. Многие устройства совмещают лазерные датчики (заменяющие механический «щуп» контактных 3D-сканеров) и цифровой фотоаппарат, который используют для большей точности сканирования, что позволяет получить модели объектов с наложенными текстурами.

Области применения

Задачи, решаемые методом неконтактного лазерного сканирования с использованием неконтактного лазерного сканера, можно условно объединить в несколько больших категорий:

Техническое проектирование:

- индустриальный дизайн, создание вручную 3D-моделей и их оцифровка с последующей доработкой методами машинной графики;
- создание 3D-моделей имеющих штампов, пресс-форм и других изделий сложной формы, например, уникальных, в случае необходимости их изменения, ремонта или повторного воспроизведения;
- инженерный 3D-анализ, измерение геометрических параметров изделий, которые не могут быть измерены стандартными методами;
- On-Line контроль качества (проверка точности изготовления) (CAI, CAT).

Архитектура:

- в ходе реставрации, путем создания банка электронных копий (виртуального архива) и последующего изготовления или восстановления (промышленного воспроизведения) оригиналов скульптур и других рельефных изделий (сувениров, украшений, барельефов, горельефов и т.д.);
- создание виртуальных архитектурных музеев.

Медицина:

- хирургическое планирование, ортопедия, протезирование, пластическая хирургия, косметология, стоматология.

Дизайн, компьютерная графика, анимация

Археология:

- виртуальное сохранение произведений искусства;
- создание 3D-документации;
- виртуальная реставрация, а также копирование для последующей репликации;
- создание виртуальных музеев.

Техническое проектирование

Сейчас сканирование технических объектов – одно из наиболее развивающихся направлений применения лазерного сканера в России. Эти работы относятся к реинжинеринговым (или работам по обратному проектированию).

По полученным данным сканирования в первую очередь производится анализ качества модели. Причем, в отличие от художественных объектов, технические требуют наибольшей точности воспроизведения и получения математической модели (CAD-модели). Сложность заключается и в том, сам процесс сканирования зачастую не позволяет получить информацию о скрытых частях объекта. По большому счету эта про-

блема решается путем достраивания («додумывания») модели в программном пакете (чаще всего это удается сделать с большой точностью).

Сырой материал, получаемый на выходе сканера – это облако точек. Естественно, что для работы в конструкторских программах необходима дополнительная обработка модели, и до недавнего времени существовала проблема перевода облака точек в «твердое тело» (mesh to solid). Сейчас созданы программные продукты (например, RepidFormXO компании INUS Technology), позволяющие, с одной стороны, повторить поверхность объекта, с другой стороны – получить модель, доступную конструкторским программам.

Точность лазерного сканера составляет несколько микрон, поэтому CAD-модель, в конечном счете, будет передавать все дефекты исходного объекта. Т.е. в результате реинженеринговых работ мы получим точную копию объекта, по которой возможен анализ расхождения с теорией (контроль качества). Понятно, что это имеет огромное значение на производстве, где комплекс работ по обратному проектированию позволяет выявить те места в производственном цикле, которые и дают дефекты на моделях.

Заключение

Классификация областей применения 3D-сканеров носит условный характер и не ограничивается перечисленными выше пунктами. Рынок данной технологии в России только развивается. Мы существуем в объемном мире, а метод 3D-сканирования позволяет зафиксировать объемное тело. Технология сканирования ни в коем случае не является альтернативой мастерству дизайнера, так же как компьютер не стал альтернативой образно и логически мыслящему человеку. Устройство только расширило список доступных для реализации задач, а также открыло новые перспективы перед дизайнерским искусством и инженерным гением. Область применения системы «3D-сканер + компьютер с прикладным программным обеспечением + оператор» неуклонно расширяется: от кинематографии и военной сферы до самолетовождения и космонавтики. Область применения системы ограничена исключительно нашей фантазией.

КОМПЛЕКСЫ ДИСКРЕТНЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ ОПТИЧЕСКИХ СОЛИТОНОВ В АКТИВНЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ СИСТЕМАХ

Ал.С. Киселев, Ан.С. Киселев

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор Н.Н. Розанов

Представлен обзор численного моделирования дискретных локализованных (солитоноподобных) структур. Проанализирована их эволюция в одномерных системах нелинейных волноводов с насыщающимся усилением и поглощением. Продемонстрированы процессы формирования и распространения поверхностных локализованных состояний электромагнитного поля вдоль эволюционной координаты. Показано влияние нелинейности керровского типа на протекание таких процессов. Изучены сценарии устойчивости дискретных поверхностных диссипативных солитонов и предложены возможные приложения такого рода структур.

Введение

Понятие дискретных пространственных солитонов возникло впервые в 1988 г., когда Кристодулидес и Джозеф теоретически изучали пространственно локализованные моды оптических структур, созданных связанными оптическими волноводами, на основе аналогии с локализованными модами дискретной решетки [1–4]. С тех пор началась эра интенсивного теоретического и экспериментального изучения дискретных пространственных консервативных солитонов, и, начиная с 1998 г. такие структуры наблюдались в опытах в системах одномодовых нелинейных оптических волноводов [5–7].

В данном сообщении рассматриваются системы связанных нелинейных волноводов с диссипацией в виде насыщающегося усиления и поглощения. Как и в указанных источниках, стандартный теоретический подход к изучению дискретных пространственных солитонов основан на анализе решений эффективного дискретного нелинейного уравнения Шредингера (НУШ). Только, применительно к нашему представлению задачи, имеется диссипативная поправка нелинейности в рассматриваемом НУШ. Также наше внимание остановилось на описании нелинейных систем смешанного типа, а именно совокупности кубической (керровской) нелинейности и баланса насыщающегося усиления и поглощения. Подобное рассмотрение оказалось полезным по причине того, что на основе выводов при анализе такого рода нелинейных систем удастся разработать некоторые новые приложения диссипативных поверхностных оптических солитонов.

Общие соотношения

Существенным свойством распространения волн в любой периодической структуре (которое вытекает из теории Флоке-Блоха) является наличие запрещенных зон в спектре пропускания. Любой падающий свет полностью отражается, если его частота попадет в одну из таких зон. Нелинейные эффекты могут привести к формированию локализованных состояний внутри этих зон. Такие локализованные состояния называют иногда щелевыми солитонами.

Рассмотрим электромагнитную волну, распространяющуюся вдоль эволюционной координаты Z такой структуры, созданной периодической системой тонкопленочных нелинейных волноводов (рис. 1.). Предполагая, что структура поля в направлении Y определяется линейной направляемой модой $Q(X; Y)$ щелевого волновода, запишем полное поле как $\Phi(X; Y) = Q(X; Y)E(X; Y)$ [4]. Тогда эволюция огибающей $E(X; Y)$ в дискретном представлении вдоль оси Z описывается параксиальным уравнением:

$$i \frac{\partial}{\partial z} E_n + C[E_{n-1} + E_{n+1}] + E_n f(|E_n|^2) = 0, \quad (1)$$

где функция нелинейности f принимает вид:

$$f(|E_n|^2) = \gamma |E_n|^2 + i \left[-1 + \frac{g_0}{1 + |E_n|^2} - \frac{a_0}{1 + b|E_n|^2} \right]. \quad (2)$$

В этих выражениях определены следующие параметры. В случае бездефектной системы волноводов вводится коэффициент связи C , который посредством серии вычисления приводится численным значением. Параметры усиления и поглощения g_0 и a_0 нормированы на собственные потери внутри волокон периодической структуры. Кубическая нелинейность описывается керровским коэффициентом γ , при этом $\gamma > 0$ отвечает самофокусирующей, а $\gamma < 0$ – самодефокусирующей нелинейности, b – отношение интенсивности усиления к интенсивности поглощения.

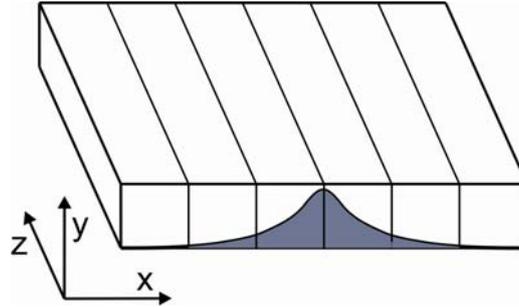


Рис. 1. Система тонкопленочных нелинейных волноводов, размещенных в линейном щелевом волноводе. Штриховка указывает пространственный профиль локализованной моды

Первичные ограничения, накладываемые на коэффициенты усиления и поглощения в функции нелинейности, связаны с тем, что, во-первых, в безгенерационном режиме (при $|E_n|^2 = 0$) любые малые возмущения внутри периодической структуры не должны усиливаться, поэтому устанавливаются ограничения типа $-1 + g_0 - a_0 \leq 0$, во-вторых, ограничения минимальной накачки вытекают из энергетических соотношений.

Энергетическое соотношение, которое определяется выражением (\mathbf{r} – координаты поперечного направления)

$$\frac{dW}{dt} = 2 \int f(|E_n|^2) |E_n|^2 d\mathbf{r} \quad (3)$$

приводит к выводам, согласно которым следует, что если функция $f(|E_n|^2)$ не меняет знак при изменении интенсивности, т.е. уравнение (2) при $\gamma = 0$ не имеет положительных корней, то мощность монотонно меняется со временем. Тогда при условии $f(0) < 0$ мощность будет убывать: $W(t) \rightarrow 0$. Поэтому при любых начальных условиях со временем установится безгенерационный режим, т.е. он глобально устойчив. Подчеркнем также, что нетривиальные устойчивые локализованные структуры лазерного излучения возможны только в диапазоне бистабильности $g_{\min} < g_0 < g_{\max}$, $g_{\max} = 1 + a_0$ [8], а параметр g_{\min} вытекает из соотношения (рис. 2):

$$g_{\min} = \frac{-1 + b + a_0 + 2\sqrt{a_0 b - a_0}}{b}. \quad (4)$$

Необходимое решение для описания эволюции линейных оптических структур (решений (1)) мы ищем в виде:

$$E_n(z) = u_0 \exp(i\beta z + iKn), \quad (5)$$

где β – постоянная распространения, K – пространственная частота внутри волноводов (вещественная функция), u_0 – амплитуда поля. Тогда, подставив (5) в (1), найдем дисперсионное соотношение:

$$K = F(\beta) = \pm \arccos \left[-\frac{\beta + \gamma U_0^2}{2 \operatorname{Re}(C)} \right]. \quad (6)$$

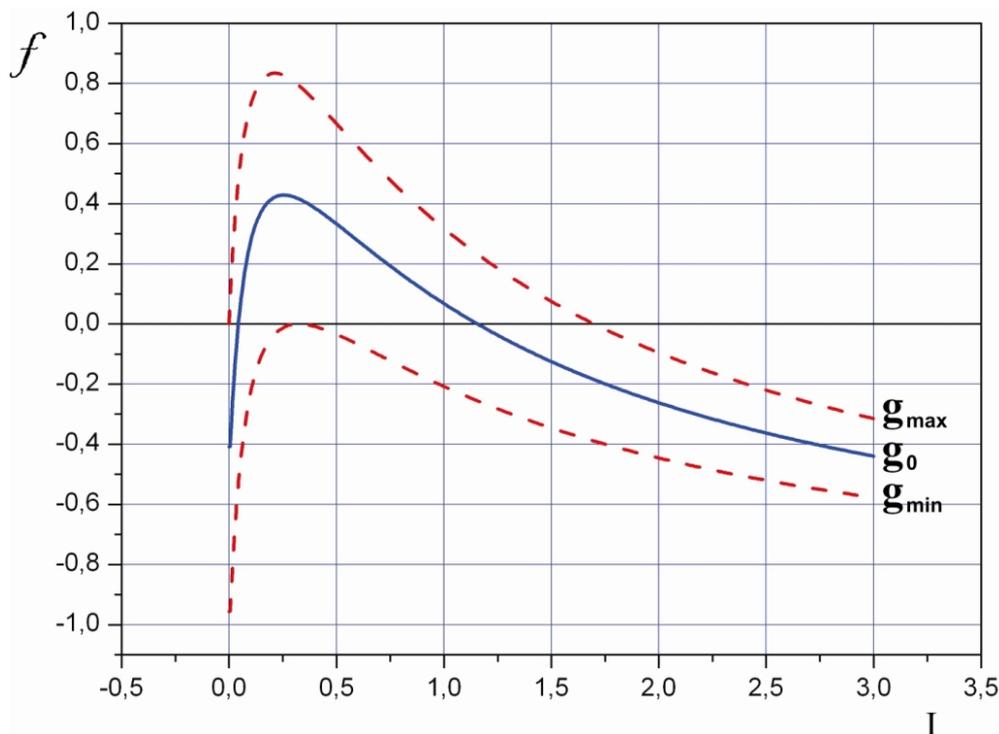


Рис. 2. Зависимость баланса усиления и потерь f от интенсивности $I = |E_n|^2$ для фиксированных значений $a_0 = 2$ и $b = 10$

В свою очередь, таким же образом можно определить величину постоянной распространения β в установившемся стационарном режиме:

$$\beta = \frac{\operatorname{Im}(C)}{\operatorname{Re}(C)} \left[-1 + \frac{g_0}{1 + U_0^2} - \frac{a_0}{1 + bU_0^2} \right] - \gamma U_0^2. \quad (7)$$

Для дальнейшего анализа необходимо определить область неотрицательной групповой скорости по параметрам входящей интенсивности U_0 и коэффициента насыщающегося усиления g_0 . В таком случае групповая скорость структуры определяется соотношением:

$$V_g = \frac{-2 \operatorname{Re}(C)}{|\operatorname{Im}(C)|} \sqrt{4 \operatorname{Im}(C)^2 - \left[-1 + \frac{g_0}{1 + U_0^2} - \frac{a_0}{1 + bU_0^2} \right]^2}, \quad (8)$$

где, как видно из приведенного выражения, не наблюдается зависимость от параметра кубической нелинейности – керровского коэффициента γ . Такая форма групповой скорости значительно облегчает выбор параметров для анализа эволюционного распространения рассматриваемой солитоноподобной структуры. Далее на рисунке приводится профиль положительных значений вещественной части величины $V_g(g_0, U_0^2)$.

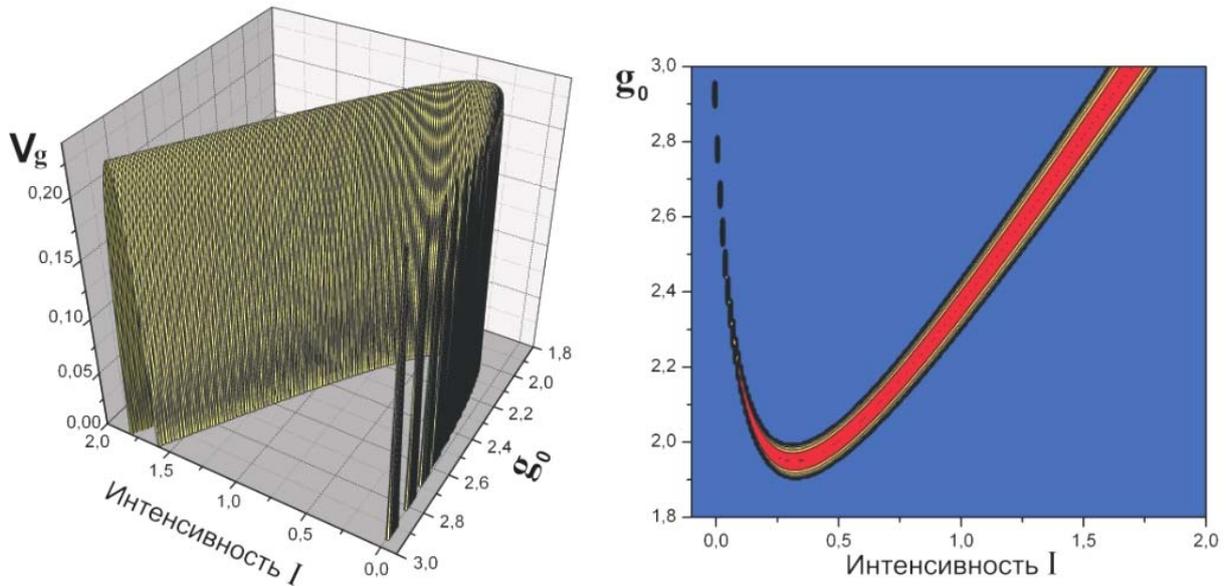


Рис. 3. Профиль групповой скорости поля в зависимости от параметра усиления и интенсивности

Линейный анализ устойчивости локализованных мод можно выполнить, записав решение (1) в виде

$$E_n(z) = [u_n + v_n \exp(i\Gamma z) + w^* \exp(-i\Gamma^* z)] \exp(i\beta z) \quad (9)$$

и рассматривая эволюцию малых возмущений v и w . В этом выражении u_n – пространственный профиль поля в направлении x , Γ – собственные значения для v_n и w_n . Подставив этот вид решения в (1), мы получим линейную задачу на собственные значения Γ . В общем случае решение такой задачи на собственные значения определяется одной из следующих ситуаций.

1. Внутренние моды с вещественными собственными значениями, связанные с периодическими осцилляциями локализованного состояния.
2. Моды неустойчивости, которые адекватны чисто мнимым собственным значениям с $\text{Im}(\Gamma) < 0$.
3. Моды колебательной неустойчивости, возникающие при комплексных собственных значениях с отрицательной мнимой частью. Кроме того, могут существовать убывающие в ходе пространственной эволюции моды, когда $\text{Im}(\Gamma) > 0$.

Для дальнейшего описания свойств устойчивости решения (9) мы рассматриваем эволюцию слабых возмущений, прежде линеаризовав получающиеся уравнения по v и w . Из периодичности стационарного решения и теоремы Блоха следует, что собственные моды линейной задачи на собственные значения также должны удовлетворять периодическому решению. Тогда запишем:

$$\begin{aligned} v_{n+1} &= v_n \exp(i[q + K]), & v_{n-1} &= v_n \exp(-i[q + K]), \\ w_{n+1} &= w_n \exp(i[q - K]), & w_{n-1} &= w_n \exp(-i[q - K]), \end{aligned} \quad (10)$$

где пространственные частоты модуляции q вещественны.

С учетом этих предложений собственные значения Γ находятся из условия разрешимости при замене переменной $G = i\Gamma$:

$$G^2 + 2\tilde{p}G + \tilde{q} = 0. \quad (11)$$

Здесь параметры \tilde{p} и \tilde{q} для обеспечения устойчивости принимают значения $\tilde{p} > 0$ и $\tilde{q} > 0$. Переходя к принятым ранее величинам и обозначениям, запишем:

$$\tilde{p} = -2i \operatorname{Re}(C) \sin q \sin K - 2 \operatorname{Im}(C) \cos q \cos K + u_0^2 B + 1 - \frac{g_0}{1+u_0^2} + \frac{a_0}{1+bu_0^2}, \quad (12)$$

$$\tilde{q} = S - 4i \sin q \sin K \left[\operatorname{Re}(C) \left(u_0^2 B + 1 - \frac{g_0}{1+u_0^2} + \frac{a_0}{1+bu_0^2} \right) + 2\gamma u_0^2 \operatorname{Im}(C) \right], \quad (13)$$

где величина S определяется следующим образом:

$$S = \beta^2 + 4|C|^2 \cos(q+K) \cos(q-K) + \left| \gamma u_0^2 + i \left[-1 + \frac{g_0}{1+u_0^2} - \frac{a_0}{1+bu_0^2} \right] \right|^2 + 8\beta \operatorname{Re}(C) \cos q \cos K + \quad (14)$$

$$+ 4\beta \gamma u_0^2 + 2u_0^2 \left[\gamma^2 u_0^2 - \left(-1 + \frac{g_0}{1+u_0^2} - \frac{a_0}{1+bu_0^2} \right) B \right] + 4 \cos q \cos K \left[2 \operatorname{Re}(C) \gamma u_0^2 - \operatorname{Im}(C) \left(u_0^2 B + 1 - \frac{g_0}{1+u_0^2} + \frac{a_0}{1+bu_0^2} \right) \right].$$

Коэффициент B при этом определяется соотношением:

$$B = \frac{g_0}{(1+u_0^2)^2} - \frac{ba_0}{(1+bu_0^2)^2}. \quad (15)$$

Несмотря на довольно сложную форму анализа, в соответствии с (14) представляется возможным упрощение рассмотрения с применением модели синфазных ($q=0$) или противофазных ($q=\pi$) волноводов. Громоздкий анализ устойчивости в данном сообщении не приводится, а лишь далее, в разделе результатов моделирования, приводятся результаты численного вычисления эволюции огибающей электромагнитного поля в такой периодической системе, находящейся в режиме устойчивости системы к малым возмущениям.

Обсуждение результатов моделирования

Данный раздел охватывает рассмотрение результатов численного моделирования адекватно представленным уравнениям. Приводятся некоторые случаи эволюции поля в периодической системе нелинейных волноводов. Расчеты приводились при постоянных значениях насыщенных коэффициентов усиления $g_0 = 2.11$, коэффициента поглощения $a_0 = 2$ и параметра $b = 10$. Как уже отмечалось ранее, в случае рассмотрения системы волноводов без дефектов и после серии вычислений [9] коэффициент связи представляется комплексной величиной $C = 0.119 - i0.018$. Кубическая нелинейность вводится керровским коэффициентом γ , которая в дальнейшем является переменной величиной, после чего проводится сравнительный анализ ситуаций эволюции поля электромагнитной волны в самофокусирующей и самодефокусирующей нелинейной дискретной системе. Данные параметры выбраны таким образом, что реализуется режим устойчивости к слабым возмущениям электромагнитного поля.

В первой ситуации продемонстрируем распространение волны вдоль эволюционной координаты при значении $\gamma = 0$. Для демонстрации нами принята перенормировка эволюционной координаты z вдоль оси волноводов: $Z = \beta z$.

На рис. 4 продемонстрирована ситуация распространения импульса электрического поля пиковой интенсивностью $|E_n|_{z=0}^2 = 0.3$ с модой на границе периодической структуры нелинейных волноводов.

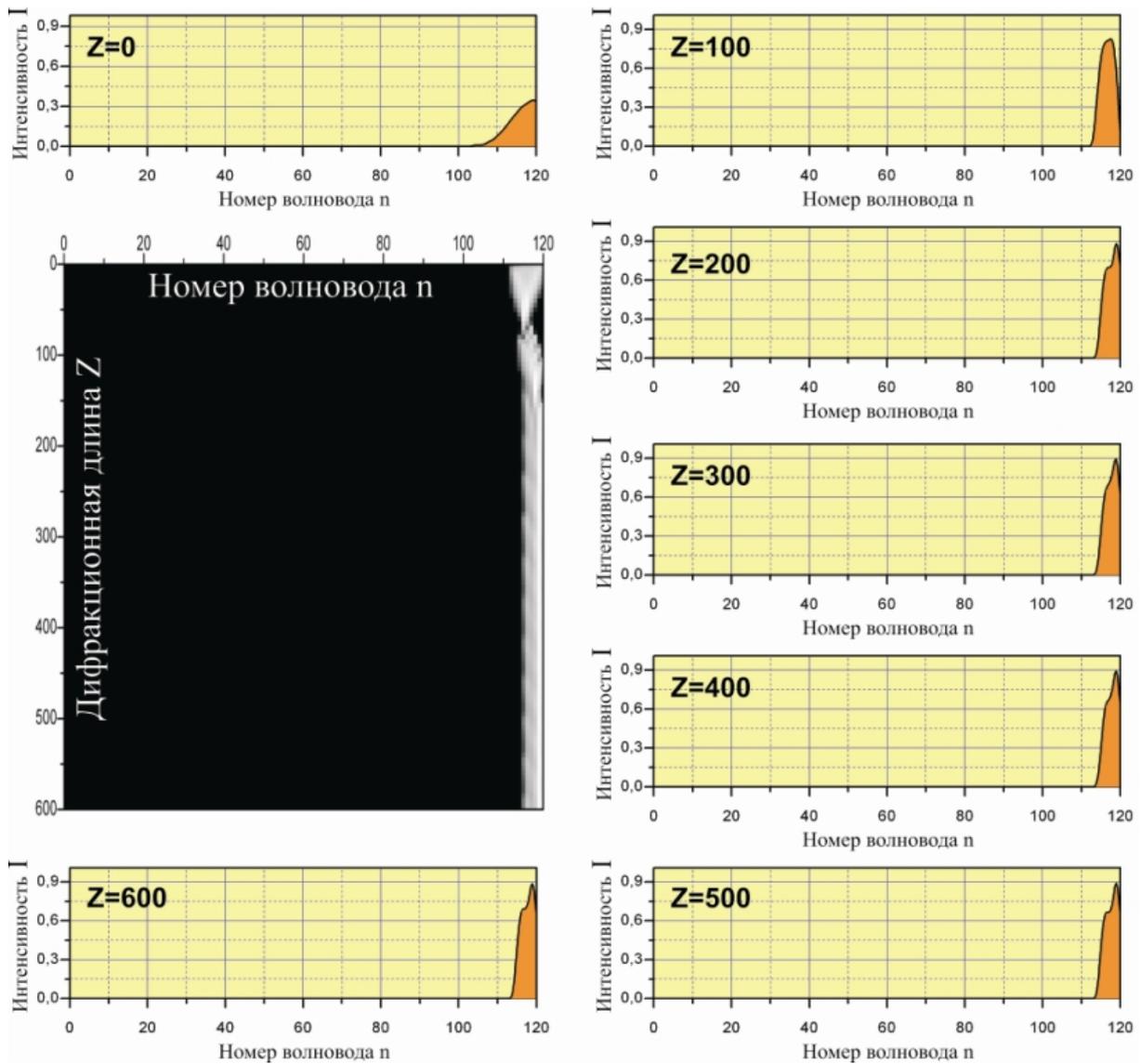


Рис. 4. Распространение дискретного поверхностного солитона
интенсивностью $|E_n|_{z=0}^2 = 0.3$

Анализ рисунка показывает, что распространение импульса относительно небольшой интенсивности приводит к быстрой локализации поля близки границы нелинейной системы, образуя тем самым поверхностный солитон. Стоит также сказать, что при данных параметрах диссипации наблюдается сужение пространственного профиля поперечного направления. Другие характеристики усиления насыщения приводят к существенно другим результатам эволюции и устойчивости таких локализованных состояний электрического поля. Дальнейший анализ импульсов такой интенсивности требует более детального рассмотрения с тщательной проработкой наиболее характерных и интересных ситуаций распространения и приложения дискретных диссипативных оптических солитонов.

Далее, по мнению авторов, интересным случаем рассмотрения актуальной проблемы является ситуация подачи на систему импульса интенсивностью $|E_n|_{z=0}^2 = 0.5$. Значимым здесь, в отличие от предыдущего случая, является процесс отражения оптического излучения без дальнейшего образования поверхностной волны солитоноподобной формы.

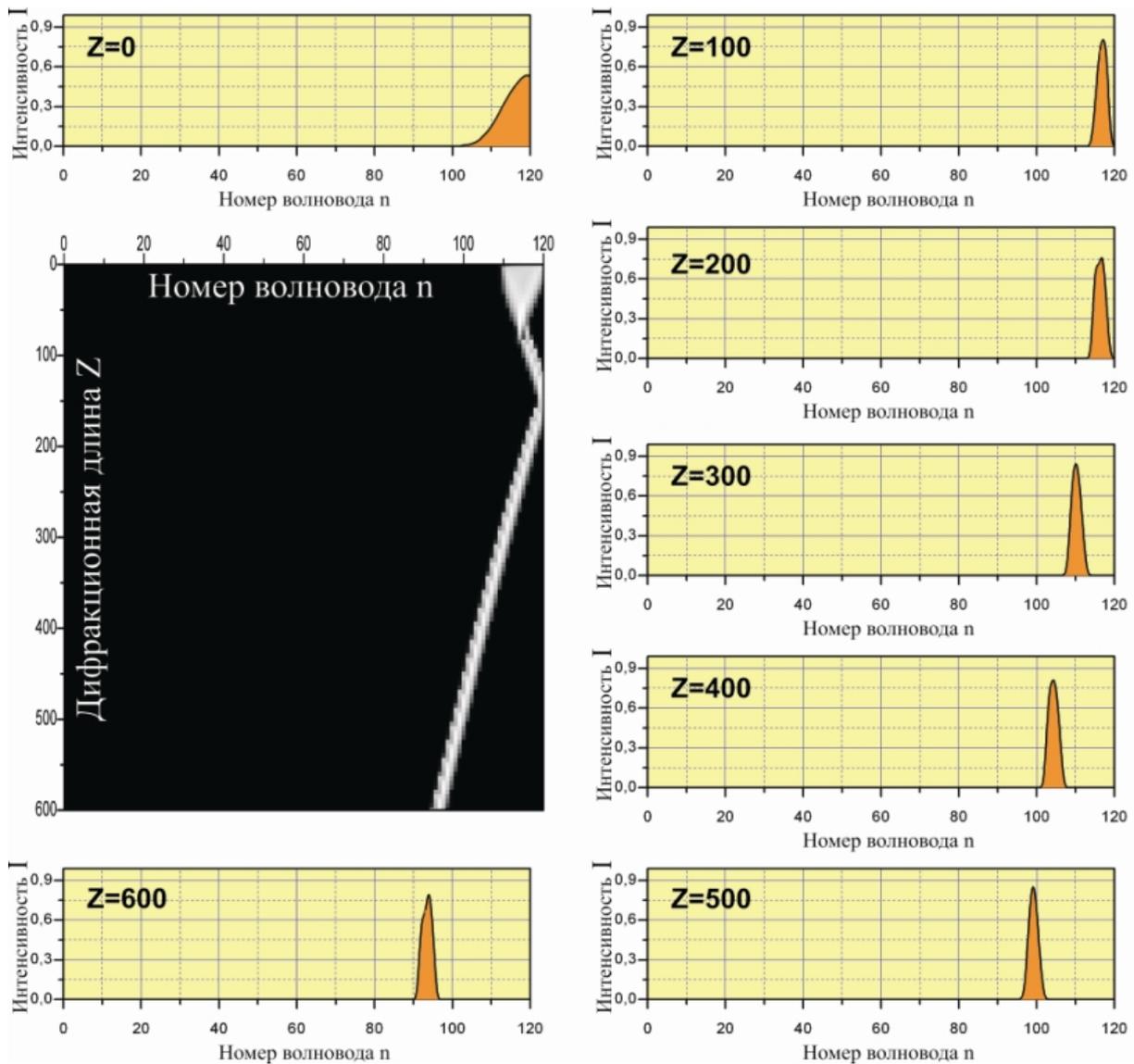


Рис. 5. Распространение дискретного поверхностного солитона интенсивностью $|E_n|_{z=0}^2 = 0.5$

Изучение такого рода режима направляет нас на рассуждение о том, что подстроенная определенным образом нелинейность и баланс диссипативных параметров насыщающегося усиления и поглощения наводит отражательные характеристики и уводит солитон (устойчивый для малых возмущений) вглубь системы. Отражение также не приводит к искажению профиля и снижению пиковой интенсивности импульса, что позволяет судить о сохранении интегральной мощности солитона при распространении по оси z .

И, наконец, наше внимание заострилось на интересном результате моделирования, в котором в качестве электрического поля подавался импульс пиковой интенсивностью $|E_n|_{z=0}^2 = 1.0$. Интересен он по причине того, что в ходе пространственной эволюции происходит разделение поля на два фронта, один из которых представляет собой поверхностный солитон, схожий по форме с солитоном первой рассмотренной в данном разделе ситуации, а второй – повторяет результат моделирования предыдущей ситуации.

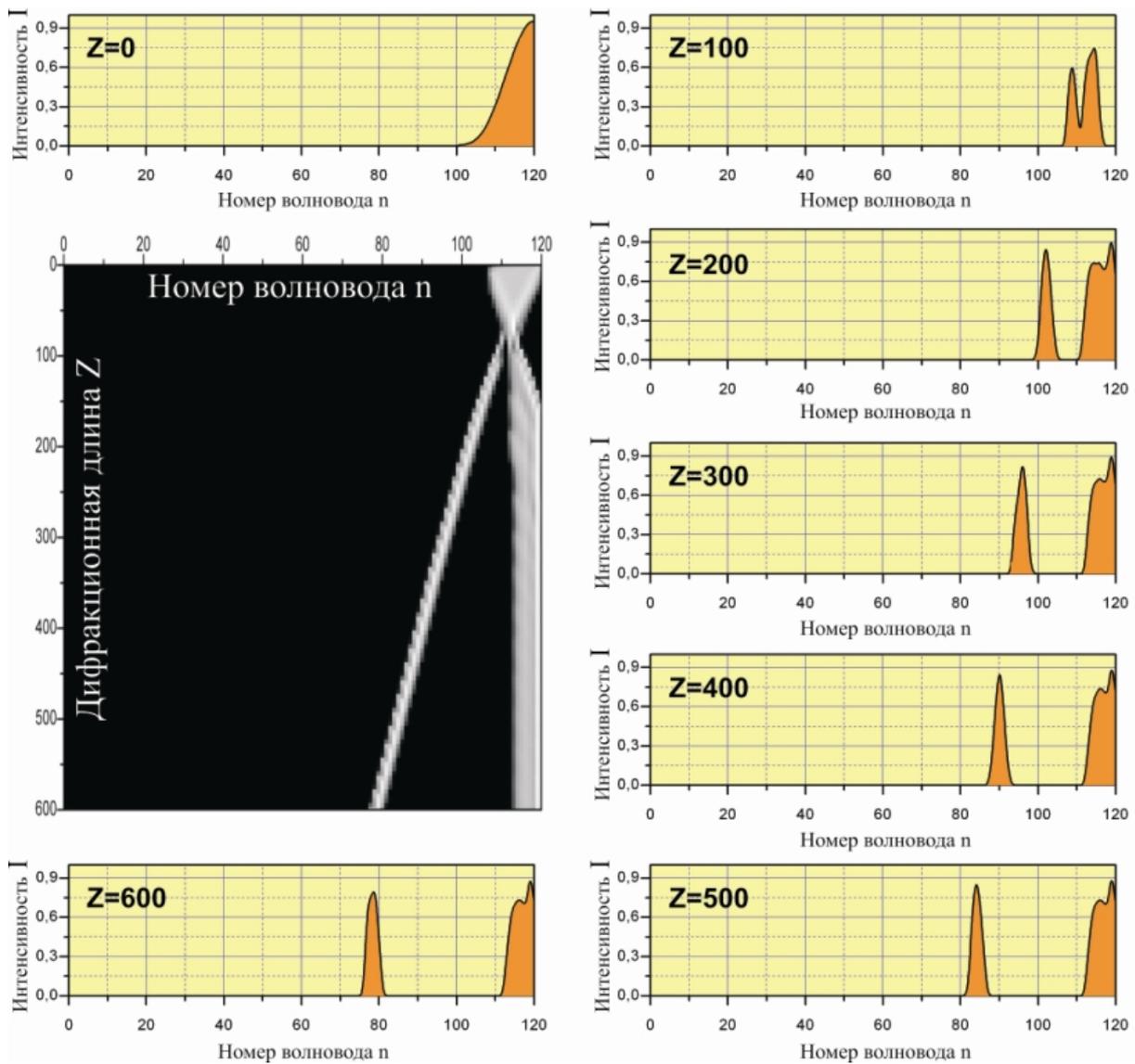


Рис. 6. Распространение дискретного поверхностного солитона интенсивностью

$$|E_n|_{z=0}^2 = 1.0$$

Таким образом, анализ дискретных диссипативных нелинейных систем, в которых имеет место распространение оптического излучения вдоль эволюционной координаты, демонстрирует интересные и требующие внимания результаты численного моделирования стационарных локализованных мод излучения. Однако приведенные результаты не отражают влияния кубической нелинейности на формирование солитнов, поэтому далее кратко приводятся результаты моделирования эволюции солитонов, соответственно, в самофокусирующей и самодефокусирующей среде.

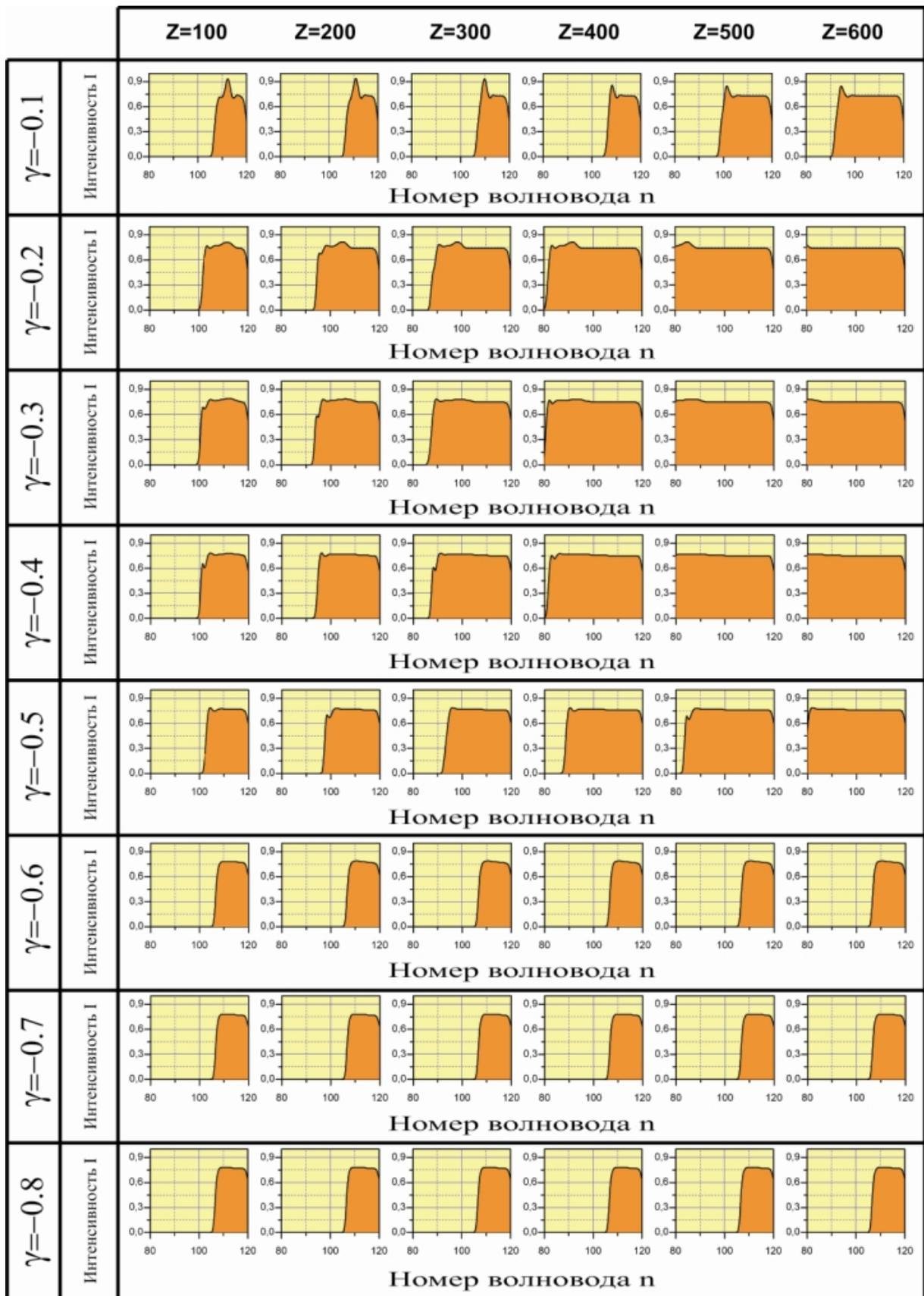


Рис. 7. Пространственный профиль дискретного поверхностного диссипативного солитона интенсивностью $|E_n|_{z=0}^2 = 1.0$ в различных зонах по направлению эволюционного распространения при фиксированных значениях керровского коэффициента кубической нелинейности режима самодифракции

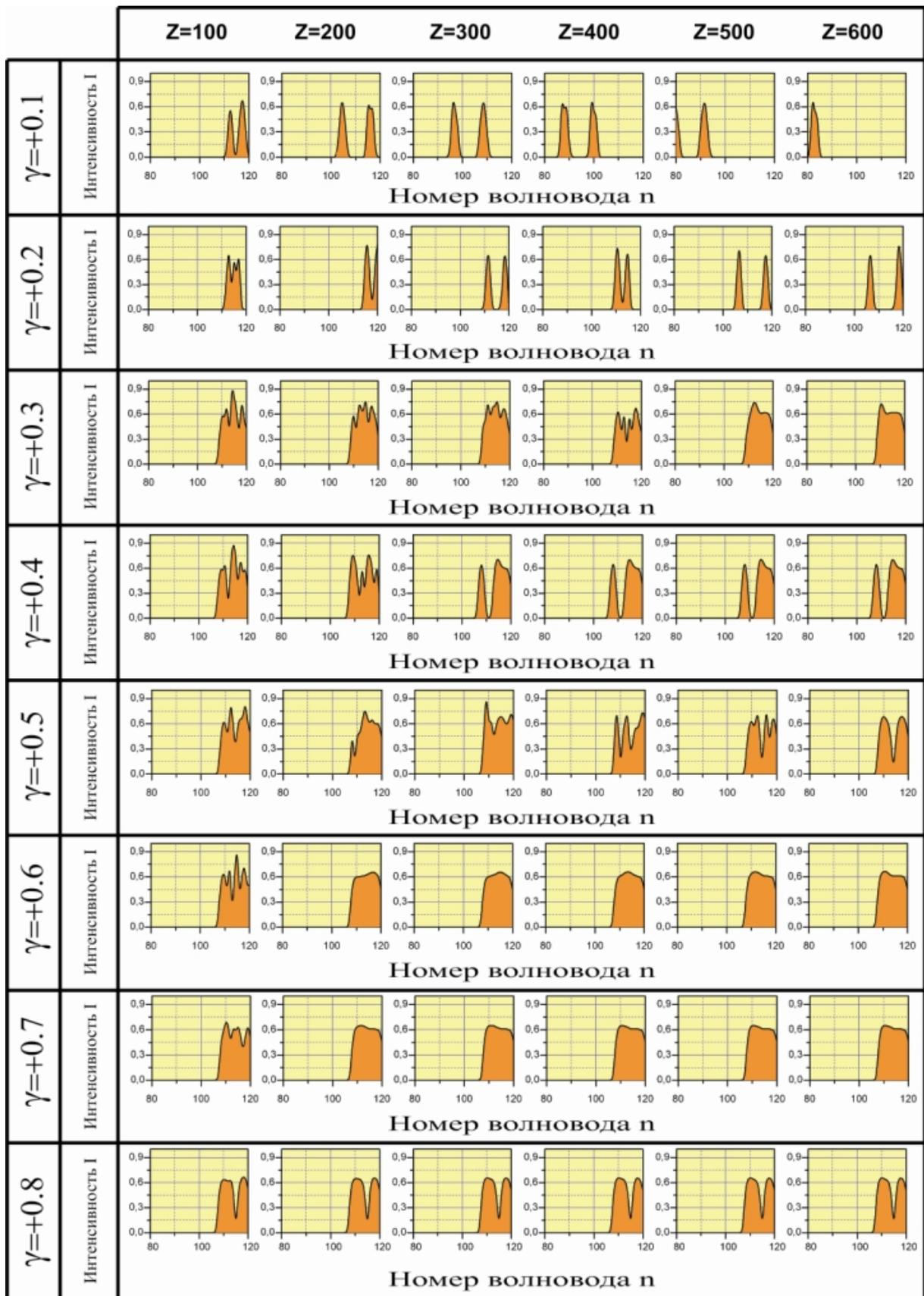


Рис. 8. Пространственный профиль дискретного поверхностного диссипативного солитона интенсивностью $|E_n|_{z=0}^2 = 1.0$ в различных зонах по направлению эволюционного распространения при фиксированных значениях керровского коэффициента кубической нелинейности режима самофокусировки

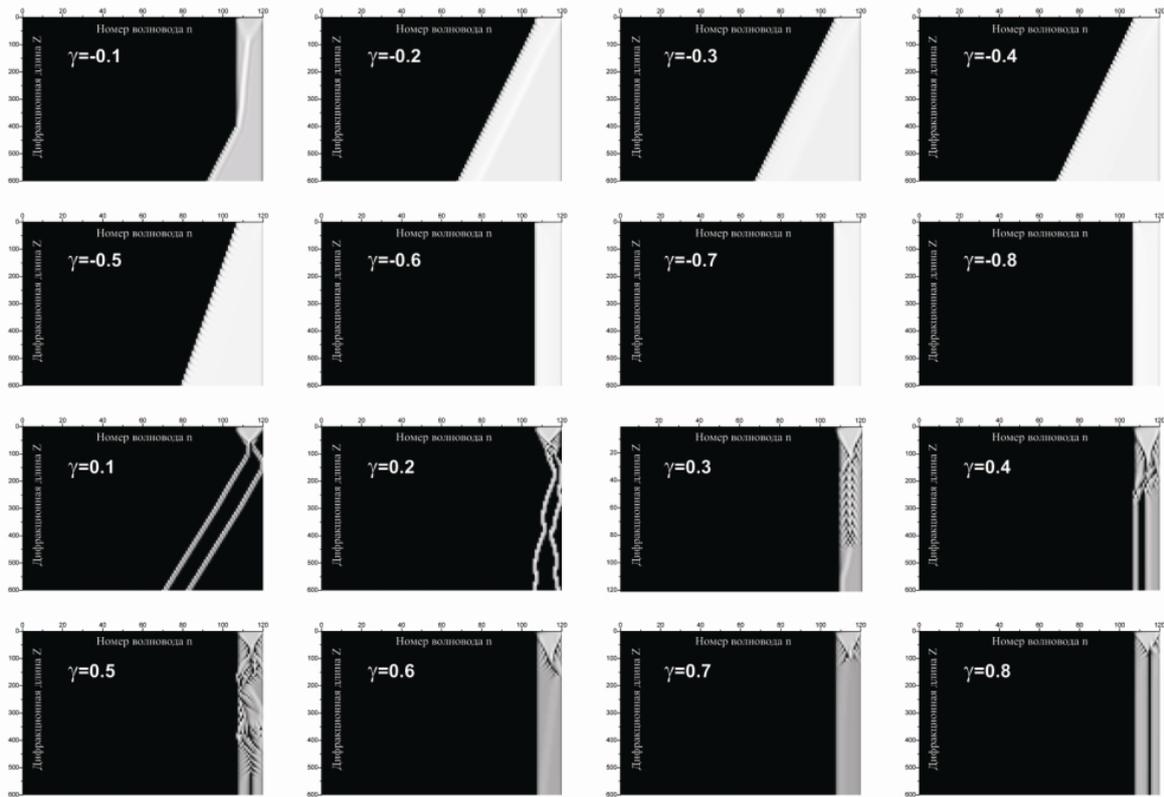


Рис. 9. Схема эволюции солитоноподобного состояния электрического поля в различных кубически нелинейных схемах

Заключение

Сообщение демонстрирует принципиальную возможность формирования устойчивых локализованных солитоноподобных структур оптического излучения при его распространении в периодических системах нелинейных волноводов. Вводится новое понятие дискретных диссипативных поверхностных солитонов, проводится анализ эволюции таких локализованных мод с введением в среду консервативной нелинейности керровского типа. Таким образом, изучено влияние нелинейных систем смешанного типа на образование и устойчивость поверхностных солитонов в дискретных структурах.

В дальнейшем планируется разработка и приложение двумерных дискретных диссипативных солитонов, а также изучение устойчивости таких состояний. Интересным представляется вопрос столкновения и взаимодействия солитонов в таких нелинейных системах.

По мнению авторов, изучение нелинейных эффектов распространения оптического излучения в дискретной структуре волноводов имеет огромный потенциал применений и приложений нелинейно-оптических элементов управления светом.

Работа поддержана грантом МИНОБРНАУКИ РФ РНП.2.1.1.1189: «Диссипативные солитоны оптического излучения и волн материи».

Литература

1. Christodoulides D.N., Joseph R.I. // Opt. Lett. 1988. V. 13. P. 794.
2. Scott A.C., Macneil L. // Phys. Lett. A. 1983. V. 98. P. 87.
3. Eilbeck J.C., Lomdahl P.S., Scott A.C. // Physica D. 1985. V. 14. P. 318.

4. Кившарь Ю.С., Агравал Г.П. Оптические солитоны. От волоконных световодов до фотонных кристаллов / Пер. с англ. под ред. Н.Н. Розанов. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. 648 с. ISBN 5-9221-0584-1.
5. Eisenberg H.S., Silberberg Y., Morandotti R. et al. // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 81. P. 3383.
6. Eisenberg H.S., Silberberg Y., Morandotti R., Aitchison J.S. // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 85. P. 1863.
7. Morandotti R., Eisenberg H.S., Silberberg Y. et al. // Phys. Rev. Lett. 2001. V. 86. P. 3296.
8. Розанов Н.Н. Оптическая бистабильность и гистерезис в распределенных нелинейных системах. М.: ФИЗМАТЛИТ, 1997. 336 с. ISBN 5-02-014616-1.
9. Маркузе Д. Оптические волноводы. М.: Мир, 1974, 576 с.

КОМПРЕССИЯ И УСИЛЕНИЕ СВЕРХКОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ ПРИ ВКР В ПЛАЗМЕ И СЖАТЫХ ГАЗАХ: ОСОБЕННОСТИ И ОПТИМАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ ПРОЦЕССА

Е.В. Ермолаева

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор В.Г. Беспалов

В работе исследованы особенности процесса попутного и обратного ВКР для усиления и компрессии импульсов фемтосекундной длительности. Проанализированы основные закономерности процесса, выявлены негативные факторы, снижающие эффективность взаимодействия волн, определены оптимальные условия для получения наибольшей эффективности преобразования энергии.

Введение

Одной из наиболее актуальных тем исследований в области фемтосекундных импульсов в последние годы является получение сверхкоротких лазерных импульсов высокой мощности. Важность данной проблемы обуславливается возможностями применения таких импульсов в научных и технических приложениях, таких как рентгеновские лазеры, плазменные ускорители и т.д.

Нелинейная компрессия с использованием процессов вынужденного рассеяния (вынужденное рассеяние Манделштама-Бриллюэна, вынужденное комбинационное рассеяние (ВКР)) является одним из наиболее популярных методов генерации сверхкоротких импульсов [1, 2].

В работе [3] мы исследовали возможности использования плазмы [4, 5] в качестве среды для генерации импульсов фемтосекундной длительности при обратном ВКР. Нами был проведен анализ влияния неоднородности плазмы на процесс генерации стокового импульса, а также выявлены оптимальные условия процесса для достижения максимальной эффективности преобразования энергии в волну Стокса. В данной работе мы еще раз приведем основные результаты расчетов процесса обратного ВКР в плазме, имеющие непосредственное отношение к нашим текущим исследованиям.

Процесс попутного ВКР в приближении плоских волн в сжатых газах рассматривался нами в работе [6], в которой мы провели исследование влияния параметров среды и взаимодействующих волн на процесс перекачки энергии, а также определили оптимальные условия для достижения наибольшей эффективности преобразования энергии. В данной работе, учитывая результаты [6], мы провели численные расчеты для попутного ВКР с учетом дифракционных эффектов. Нами было исследовано влияние явления дифракции на процесс взаимодействия пучков различной начальной формы: гауссовой, супер-гауссовой и бессель-гауссовой. Результаты численного моделирования показали, что для получения импульсов наибольшей мощности в начальное распределение волны накачки необходимо ввести фазовую расстройку, позволяющую подавить энергообмен между волнами в хвостовой части стокового пучка и получить на выходе среды одиночный импульс на стоковой частоте.

Обратное ВКР в плазме

Система уравнений и начальные условия

Процесс обратного вынужденного комбинационного рассеяния для случая плоских волн хорошо описывается системой трехволнового взаимодействия в приближении медленно меняющихся амплитуд и фаз:

$$\begin{aligned}
\left[\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{V_p} \frac{\partial}{\partial t} \right] e_p &= \frac{ig}{2} \left(\frac{\omega_p}{\omega_s} \right) e_s q e^{-2ik_s z} \\
\left[-\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{V_s} \frac{\partial}{\partial t} \right] e_s &= \frac{ig}{2} e_p q^* e^{2ik_s z} \\
\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{T_2} + i\varphi(z - z_0) \right] q &= \frac{i}{T_2} e_s^* e_p e^{2ik_s z}
\end{aligned} \tag{1}$$

Здесь $|e_p|^2 = I_p$, $|e_s|^2 = I_s$ – плотности интенсивностей волн накачки и Стокса, q – амплитуда фоновой волны, g – коэффициент стационарного ВКР, T_2 – время дефазировки молекулярных колебаний, $V_{p,s}$, $\omega_{p,s}$ и $k_{p,s}$ – групповые скорости, центральные частоты и волновые числа волн накачки и Стокса, φ – параметр нелинейности среды, z_0 – точка распада.

Исследуя процесс обратного ВКР в плазме, мы рассматривали плоские пучки следующей формы:

$$e_p(z = 0, t) = \sqrt{I_{p0}} \exp(-2 \ln 2 [(t - t_{p0}) / \tau_{p0}]^2), \quad e_p(z = L, t) = 0,$$

$$e_s(z = L, t) = \sqrt{I_{s0}} \exp(-2 \ln 2 [(t - t_{s0}) / \tau_{s0}]^2), \quad e_s(z = 0, t) = 0.$$

Здесь и далее I_{p0} , I_{s0} – начальные пиковые интенсивности взаимодействующих волн, $2\tau_{p0}$, $2\tau_{s0}$ – начальные длительности волн накачки и Стокса по уровню e^{-1} .

Интенсивность фоновой волны во всех точках среды в начальный момент времени полагалась равной нулю.

Численное моделирование

Первым шагом в решении системы (1) для случая обратного ВКР в отсутствии дифракционных членов является интегрирование уравнения для фоновой волны [7]. Далее полученный интеграл можно подставить в первые два уравнения (1), после чего, проведя ряд математических упрощений, мы получим следующую систему из двух уравнений для дальнейшего решения:

$$\frac{\partial e_p}{\partial z} + \frac{1}{V_p} \frac{\partial e_p}{\partial t} = \frac{ig}{2} \frac{\omega_p}{\omega_s} e_s \cdot \frac{1}{T_2} \int_0^t e_p(z, \tau) e_s^*(z, \tau) e^{-(t-\tau)/T_2(z)} d\tau,$$

$$-\frac{\partial e_s}{\partial z} + \frac{1}{V_s} \frac{\partial e_s}{\partial t} = \frac{g}{2} e_p \cdot \frac{1}{T_2} \int_0^t e_p^*(z, \tau) e_s(z, \tau) e^{-(t-\tau)/T_2(z)} d\tau,$$

где $\frac{1}{T_2(z)} = \frac{1}{T_2} + i\varphi(z - z_0)$. Значение интеграла в правых частях уравнений на каждом шаге расчета по z мы рассчитывали по формуле трапеций.

Для получения решения на шаге z_{n+1} мы использовали итеративный подход. В первом приближении аппроксимация производных функций $e_p(z, t)$ и $e_s(z, t)$ проводилась через значения в узлах расчетной сетки, уже известные с предыдущих шагов. Далее мы уточняли решение, используя полученные приближенные значения в качестве начальных условий аппроксимации до тех пор, пока максимальная разность значений функций двух последних приближений не становилась меньше значения выбранной нами погрешности.

Одним из критериев проверки правильности полученных результатов численного моделирования является закон сохранения энергии в системе. В своей численной схеме мы добились погрешности сохранения энергии $< 3\%$.

Результаты численного моделирования

В качестве начальных условий процесса обратного ВКР мы рассматривали следующие значения параметров волн и среды, полученные в результате аналитических оценок [3]: длина волны лазерного импульса – 0.5 мкм, длительность лазерного импульса $\tau_p = 3\text{--}10$ пс, длительность затравочного импульса на стоксовой частоте $\tau_s = 0.1\text{--}0.3$ пс, длина среды с плазмой $L = 0.1\text{--}0.5$ см, частота плазменных колебаний $\omega_{ph} = 0.1 \omega_p$.

Результаты численных расчетов показали, что неоднородность плотности плазмы снижает количество энергии, приходящееся на долю главного пика в усиленном стоксовом сигнале. При этом в данном явлении наблюдается следующая закономерность: до значения $\varphi = 0.002$ [см⁻¹ фс⁻¹] зависимость пикового коэффициента усиления

$$k_{peak} = \frac{W_{peak}}{W_{p0}} \cdot 100\% \quad (W_{peak} \text{ – энергия главного пика в стоксовом импульсе, } W_{p0} \text{ – начальная энергия волны накачки)}$$

от этого параметра очень слаба, тогда как с увеличением неоднородности плазмы фазовая расстройка достигает π и начинает играть существенную роль в процессе усиления, приводя к уменьшению значения пикового коэффициента усиления.

Также нами было замечено, что негативное влияние плазменной неоднородности на процесс энергообмена тем сильнее, чем меньше значения начальных интенсивностей взаимодействующих волн (рис. 1). Данное явление обусловлено явлением захвата фаз, возникающим в случае сильной перекачки энергии между волнами при обратном и попутном ВКР.

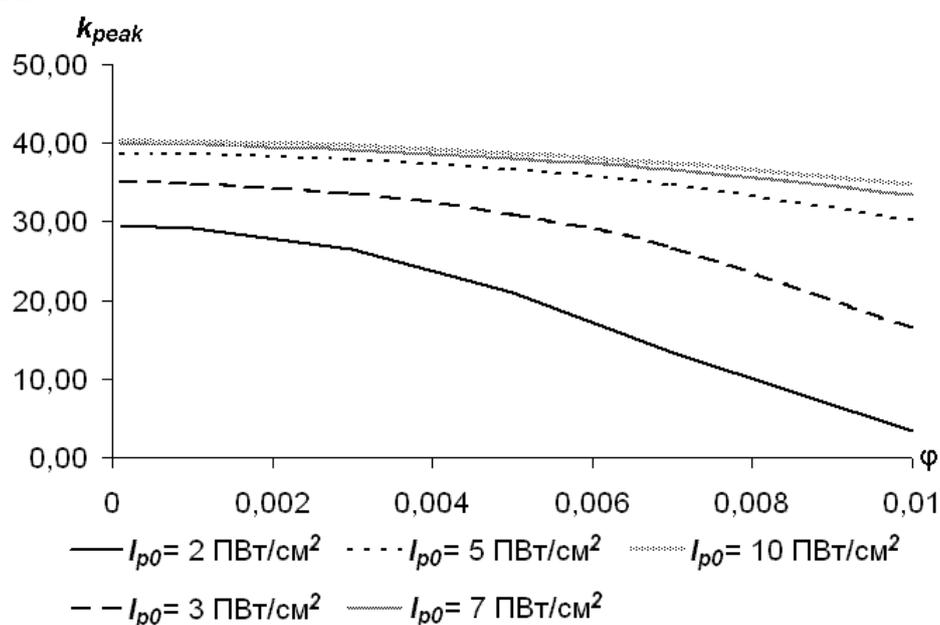


Рис. 1. Зависимость пикового коэффициента усиления (k_{peak}) от неоднородности среды ($\varphi, (\text{см} \cdot \text{фс})^{-1}$) при различных начальных значениях интенсивности волны накачки (I_{p0})

В реальных системах редко удается получить импульсы идеальной формы. В работе [8] было показано, что наличие у волны Стокса предимпульса может существенно повлиять на процесс генерации и компрессии стоксового пучка. Проведенные нами численные расчеты подтвердили данный факт. Нами было замечено, что в случае, когда импульс Стокса сопровождается предимпульсом гауссовой формы, энергия, полученная им в результате взаимодействия с волной накачки, перераспределяется в несколько пиков различной интенсивности, а длительность волны на выходе среды увеличивается в несколько раз.

Тем не менее, негативное влияние предимпульса на процесс компрессии при обратном ВКР может быть компенсировано неоднородностью плотности плазмы, благодаря которой возможно подавление взаимодействия волн в нежелательных областях среды. Из рис. 2 можно заметить, что при интенсивном энергообмене между волнами ($I_{p0} \geq 5$ ПВт/см²) наблюдается наличие оптимума по шкале неоднородности, где эффективность преобразования энергии достигает своего пика. Значение данного оптимума зависит от начальной интенсивности волны накачки. С увеличением значения I_{p0} точка данного оптимума сдвигается в сторону усиления неоднородности. Таким образом, мы показали, что неоднородность плазмы может иметь как негативные последствия – внесение фазовой расстройки снижает эффективность энергообмена, так и позитивные – подавление субимпульсов в импульсе Стокса приводит к выделению одиночного пика малой длительности и большой интенсивности.

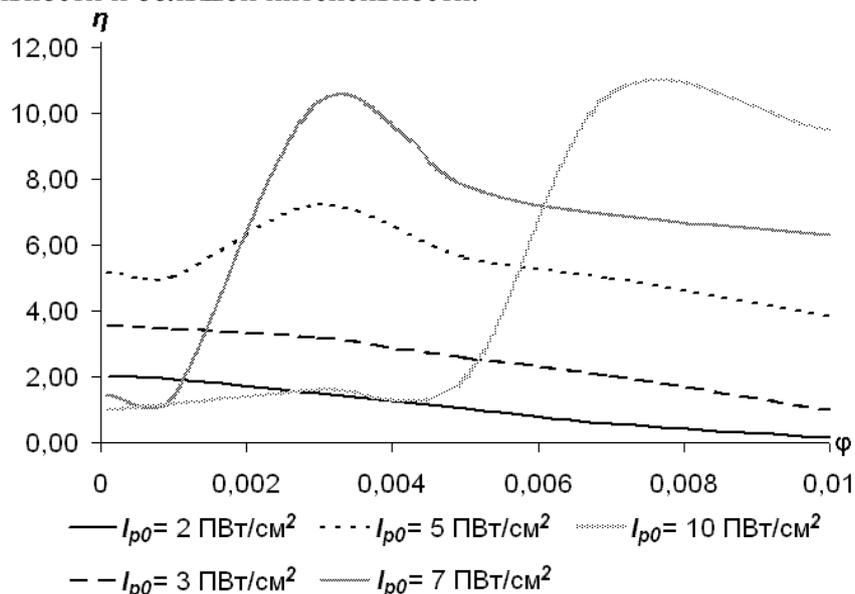


Рис. 2. Зависимость эффективности преобразования (η) от неоднородности среды ($\phi, (\text{см} \cdot \text{фс})^{-1}$) при различных начальных значениях интенсивности волны накачки (I_{p0}) в присутствии предимпульса

Попутное ВКР

Система уравнений и начальные условия

В численных расчетах для случая попутного вынужденного комбинационного рассеяния мы также использовали систему (1), введя в нее дополнительный член

$\Delta_{\perp} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}$, учитывающий дифракцию взаимодействующих волн, а также исключив из уравнения фоновой волны плазменную неоднородность:

$$\left[\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{V_p} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{2k_p} \Delta_{\perp} \right] e_p = ig \left(\frac{\omega_p}{\omega_s} \right) \frac{e_s q}{2}$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial z} + \frac{1}{V_s} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{2k_s} \Delta_{\perp} \right] e_s = ig \frac{e_p q^*}{2},$$

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{T_2} \right] q = i \frac{e_s^* e_p}{T_2}$$

где $k_{p,s}$ – волновые числа волн накачки и Стокса.

Первоначально процесс попутного ВКР исследовался нами для пучков гауссовой и супер-гауссовой формы с осевой симметрией:

$$e_p(z=0, t, r) = \sqrt{I_{p0} \exp(-[(t-t_{p0})/\tau_{p0}]^2)} \cdot \exp(-[r/\omega_{p0}]^n),$$

$$e_s(z=0, t, r) = \sqrt{I_{s0} \exp(-[(t-t_{s0})/\tau_{s0}]^2)} \cdot \exp(-[r/\omega_{s0}]^n).$$

Здесь ω_{p0} , ω_{s0} – радиусы перетяжки пучков накачки и Стокса, n – степень, определяющая порядок гауссовой формы: для гауссовых пучков $n = 2$, для супер-гауссовых $n = 4, 6$.

В последующих расчетах, желая снизить влияние дифракционных эффектов на компрессию сверхкоротких пучков, мы взяли в качестве начальных условий Бессель-гауссовы пучки:

$$e_p(z=0, t, r) = \sqrt{I_{p0} \exp(-[(t-t_{p0})/\tau_{p0}]^2)} \cdot J_n^2(\beta r) \cdot \exp(-r^2/\omega_{p0}^2), \quad (2a)$$

$$e_s(z=0, t, r) = \sqrt{I_{s0} \exp(-[(t-t_{s0})/\tau_{s0}]^2)} \cdot J_n^2(\beta r) \cdot \exp(-r^2/\omega_{s0}^2), \quad (2б)$$

где $J_n(\beta r)$ – функция Бесселя n -ого порядка, $n = 0, 1$; β – параметр бесселева пучка.

Численное моделирование

Для решения системы (1) мы осуществили переход в бегущие координаты $z' = z - ct$, $t' = t$, что позволило убрать из левой части уравнений для волн накачки и Стокса производную по времени. Для учета дисперсии групповых скоростей волн накачки и Стокса мы сдвигали волну Стокса во времени на необходимое количество шагов для каждого пройденного сантиметра среды.

Первые два уравнения системы (1) удобно решить путем применения метода расщепления по координатам [9]: каждое уравнение представляется в виде суммы двух операторов $\frac{\partial f}{\partial z} = L_1 f + L_2 f$, где L_1 – оператор дифракции, а L_2 – оператор нелинейного взаимодействия. Общее решение уравнения f^{n+1} на шаге $n+1$ можно найти, выполнив следующую последовательность действий:

1. используя в качестве начальных условий решение f^n шага n , найти решение f^* дифракционного уравнения $f^* = L_1(f^n)$;
2. подставить решение f^* в уравнение нелинейного взаимодействия и получить решение на шаге $n+1$: $f^{n+1} = L_2(f^*)$.

Уравнение дифракции решалось нами с использованием метода конечных элементов, описанного в работе [9]. В нашем случае применение данного метода сводится к решению трехдиагональной системы уравнений, которая может быть решена методом прогонки:

$$\mathbf{A}' \mathbf{f}^{n+1} = \mathbf{B}' \mathbf{f}^n,$$

где $\mathbf{A}' = \mathbf{A} - ia \frac{\Delta z}{2} \mathbf{B}$, $\mathbf{B}' = \mathbf{A} - ia \frac{\Delta z}{2} \mathbf{B}$, $a(z) = \frac{1}{2k}$, k – волновой вектор соответствующей волны.

Элементы матриц \mathbf{A} и \mathbf{B} для цилиндрической системы координат с центром пучка $r_0 = 0$ могут быть записаны следующим образом:

$$A_{11} = \frac{(\Delta r)^2}{12}, \quad A_{12} = \frac{\Delta r \cdot r_1}{12},$$

$$A_{i-i} = A_{ii-1} = \frac{1}{12} \Delta r (r_{i-1} + r_i), \quad A_{ii} = \frac{2}{3} \Delta r \cdot r_i,$$

$$A_{NN-1} = \frac{1}{12} \Delta r (r_{N-1} + r_N), \quad A_{NN} = -\frac{(\Delta r)^2}{12} + \frac{1}{3} \Delta r \cdot r_L,$$

$$B_{11} = \frac{r_1}{2\Delta r}, \quad B_{12} = -\frac{r_1}{2\Delta r},$$

$$B_{i-1i} = B_{ii-1} = -\frac{r_{i-1} + r_i}{2\Delta r}, \quad B_{ii} = \frac{2r_i}{\Delta r},$$

$$B_{NN-1} = -\frac{r_{N-1} + r_N}{2\Delta r}, \quad B_{NN} = \frac{r_{N-1} + r_N}{2\Delta r},$$

где N – количество шагов по координате r .

Для нахождения решения уравнения нелинейного взаимодействия, как и для решения уравнения фоновой волны, мы использовали метод Рунге-Кутты второго порядка точности.

Проверка правильности численных расчетов

Сравнение результатов с аналитическим решением. Для проверки правильности решения дифракционного уравнения мы провели сравнение полученных результатов с аналитическим решением [10]:

$$e(r, z) = e_0 \frac{\omega_0}{\omega(z)} \exp \left[i\eta(z) - r^2 \left(\frac{1}{\omega^2(z)} + \frac{ik}{2R(z)} \right) \right],$$

где $\omega^2(z) = \omega_0^2 \left(1 + \frac{z^2}{z_0^2} \right)$, $R(z) = z \left(1 + \frac{z_0^2}{z^2} \right)$, $\eta(z) = \text{arctg} \left(\frac{z}{z_0} \right)$, $z_0 = \frac{\pi\omega_0^2}{\lambda}$. Анализ пока-

зал, что численная схема, используемая нами для решения уравнения дифракции, обладает хорошей точностью и малой погрешностью на рассматриваемой нами длине среды ($L = 1$ м).

Проверка выполнения закона сохранения энергии. Для расчета плотности энергии пучка нам необходимо вычислить следующий интеграл:

$$W(z_0) = \int I(x, y, t, z = z_0) dx dy dt = \int \left[\int I(x, y, t, z = z_0) dx dy \right] dt,$$

который может быть представлен в виде суммы

$$W(z_0) = \sum_n G_n \Delta t,$$

где Δt – шаг по времени, а G_n – объем фигуры, изображенной на рис. 3, вычислить который можно по формуле:

$$G_n = \frac{1}{3} \pi \Delta r [I(r_0, t_n)(2r_0 + r_1) + I(r_1, t_n)(r_0 + 2r_1)].$$

Здесь Δr – шаг по координате r ; $r_0, r_1 = r_0 + \Delta r$ – координаты начала и конца текущего шага расчета.

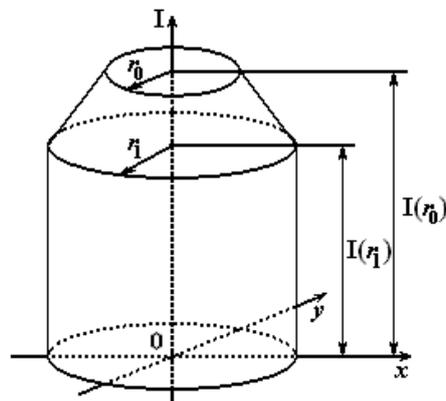


Рис. 3. Расчет плотности энергии пучка

Общая плотность энергии системы может быть рассчитана как сумма плотностей энергий взаимодействующих пучков. В своих расчетах, варьируя значения шагов по различным координатам, мы добились сохранения энергии с погрешностью <3 %

Результаты численного моделирования

В работе [6] мы исследовали процесс компрессии при попутном ВКР для пучков гауссовой формы без учета дифракционных эффектов, т.е. полагали $\exp(-r^2 / \omega_0^2) = 0$ в (2а, 2б). Анализ результатов численного моделирования показал, что наибольшая эффективность преобразования энергии достигается в случае использования для попутного ВКР среды с нормальной дисперсией при сверхрегенеративном режиме усиления. Также нами были определены оптимальные значения коэффициента стационарного ВКР и дисперсии групповых скоростей волн, при которых энергообмен между волнами максимален. Используя эти результаты, мы провели исследование влияния дифракции взаимодействующих пучков на процесс формирования выходного стоксового импульса.

По результатам численного моделирования нами были построены снимки взаимодействующих волн в среде в различные моменты времени. На рис. 4–8 верхний ряд слайдов соответствует распространению волны накачки в среде, нижний – распространению волны Стокса.

Анализ полученных результатов показал, что гауссовы пучки с $R < 0.05 \text{ см}^{-1}$ сильно дифрагируют в среде, что приводит к расплыванию пучка в пространстве по координате r , поэтому достичь эффективной перекачки энергии практически невозможно. С ростом значения радиуса перетяжки R конечная форма стоксового импульса для различных начальных значений R схожа, а в процессе генерации наблюдаются одинаковые закономерности: при малых g ($\approx 0.5 \text{ см/ГВт}$) основное усиление приходится на передний фронт импульса Стокса, а процесс обратной перекачки энергии приводит к появлению вторичного пика в хвостовой части пучка, интенсивность которого значительно уступает первому пику импульса. С ростом значения коэффициента стационарного ВКР влияние обратной перекачки энергии из волны Стокса в волну накачки возрастает, что приводит к выделению в стоксовом импульсе нескольких суб-импульсов высокой интенсивности. Кроме того, для больших g наблюдается отставание энергообмена на краях импульса по оси r , приводящее к сферическому искажению волнового фронта. Оптимальные условия для получения наилучшей эффективности преобразования достигаются для $R = 0.05 \text{ см}^{-1}$, $g = 0.5 \text{ см/ГВт}$ (рис. 4). В данном случае вторичный пик стоксового импульса несет в себе лишь малую часть энергии волны, а влияние дифракционных эффектов не настолько велико, чтобы привести к расплыванию пучка.

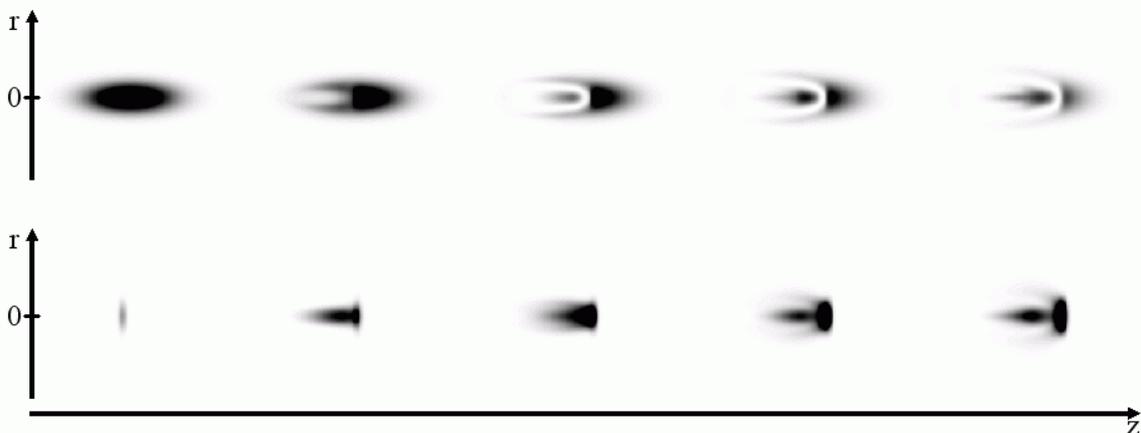


Рис. 4. Распространение волн накачки и Стокса гауссовой формы в среде.
 $I_{p0} = 250 \text{ ГВт/см}^2$, $I_{s0} = 50 \text{ ГВт/см}^2$, $\tau_{p0} = 1000 \text{ фс}$, $\tau_{s0} = 100 \text{ фс}$, $g = 0.5 \text{ см/ГВт}$, $R_p = R_s = 0.05 \text{ см}$

Сравнение результатов моделирования для пучков гауссовой (рис. 5) и супер-гауссовой (рис. 6) формы привело к следующим выводам: сферическое искривление переднего фронта импульса Стокса в случае супер-гауссовых пучков снижается благодаря более сжатой начальной форме волны накачки. В остальном формирование волны Стокса остается прежним: на центральной оси импульса также возникают вторичные пички, которые, тем не менее, в случае сильного взаимодействия обладают большими радиусами, чем в случае пучков с начальной гауссовой формой.

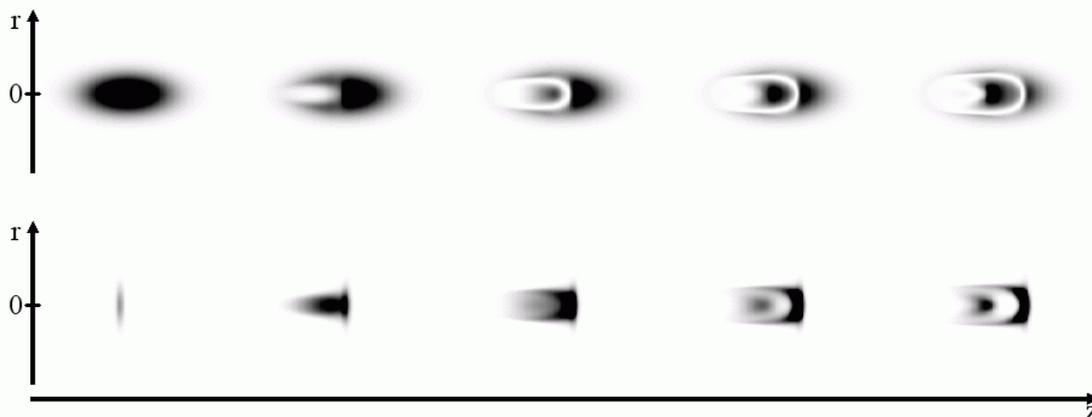


Рис. 5. Распространение волн накачки и Стокса гауссовой формы в среде.
 $I_{p0} = 250 \text{ ГВт/см}^2$, $I_{s0} = 50 \text{ ГВт/см}^2$, $\tau_{p0} = 1000 \text{ фс}$, $\tau_{s0} = 100 \text{ фс}$, $g = 0.5 \text{ см/ГВт}$, $R_p = R_s = 1 \text{ см}$

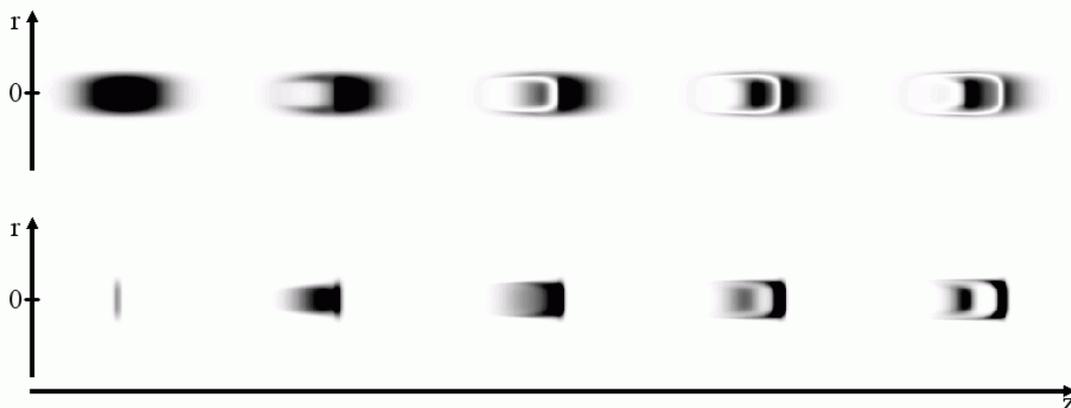


Рис. 6. Распространение волн накачки и Стокса супер-гауссовой формы в среде, $n = 4$.
 $I_{p0} = 250 \text{ ГВт/см}^2$, $I_{s0} = 50 \text{ ГВт/см}^2$, $\tau_{p0} = 1000 \text{ фс}$, $\tau_{s0} = 100 \text{ фс}$, $g = 0.5 \text{ см/ГВт}$, $R_p = R_s = 1 \text{ см}$

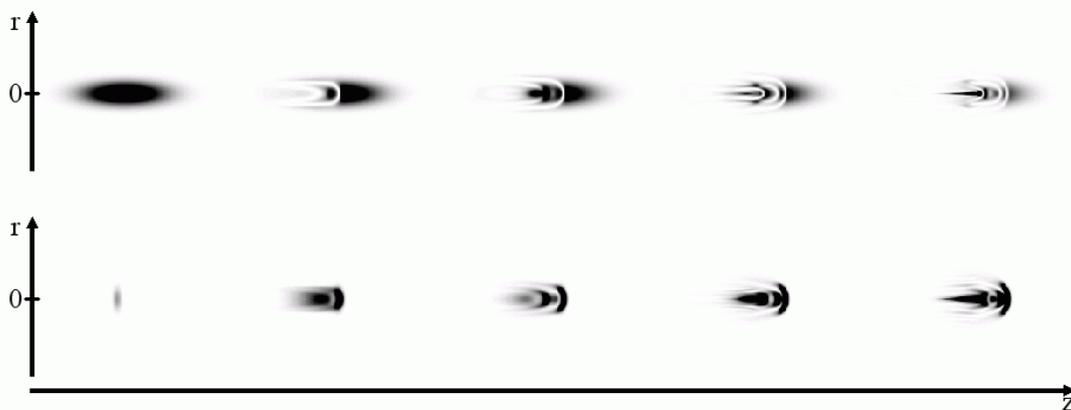


Рис. 7. Распространение волн накачки и Стокса Бессель-гауссовой формы в среде.
 $I_{p0} = 250 \text{ ГВт/см}^2$, $I_{s0} = 50 \text{ ГВт/см}^2$, $\tau_{p0} = 1000 \text{ фс}$, $\tau_{s0} = 100 \text{ фс}$, $g = 2 \text{ см/ГВт}$, $R_p = R_s = 0.1 \text{ см}$,
 $\beta = 10 \text{ см}^{-1}$

Также нами были проведены расчеты для пучков Бессель-гауссовой формы. В данном случае форма конечного стоксового импульса при сильном энергообмене ($g = 2$ см/ГВт) обладает более сложной структурой: в импульсе можно выделить не только вторичные пики на центральной оси, но также некоторые области высокой интенсивности на краях импульса, обусловленные дифракционными эффектами (рис. 7).

Основываясь на вышеприведенном анализе, мы сделали вывод, что для получения сверхкороткого импульса высокой мощности при попутном ВКР в начальное распределение волны накачки необходимо ввести фазовую нелинейность, которая, аналогично неоднородности плотности плазмы, будет препятствовать нежелательному взаимодействию волн, снижая интенсивность вторичных пиков, образующихся в стоксовом импульсе. Так, на рис. 8 отображен случай, когда в исходную волну накачки добавлена квадратичная фаза $\Psi(t) = -at^2$.

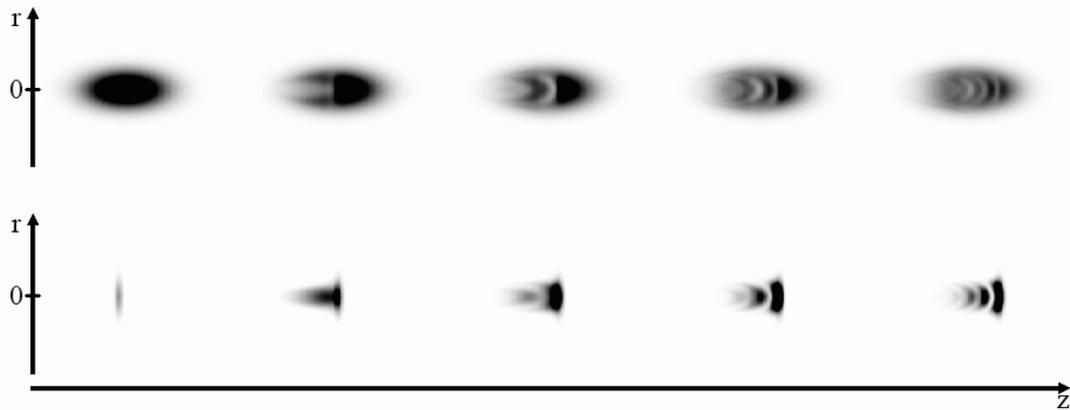


Рис. 8. Распространение волн накачки и Стокса гауссовой формы в среде, волна накачки обладает фазовой нелинейностью. $I_{p0} = 250$ ГВт/см², $I_{s0} = 50$ ГВт/см², $\tau_{p0} = 1000$ фс, $\tau_{s0} = 100$ фс, $g = 0.5$ см/ГВт, $R_p = R_s = 1$ см, $a = 0.00001$ фс⁻²

Из сравнения рис. 5 и рис. 8 можно заметить, что в последнем случае основная доля энергии волны Стокса сосредоточена в первом пичке, обладающем малыми длительностью и радиусом перетяжки. Кроме того, здесь не наблюдается дифракционных эффектов по краям пучка, которые присутствуют на рис. 5. Таким образом, введение фазовой нелинейности в начальное распределение волны накачки позволило сконцентрировать энергообмен на центральной оси взаимодействующих пучков, подавив влияние дифракции. Тем не менее, импульс в данном случае также обладает хвостовой частью, несущей в себе часть полученной от волны накачки энергии. Для погашения вторичных пичков в хвосте импульса необходимо более подробное исследование введения фазовой нелинейности в волну накачки.

Заключение

В данной работе проведено исследование основных закономерностей компрессии фемтосекундных импульсов при попутном и обратном ВКР.

Показано, что использование неоднородной плазмы при обратном ВКР позволяет скомпенсировать негативное влияние предимпульса на процесс формирования конечного стоксового сигнала и в оптимальных условиях получить эффективность преобразования энергии в волну Стокса до 12 раз.

Для случая попутного ВКР в оптимальных условиях энергообмена исследовано влияние дифракционных эффектов на взаимодействие волн. Рассмотрены случаи волн различной начальной формы. Показано, что для подавления явления дифракции необходимо использовать в качестве начального импульса волну накачки с фазовой нели-

нейностью, поскольку в данном случае фазовая расстройка между взаимодействующими волнами снижает интенсивность перекачки энергии на краях импульса Стокса.

Работа была частично поддержана грантами РФФИ №06-02-08317-офи, №06-02-17303-а, №06-02-01824-э_б, №06-02-03035-б.

Литература

1. Murray J.R., Goldhar J., Eimerl D., Szoke A. Raman Pulse Compression of Excimer Lasers for Application to Laser Fusion // IEEE J. of Quant. Electron. 1979. V. 15. P. 342–368.
2. Bespalov V.G., Staselko D.I. Spatial-temporal coherence of Stokes radiation under conditions of stimulated Brillouin scattering compression in liquids // Soviet Journal of Quantum Electronics. 1985. V. 15(12), P. 1649–1651.
3. Андреев А.А., Беспалов В.Г., Ермолаева Е.В., Salomaa R.R.E. Компрессия сверхмощных лазерных импульсов в неоднородной плазме при обратном вынужденном комбинационном рассеянии // Оптика и спектроскопия. 2007. Т. 102. № 1. С. 113–120.
4. Kapjak C.E., James C.R. and McMullin J.N. // J. Appl. Phys. 53. 4046 (1982).
5. Андреев А.А., Сутягин А.Н. // Квантовая электроника. 1989. Т. 16. № 12. С. 2457.
6. Yermolayeva E.V., Bespalov V.G. Forward SRS compression-amplification of femtosecond pulses. // Proc. SPIE. USA. V. 4268. 2001. P. 117–122.
7. R. Chu, M. Kanefsky, J. Falk. Numerical study of transient stimulated Brillouin scattering. // J. Appl. Phys. 1992. V. 71. № 10. P. 4653–4658.
8. Tsidilko Yu.A. et al. // Phys. Rev. Lett. 2002. V. 88. P. 235004.
9. Schoulepnikoff L., Mitev V. Numerical method for the modeling of high-gain single-pass cascade stimulated Raman scattering in gases // J. Opt. Soc. Am. B. 1997. V. 14. № 1.
10. Ярив А. Квантовая электроника и нелинейная оптика: Пер. с англ. М.: Сов. радио, 1973.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ТЕРМООБРАБОТКИ НА СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА НАНОСТЕКЛОКЕРАМИКИ, АКТИВИРОВАННОЙ ИОНАМИ ЭРБИЯ

А.В. Клементьева, Е.В. Колобкова, В.А. Асеев
Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор Н.В. Никоноров

Проведены исследования фторосиликатной стеклокерамики, активированной ионами эрбия. Показано, что термообработка фторосиликатного стекла приводит к образованию нанокристаллов фторида свинца. На основании исследований спектрально-люминесцентных свойств установлено, что ион эрбия входит в кристаллическую фазу.

Введение

Фторсиликатные стекла, активированные редкоземельными элементами, представляют большой интерес как материалы для изготовления активных элементов для лазеров и оптических усилителей. После термообработки при температуре, близкой к температуре кристаллизации, можно получить гетерогенный стеклокристаллический материал, в котором фторидные нанокристаллы окружены стеклянной матрицей [1]. Прорастающие кристаллы имеют размер порядка нескольких нм, что исключает рассеяние, и, следовательно, подобные материалы остаются прозрачными в области рабочих длин волн оптических систем, несмотря на большую объемную долю кристаллической фазы. Таким образом, если ионы редкоземельных элементов входят в кристаллическую фазу, такой стеклокристаллический материал сочетает в себе оптические свойства ионов эрбия в стекле и в кристалле, при этом в процессе термообработки можно наблюдать переход от одних к другим.

С точки зрения практического использования стеклокристаллические материалы сочетают в себе лучшие свойства стекол (возможность формообразования – прессование, вытяжка волокна и т.д., возможность изготовления изделия любых размеров) и кристаллов (высокая механическая и термическая прочность, спектрально-люминесцентные и генерационные характеристики). Кроме того, стеклокристаллические материалы отличаются влаго- и газонепроницаемостью, высокими тепло- и электроизоляционными свойствами [2].

Таким образом, исследование влияния термообработки на спектрально-люминесцентные свойства активированной стеклокерамики является важным этапом разработки новых материалов для лазеров и оптических усилителей.

Объект исследования и методика эксперимента

В работе исследованы образцы стеклокерамики системы $30\text{SiO}_2-18\text{PbF}_2-7.5\text{Al}_2\text{O}_3-5\text{ZnF}_2-29\text{CdF}_2$, активированной ErF_3 , которая может выступать в качестве активной среды для волоконных усилителей на 1,5 мкм. В таких системах кристаллическая фаза представляет собой фторид свинца. В качестве центров нуклеации для кубической $\beta\text{-PbF}_2$ фазы выступают соединения ErF_3 . Следовательно, ион эрбия входит в кристаллическую фазу, образуя твердый раствор $\text{Pb}_{1-x}\text{Er}_x\text{F}_{2+x}$ [3]. Такие фторосиликатные стеклокерамики очень интересны, поскольку бескислородное окружение редкоземельного иона обеспечивает меньшую энергию фонона, что уменьшает вероятность безызлучательной релаксации возбуждения. Это приводит к увеличению квантового выхода люминесценции по сравнению с кислородным окружением. Ион эрбия в стеклокерамике может находиться как в стеклянной фазе, так и в кристаллической. В этих

фазах ион эрбия обладает различными спектрально-люминесцентными свойствами. Образование нанокристаллов фторида свинца и переход ионов эрбия в кристаллическую фазу достигается с помощью вторичной термообработки материала.

Вторичная термообработка материала должна обеспечивать получение большой объемной доли кристаллической фазы. Это необходимо для приближения спектральных свойств ионов-активаторов к свойствам, проявляемым ими в кристаллах. В то же время материалы для оптических систем должны оставаться прозрачными, несмотря на большую объемную долю кристаллической фазы, т.е. размеры прорастающих кристаллов должны быть много меньше рабочей длины волны. Это требование также связано с необходимостью сохранения части структуры стекла для возможности последующего изготовления волокон [4]. Исследование изменений спектрально-люминесцентных свойств материала в процессе термообработки является простейшим способом проверки выполнения этих требований. Таким образом, целью настоящей работы является проведение исследований спектрально-люминесцентных свойств фторосиликатной стеклокерамики, активированной ионами эрбия.

В ходе работы использовались образцы из фторосиликатного стекла, активированного эрбием (1 мол%, 1,5 мол% и 3 мол% ErF_3). Размеры образцов $10 \times 10 \times 1$ мм. Образцы термообрабатывались при температуре 475°C . Измерения спектров поглощения производились через каждый час термообработки на спектрофотометре Varian Cary 500 в диапазоне длин волн 250–1700 нм с шагом 0,1 нм. На рис. 1 видно, как изменяется спектр поглощения образца. Рост размера кристаллической фазы ведет к возрастанию рассеяния в области коротких длин волн и изменению формы полос поглощения.

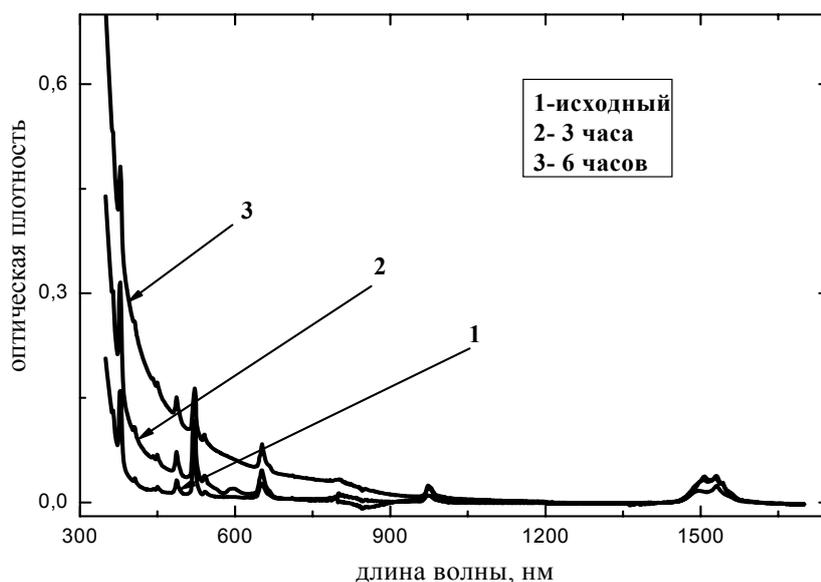


Рис. 1. Зависимость спектра поглощения от времени температурной обработки (1,5 мол% ErF_3)

Рассмотрим полосу поглощения, соответствующую основному лазерному переходу иона эрбия в диапазоне 1400–1700 нм (рис. 2). Видно, что спектр поглощения меняется, поскольку растет доля ионов эрбия, находящегося в кристаллической фазе.

На рис. 3 можно увидеть, как зависит спектр поглощения образцов, подвергнутых одинаковой термообработке (3 часа), от концентрации. Ионы редкой земли являются центрами кристаллизации для PbF_2 . Так как при одинаковом режиме термообработки

вырастает одна и та же объемная доля кристаллической фазы, то за счет меньшей концентрации эрбия обеспечивается более полное вхождение ионов-активаторов в кристаллическую фазу [5].

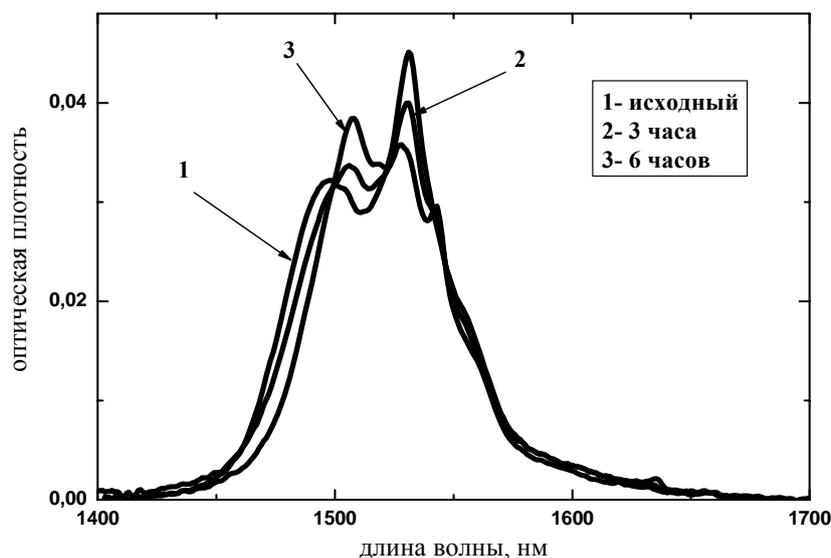


Рис. 2. Зависимость спектра поглощения для перехода $4I_{13/2} \rightarrow 4I_{15/2}$ ионов эрбия от времени температурной обработки (1,5 мол% ErF_3)

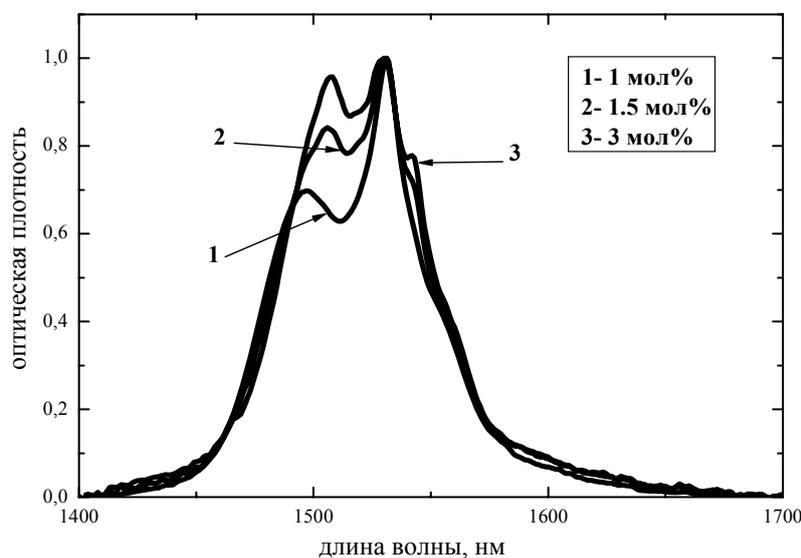


Рис. 3. Влияние концентрации ионов эрбия на поглощения термобработанного образца (время обработки – 3 часа)

Люминесценция образцов возбуждалась модулированным излучением неодимового лазера ($\lambda=532$ нм) (модель Millennium-Xs, Spectra Physics). Далее излучение фокусировалось на входных щелях монохроматора (модель Acton-300, Acton Research Corporation) и приёмника InGaAs (модель ID-441, Acton Research Corporation) в диапазоне 1400–1700 нм. Сигналы от приемника усиливались и обрабатывались при помощи цифрового синхронного усилителя (модель SR850 фирмы «Stanford Research Systems»).

В процессе температурной обработки образцов исследовалось изменение спектра люминесценции. На рис. 3 видно, как с ростом кристаллов в результате обработки вначале происходит увеличение ширины спектра, что вызвано наложением спектров люминесценции ионов эрбия в стекловидной и в кристаллической фазах, затем спектр сужается и проявляется характерная для спектров кристаллов штарковская структура. Полуширина спектра люминесценции ионов эрбия в исходном образце составляет 51 нм, в термообработанном – 69 нм.

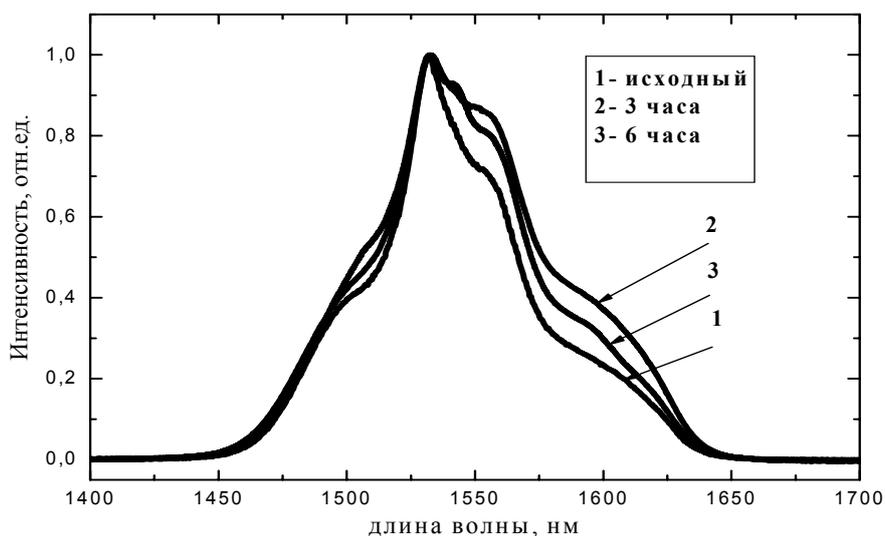


Рис. 4. Влияние времени температурной обработки на спектр люминесценции (1,5 мол% ErF_3)

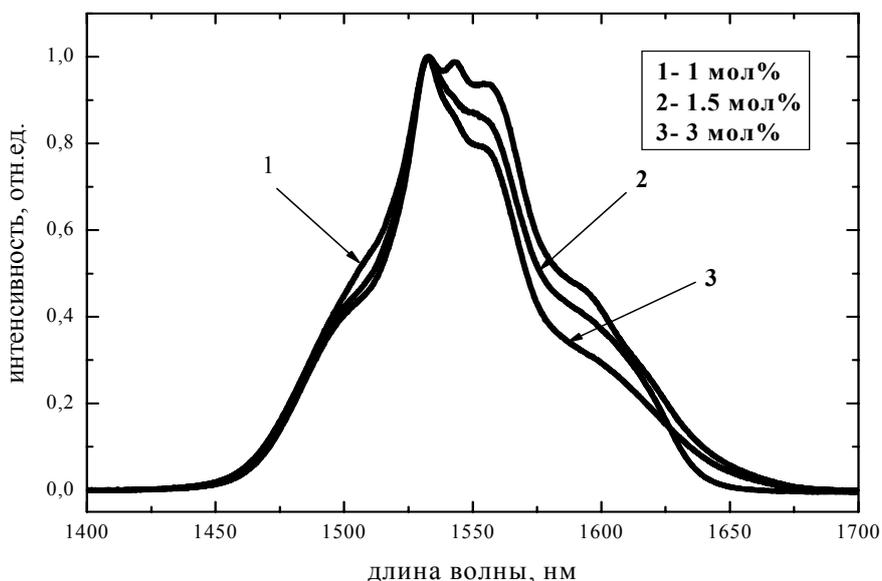


Рис. 5. Влияние концентрации ионов эрбия на спектр люминесценции термообработанного образца (время обработки – 3 часа)

На рис. 5 можно увидеть, как зависит спектр люминесценции образцов, подвергнутых одинаковой термообработке (3 часа), от концентрации. Аналогично поглоще-

нию, можно наблюдать, как при одинаковом режиме термообработки за счет меньшей концентрации эрбия обеспечивается более полное вхождение ионов-активаторов в кристаллическую фазу, о чем свидетельствует структура спектров. У образца с меньшей концентрацией спектр имеет штарковскую структуру, характерную для спектров кристаллов, тогда как при более высоких концентрациях наблюдаются спектры, характерные для стекла.

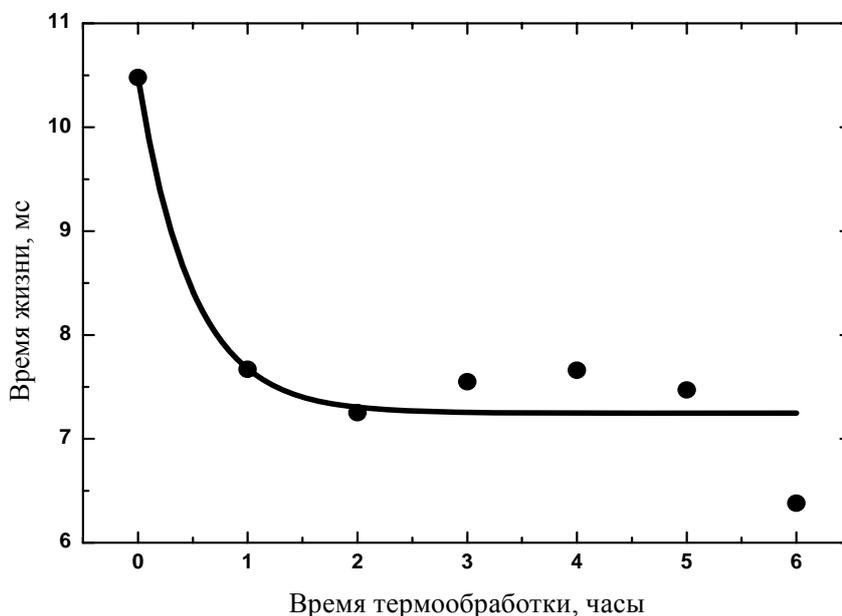


Рис. 6. Влияние времени температурной обработки на время жизни люминесценции (1,5 мол% ErF_3)

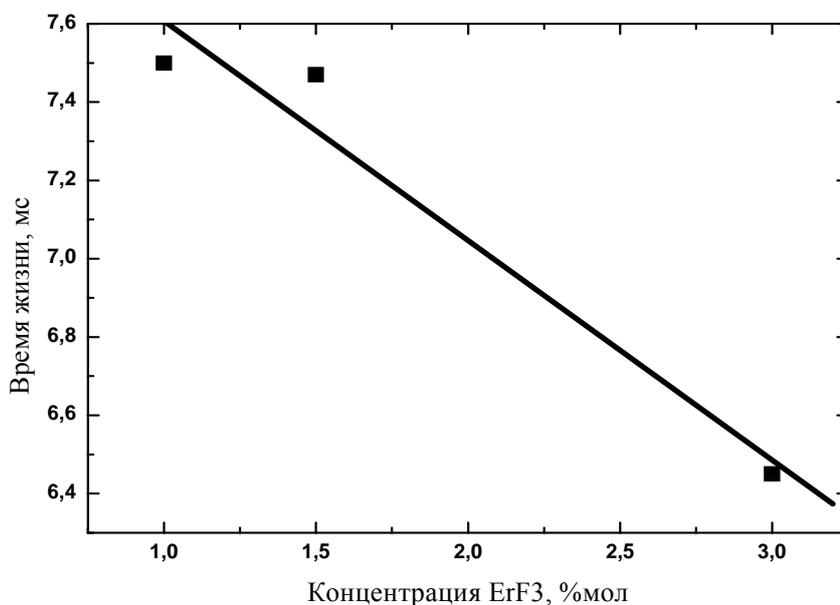


Рис. 7. Влияние концентрации ионов эрбия на время жизни люминесценции термообработанного образца (время обработки – 3 часа)

В ходе работы исследовалось изменение времени жизни люминесценции образца. Для измерения кинетики затухания люминесценции использовано излучение импульс-

ного лазера LQ 129 фирмы Solar Laser system ($\lambda_{\text{pump}} = 975$ нм). Кривые затухания люминесценции регистрировались цифровым запоминающим осциллографом (модель Infinium HP54830 фирмы Agilent Technologies). Далее время жизни определялось через отношение площади под кривой затухания к ее амплитуде.

На рис. 6 видно, что с ростом кристаллической фазы происходит уменьшение времени жизни люминесценции, что связано с таким распространенным в стеклокерамических материалах явлением, как утеснение люминесцирующих центров [5].

На рис. 7 показана зависимость времени жизни люминесценции термообработанного образца от концентрации ионов эрбия. Уменьшение времени жизни обусловлено концентрационным тушением.

Заключение

В работе исследовано влияние термообработки (увеличения размера и объемной доли кристаллической фазы) на изменение спектров поглощения и люминесценции наностеклокерамики, активированной ионами эрбия. На основании спектрально-люминесцентных исследований сделано заключение, о том, что ионы эрбия входят в кристаллическую фазу. Показана перспективность использования разработанной стеклокерамики для создания лазеров и волоконных усилителей света на 1.5 мкм.

Литература

1. E. Desurvire. Erbium-doped Fiber Amplifiers, Wiley, New York, 1994.
2. P.A. Tick, N.F. Borrelli, L.K. Cornelius, M.A. Newhouse. // J. Appl. Phys. 1995. 78 (11). P. 6367.
3. G. Dantelle et al. // Journal of Solid State Chemistry. 2006. 179. P. 2003–2011.
4. F. Lahoz, I.R. Martin, J. Mendez-Ramos. // P. Nunez, J. Chem. Phys. 2004. 120. P.6180.
5. Уляшенко А.М., Никоноров Н.В., Пржеvusкий А.К. Форестеритовая наностеклокерамика, активированная ионами Cr^{4+} для волоконных лазеров и усилителей, // Известия РАН. Серия физическая. 2007. Т. 71. №2. С. 171–174.

СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА ВЫСОКОКОНЦЕНТРИРОВАННЫХ ИТТЕРБИЙ-ЭРБИЕВЫХ МЕТАФОСФАТНЫХ СТЕКОЛ ДЛЯ МИКРОЛАЗЕРОВ

А.С. Златов, В.А. Асеев

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор Н.В. Никоноров

Исследованы спектральные свойства стекол, активированных ионами эрбия и иттербия с максимальными концентрациями иттербия. Измерены спектры поглощения и определены параметры Джадда-Офельта для метафосфата иттербия, активированного эрбием.

Введение

С момента получения первого индуцированного излучения ионов Er^{3+} в стекле Шнитцером и Вудкоком в 1965 году на длине волны 1,54 мкм наблюдается повышенный интерес к эрбиевым кристаллам и стеклам [1]. Это связано, прежде всего, с тем, что такая длина волны является, во-первых, оптимальной для передачи информации по волоконно-оптическим линиям связи [2], во-вторых, лежит в безопасном для глаз диапазоне длин волн [3]. Специфика эрбиевых лазеров заключается, прежде всего, в том, что накопление энергии возбуждения на верхнем лазерном уровне в таких стеклах осуществляется преимущественно (или полностью) через канал сенсibilизации. КПД же непосредственного возбуждения ионов Er^{3+} крайне низка из-за относительно слабых полос поглощения [4]. Для ионов Er^{3+} эффективными сенсibilизаторами оказались ионы Yb^{3+} , которые имеют интенсивную полосу поглощения в области 0,9–1,02 мкм с «эффективной» шириной порядка 1000 см^{-1} . В этом случае накопление энергии возбуждения на верхнем лазерном уровне Er^{3+} (${}^4I_{11/2}$) осуществляется главным образом через канал сенсibilизации $Yb^{3+} \rightarrow Er^{3+}$ (${}^4I_{11/2}$) $\rightarrow Er^{3+}$ (${}^4I_{13/2}$). То есть при оптической накачке возбуждаются ионы Yb^{3+} , а затем происходит безызлучательная передача энергии ионам Er^{3+} на уровень ${}^4I_{11/2}$, который является резонансным с метастабильным уровнем ${}^4F_{5/2}$ ионов иттербия. В таких условиях энергетические характеристики эрбиевых лазеров в решающей степени определяются эффективностью безызлучательного переноса возбуждения в паре $Yb^{3+} - Er^{3+}$.

Эффективность безызлучательного переноса энергии сильно зависит от концентрации ионов иттербия, а также от матрицы стекла [4]. Типичные концентрации ионов иттербия в иттербий-эрбиевых лазерных фосфатных стеклах составляют $(19-21) \times 10^{20}\text{ см}^{-3}$ [5–7]. Такие концентрации ионов иттербия позволяют осуществлять эффективную накачку и передачу возбуждения для концентраций ионов эрбия вплоть до $1 \times 10^{20}\text{ см}^{-3}$ [4]. Дальнейшее увеличение концентрации ионов эрбия приводит к снижению эффективности безызлучательного переноса от иттербия к эрбию, что, наряду с другими факторами, например ап-конверсией, снижает эффективность лазера. Увеличение же концентрации иттербия может снизить пороги генерации, увеличить предельные концентрации ионов эрбия и улучшить генерационные свойства лазеров, работающих в режиме модулированной добротности [8]. Однако работы по созданию и исследованию стекол с высокими (более $21 \times 10^{20}\text{ см}^{-3}$) концентрациями ионов иттербия отсутствуют. В настоящей работе были синтезированы стекла, активированные ионами иттербия и эрбия вплоть до предельных концентраций ионов иттербия (до $52,4 \times 10^{20}\text{ см}^{-3}$), а также исследованы их спектральные свойства.

Объект исследования

В работе синтезированы эрбиевые метафосфатные стекла в системе $75P_2O_5 - 25RE_2O_3$ (мол.%), где $RE_2O_3 = La_2O_3, Yb_2O_3, Er_2O_3$. Стекла с переменным содержанием ионов иттербия были синтезированы в кварцевых тиглях при температурах 1450°C –

1550 °С и отожжены при температурах 550 °С – 600 °С в зависимости от состава. В ходе варки все стекла были обезвожены путем барботирования кислородом через кварцевую трубку. После обезвоживания расплавы осветляли в течение 90 мин для удаления пузырей, затем отливали в графитовые формы и отжигали.

В работе был получен следующий концентрационный ряд метафосфатных стекол: $75P_2O_5-(25-x)La_2O_3-xYb_2O_3$, где $x=0; 5; 10; 15; 20; 25$ (мол.%). При постоянной концентрации ионов эрбия $0,29 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ изменялась концентрация ионов иттербия от 0 до максимально возможной – $52,4 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ за счет замещения ионов лантана (табл. 1). Таким образом, первое стекло в этом ряду представляло собой метафосфат лантана, а последнее – метафосфат иттербия.

№ образца	$N_{Er}, 10^{20} \text{ см}^{-3}$	$N_{Yb}, 10^{20} \text{ см}^{-3}$
1	0,29	0
2		10,5
3		20,9
4		31,4
5		41,7
6		52,4

Таблица 1. Составы образцов

В работе были измерены спектры поглощения. Измерения проводились на образцах в виде плоскопараллельных пластин (15×15 мм) разной толщины (0,3–2 мм). Спектры поглощения образцов измерялись на спектрофотометре Varian Cary 500 (оптическая плотность $D = 0-4$, спектральный диапазон регистрации 300–3300 нм, с шагом 0,1 нм). Все измерения проводились при комнатной температуре. Из спектров поглощения были рассчитаны сечения поглощения и определены параметры Джадда-Офелта.

Экспериментальные результаты

Спектральные свойства

На рис. 1 показаны спектры поглощения иттербия в области перехода $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{11/2}$. Видно, что с увеличением концентрации иттербия коэффициент поглощения для длины волны 975 нм увеличивается, достигая максимального значения $47,5 \text{ см}^{-1}$ при предельной концентрации иттербия $52,4 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ (рис. 1, а).

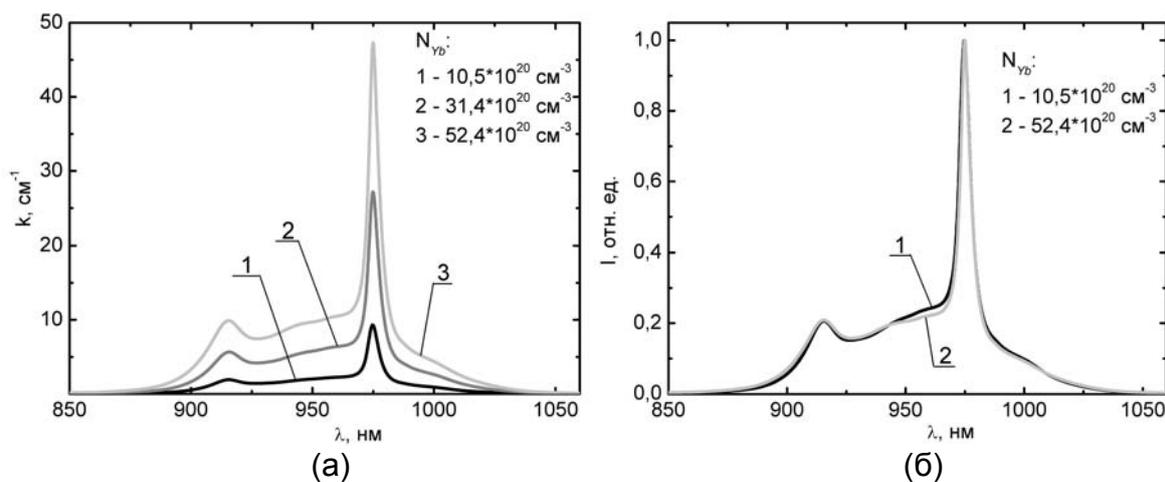


Рис. 1. Сравнение спектров поглощения ионов Yb^{3+} : а) исходных, б) нормированных по максимуму

В связи с тем, что из-за сложности контроля концентрации ионов активаторов при варке стекол их реальные значения могут отличаться от расчетных, производилась проверка на выполнение закона Бугера-Ламберта-Бера [9]. Результаты представлены на рис. 2.

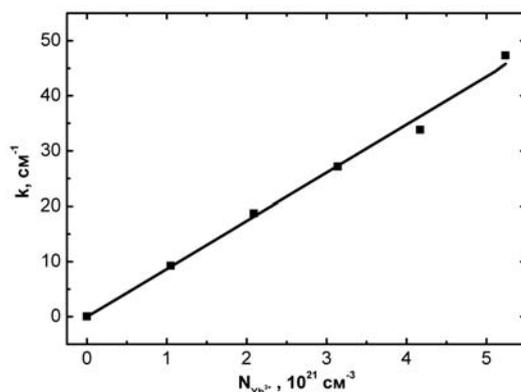


Рис. 2. Закон Бугера-Ламберта-Бера для метафосфатных эрбиевых стекол

Коэффициент поглощения практически линейно зависит от концентрации ионов активатора в исследуемом концентрационном ряде стекол, что говорит о выполнении закона Бугера-Ламберта-Бера. Таким образом, реальные значения концентрации ионов активатора совпадают с расчетными.

На рис. 1, б показано сравнение формы спектров поглощения иттербия, нормированных по максимуму, для образцов с минимальной ($10,5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$) и максимальной ($52,4 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$) концентрациями ионов иттербия. Для таких концентраций контур спектра практически не изменяется. Таким образом, можно заключить, что форма контура поглощения для иттербия как активатора совпадает с формой контура иттербия, выполняющего роль стеклообразователя, т.е. предельные концентрации иттербия не изменяют его спектр поглощения.

На рис. 3 изображены спектры поглощения ионов эрбия для перехода $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{13/2}$ (1,5 мкм) при разных концентрациях ионов иттербия. Из графиков видно, что с увеличением концентрации иттербия интенсивности полос уменьшаются (рис. 3, а). Более того, при нормировке этих спектров по максимуму (рис. 3, б) видны заметные различия в контурах поглощения эрбия с разным окружением. Изменение интенсивности поглощения связано с изменением ближайшего окружения ионов эрбия и его сил осцилляторов, т.е. лантан и иттербий по-разному воздействуют на эрбий.

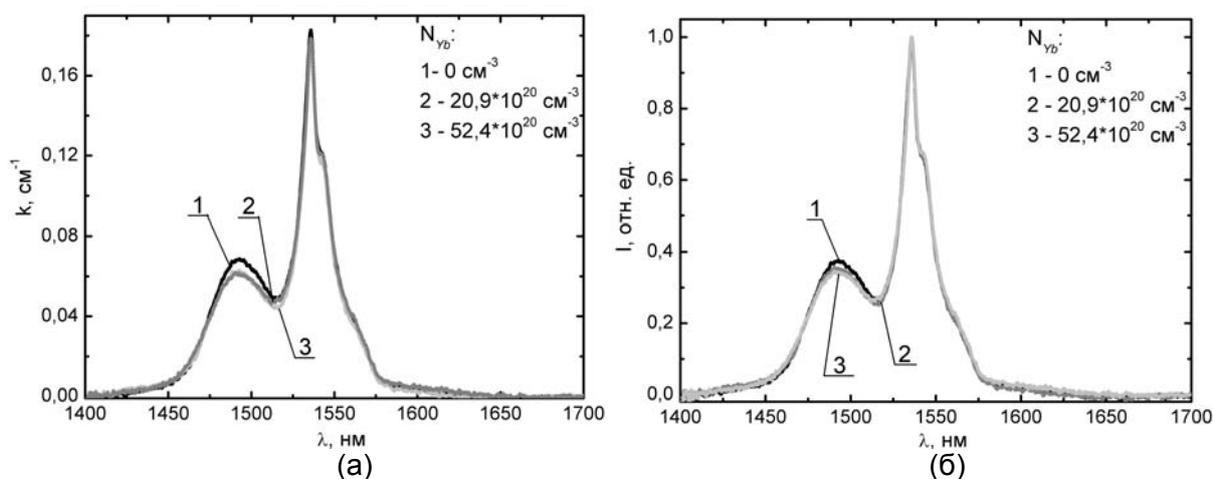


Рис. 3. Сравнение спектров поглощения ионов Er^{3+} : а) исходных, б) нормированных по максимуму

Параметры Джадда-Офельта

Расчет параметров Джадда-Офельта [10, 11] проведен на основе определения сечений поглощения для электрических дипольных переходов. Получены три параметра Ω_i ($i=2, 4, 6$) (табл. 2).

Образец №	$\Omega_2, 10^{-20} \text{ см}^2$	$\Omega_4, 10^{-20} \text{ см}^2$	$\Omega_6, 10^{-20} \text{ см}^2$
1	6,22	0,75	0,55
2	6,14	0,71	0,53
3	6,05	0,66	0,52
4	5,82	1,22	0,43
5	5,77	0,79	0,42
6	5,72	0,68	0,34

Таблица 2. Параметры Джадда-Офельта

Как видно, увеличение концентрации ионов иттербия приводит к убыванию параметров Джадда-Офельта: Ω_2 уменьшается с $6,2 \times 10^{-20} \text{ см}^2$ до $5,7 \times 10^{-20} \text{ см}^2$, Ω_4 неравномерно убывает от $1,2 \times 10^{-20} \text{ см}^2$ до $0,7 \times 10^{-20} \text{ см}^2$, Ω_6 значительно убывает от $0,6 \times 10^{-20} \text{ см}^2$ до $0,3 \times 10^{-20} \text{ см}^2$. Таким образом, введение больших концентраций иттербия приводит к изменению параметров Джадда-Офельта. Эти изменения необходимо учитывать при разработке высококонцентрированных иттербий-эрбиевых стекол с предельными концентрациями иттербия.

Выводы

Получены образцы с высокими концентрациями ионов иттербия вплоть до предельной – $52,4 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$. Показано, что для спектров поглощения ионов иттербия выполняется закон Бугера-Ламберта-Бера. Максимальный коэффициент поглощения на длине волны 975 нм составил $47,5 \text{ см}^{-1}$. Установлено, что форма спектров поглощения ионов иттербия при изменении его концентрации не изменяется. Увеличение концентрации ионов иттербия приводит к уменьшению интенсивности полос поглощения ионов эрбия. Кроме того, изменение концентрации ионов иттербия влияет на форму контура поглощения эрбия. Рассчитаны параметры Джадда-Офельта для ионов эрбия, показано изменение этих параметров от концентрации ионов иттербия.

Полученные данные необходимы для определения предельных концентраций ионов эрбия и иттербия в лазерном стекле, а также оптимизации их соотношения для наиболее эффективной работы микролазеров и планарных оптических усилителей света.

Литература

1. Snitzer E., Woodcock R. // Appl. Phys. Lett. 1965. V. 6. P. 45.
2. Курков А.С., Наний О.В. Эрбиевые волоконно-оптические усилители. // Lightwave, 2003. № 3. П. 14–19.
3. Desurvire E. Erbium-doped fiber amplifiers. N. Y.: Wiley, 1994.
4. Алексеев Н.Е., Гапонцев В.П., Жаботинский М.Е., Кравченко В.Б., Рудницкий Ю.П. Лазерные фосфатные стекла. М.: Наука, 1980.
5. Lunter S.G., Fyodorov Yu K., Development of erbium laser glasses. / Proc. of F. Simp. Light materials, Laser Technology material for Optic Telecomm. 1994, v2, p. 327–333.
6. Schott Glass Technologies «IOG-1 laser glasses».
7. Kigre Inc. «QX-type glass».

8. Georgiou E., Musset O., Boduquillon J-P, Denker B., Sverchkov S.E., 50mJ/30ns FTIR Q-switched diode pumped Er:Ybglass 1.54 μm laser. // Opt.Comm. 198 (2001). P.147–153.
9. Ландсберг Г.С. Оптика. М.: Наука, 1976. 567 с.
10. Judd B.R. Optical absorption intensities of rare earth ion. // Phys. Rev. 1962. V. 127. № 3. P. 750–761.
11. Ofelt G.S. Intensities of crystal spectra of rare earth ion // J. Chem. Phys. 1962. V. 36. № 3. P. 511–520.

ИЗМЕРЕНИЕ НАСЕЛЕННОСТИ МЕТАСТАБИЛЬНОГО УРОВНЯ СТЕКОЛ, АКТИВИРОВАННЫХ ИОНАМИ ЭРБИЯ

М.Н. Жукова, В.А. Асеев

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор Н.В. Никоноров

Проведены измерения населенности метастабильного уровня эрбия в иттербий-эрбиевых фосфатных и силикатных стеклах в зависимости от концентрации ионов-активаторов (эрбия и иттербия) и от мощности лазерной накачки. Установлено, что увеличение концентрации ионов иттербия приводит к росту инверсной населенности эрбия, а увеличение концентрации ионов эрбия, наоборот, уменьшает инверсную населенность.

Введение

В 1965 году Снитцером и Вудкоком впервые было получено индуцированное излучение ионов Er^{3+} в стекле на резонансном переходе ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4I_{15/2}$, $\lambda = 1,5$ мкм [1]. С этого момента наблюдается повышенный интерес к стеклам, активированным эрбием. Это связано с тем, что основная волна генерации данного материала (1,5 мкм) является, во-первых, оптимальной для передачи информации по волоконно-оптическим линиям связи, во-вторых, лежит в безопасном для глаз диапазоне длин волн и поэтому очень перспективна для применения в офтальмологии, локации, для обработки материалов и т.д. [2].

Одним из основных недостатков этих стекол является крайне низкая эффективность возбуждения ионов Er^{3+} из-за относительно слабых полос поглощения [3]. Эту проблему можно решить несколькими способами. Можно увеличивать длину активной среды до нескольких метров. Такой подход используется при создании волоконных лазеров. Однако, если требуется создать компактное устройство с длиной лазерной среды несколько сантиметров, то в матрицу требуется вводить дополнительные ионы-сенсibilизаторы. Для ионов эрбия в качестве сенсibilизатора могут выступать ионы иттербия. У ионов эрбия и иттербия перекрываются полосы поглощения в районе 970 нм, т.е. уровни ${}^4I_{11/2}$ у иона эрбия и ${}^4F_{5/2}$ у иттербия являются резонансным [4]. Одной из наиболее подходящих матриц для создания иттербий-эрбиевых лазеров являются фосфатные стекла. К их достоинствам относятся высокие генерационные характеристики, низкая цена, а также высокая эффективность безызлучательного переноса энергии от ионов иттербия к эрбию. Вероятность безызлучательной передачи возбуждения сильно зависит от расстояния между ионами. Поэтому для повышения эффективности передачи возбуждения от сенсibilизатора к акцептору требуется увеличивать концентрации ионов-активаторов [3]. Для эффективной передачи возбуждения с иттербия на эрбий необходимо, чтобы на 1 ион эрбия приходилось порядка 20 ионов иттербия [3]. Максимальная концентрация ионов эрбия в коммерческих иттербий-эрбиевых стеклах составляет 1×10^{20} см⁻³ при концентрации ионов иттербия $(19-21) \times 10^{20}$ см⁻³ [5-7]. При концентрациях ионов эрбия более 1×10^{20} см⁻³ происходит уменьшение эффективности безызлучательного переноса от иттербия к эрбию, а также увеличение процессов миграции и нелинейного тушения люминесценции, что, в конечном счете, снижает эффективность лазера. При увеличении концентрации ионов иттербия в стекле может происходить снижение порога генерации, увеличение предельной концентрации ионов эрбия и уменьшение длительности импульса иттербий-эрбиевого лазера, работающего в режиме модулированной добротности [8]. Однако создание таких стекол связано с рядом технологических трудностей, и работы по синтезу и исследованию свойств стекол с концентрациями иттербия более 21×10^{20} см⁻³ отсутствуют.

В настоящей работе были синтезированы стекла, активированные ионами эрбия и иттербия вплоть до предельных концентраций ($N_{Yb} = 52,4 \times 10^{20}$ см⁻³). Проведены измерения населенности метастабильного уровня эрбия в иттербий-эрбиевых фосфатных стеклах в зависимости от концентрации ионов-активаторов и мощности лазерной накачки.

Объект исследования и эксперимент

В работе были использованы две стеклообразные матрицы: метафосфатная и силикатная. Для исследования были взяты два концентрационных ряда стекол, активированных иттербий-эрбием:

1. иттербиевый фосфатный ряд в системе $75P_2O_5-25RE_2O_3$ (мол. %), где $RE_2O_3 = La_2O_3, Yb_2O_3, Er_2O_3$. Стекла данного ряда были синтезированы в кварцевых тиглях при температурах 1450–1550 °С и отожжены при температурах 550–600 °С в зависимости от состава. В ходе варки все стекла были обезвожены путем барботирования кислородом через кварцевую трубку. После обезвоживания расплавы осветляли в течение 90 мин для удаления пузырей, затем отливали в графитовые формы и отжигали. Таким образом, был получен следующий концентрационный ряд метафосфатных стекол: $75P_2O_5-(25-x)La_2O_3-xYb_2O_3$, где $x = 0; 5; 10; 15; 20; 25$ (мол. %). Здесь при постоянной концентрации ионов эрбия $0,29 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ изменялась концентрация ионов иттербия от 0 до максимально возможной – $52,4 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ за счет замещения ионов лантана (табл. 1);
2. эрбиевый силикатный ряд в системе $64SiO_2-16Na_2O-4ZnO-12F-1Br-3Yb_2O_3$ (мол. %), где при постоянной концентрации ионов иттербия $17,8 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ изменялась концентрация ионов эрбия от 0 до $2,26 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ (табл. 2).

Образцы имели вид плоскопараллельных пластин (10×10 мм) разной толщины (0,3–3 мм). Толщина выбиралась в зависимости от концентрации иона-активатора так, чтобы уменьшить эффект реабсорбции.

№ образца	$N_{Er}, 10^{20} \text{ см}^{-3}$	$N_{Yb}, 10^{20} \text{ см}^{-3}$
Yp1	0,29	10,5
Yp2		20,9
Yp3		31,4
Yp4		41,7
Yp5		52,4

Таблица 1. Иттербиевый фосфатный ряд

№ образца	$N_{Er}, 10^{20} \text{ см}^{-3}$	$N_{Yb}, 10^{20} \text{ см}^{-3}$
Es1	0,26	17,8
Es2	0,56	
Es3	1,13	
Es4	2,26	

Таблица 2. Эрбиевый силикатный ряд

Для измерения населенности метастабильного уровня Er^{3+} использовался метод, разработанный в [9]. Определение населенности метастабильного уровня N_2 осуществлялось по двум методикам. Первая основана на измерении изменения поглощения из основного состояния (Δk^{GSA}) для сверхчувствительного перехода ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^2H_{11/2}$ в спектральной области 520 нм и исходит из предложения, что $N_2 = \Delta N_1$ (ΔN_1 – это обеднение основного уровня ${}^4I_{15/2}$). Вторая основана на измерении поглощения из возбужденного состояния (Δk^{ESA}) для сверхчувствительного перехода ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4G_{9/2}$ в спектральной области 478 нм. Изменение показателя поглощения рассчитывалось по формуле

$$k = \frac{1}{d} \ln \left(\frac{I_{laserON}}{I_{laserOFF}} \right), \quad (1)$$

где d – толщина образца; $I_{laserON}$ – зондирующий сигнал лампочки при лазерной накачке; $I_{laserOFF}$ – зондирующий сигнал лампочки без накачки.

Измерения изменения поглощения из основного Δk_{GSA} и возбужденного Δk_{ESA} состояний проводились на установке, показанной на рис. 1. Для накачки образцов (4) использовалось лазерное излучение от полупроводникового лазера (1) (LDD-10 «ЗАО Полупроводниковые приборы») непрерывного действия с максимальной мощностью 1 Вт. Накачка осуществлялась на длине волны 980 нм (температура лазера 18 °С). Мощность лазерного излучения изменялась от 50 до 590 мВт. В качестве зонда использовалось излучение от лампы (6) (Oriel), которое, проходя через монохроматор (9) (Spectra Pro 500i), регистрировалось ФЭУ (10). Далее сигнал передавался на синхронный усилитель (Модель SR850 DSP) (11) и обрабатывался на компьютере. Все измерения проводились при комнатной температуре.

Результаты и обсуждения

На рис. 2 и 3 показаны спектры полос поглощения с основного состояния (GSA) и полос поглощения с возбужденного состояния (ESA) для разных мощностей накачки.

На рисунках видно, что при увеличении мощности накачки интенсивности полос поглощения с основного состояния (GSA) и полос поглощения с возбужденного состояния (ESA) возрастают. Следовательно, происходит расселение основного уровня и заселение метастабильного. Максимальные значения изменения поглощения из возбужденного и основного состояния, а также сечения этих полос мы использовали для получения значений населенности.

На рис. 4 и 5 представлены зависимости инверсной населенности (N_2/N_{Er}) при переходах ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^2H_{11/2}$ (GSA) и ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4G_{9/2}$ (ESA) от мощности лазерного излучения для фосфатного и силикатного стекол.

Из рисунков видно, что у фосфатных стекол при больших мощностях накачки (590 мВт) населенность метастабильного уровня при переходах с основного и возбужденного состояний различаются на 18 %. У силикатных стекол также при больших мощностях (590 мВт) значения, полученные разными методами, различаются на 30 %. Следовательно, в обоих случаях основной уровень обедняется сильнее, чем заселяется метастабильный ($\Delta N_I > N_2$). Объясняется этот эффект тем, что при больших накачках возможен процесс заселения верхних состояний за счет ап-конверсии. С верхних состояний возможен безызлучательный перенос на метастабильный уровень ${}^4I_{13/2}$, а также прямой радиационный перенос на основной уровень, сопровождающийся зеленой люминесценцией [9].

На рис. 6 и 7 представлены зависимости инверсной населенности (N_2/N_{Er}) при переходах ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^2H_{11/2}$ (GSA) и ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4G_{9/2}$ (ESA) от концентрации ионов-активаторов.

Увеличение концентрации ионов Yb (от типичной концентрации иттербия $20,9 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ до $52,4 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$) для иттербиевого фосфатного стекла приводит к возрастанию инверсной населенности от 63 % до 77 % при одной и той же мощности накачки. Это можно объяснить тем, что увеличение концентрации ионов иттербия приводит к уменьшению расстояния между ионами иттербия и эрбия, что, в свою очередь, увеличивает вероятность безызлучательной передачи возбуждения с донора (иттербия) на акцептор (эрбий). Следовательно, повышается эффективность накачки. Высокая концентрация иттербия за счет более высоких коэффициентов поглощения (у метафосфата иттербия он составляет $47,5 \text{ см}^{-1}$ на длине волны 975 нм) также приводит к увеличению доли поглощаемой энергии накачки.

При увеличении концентрации ионов Er (от $0,56 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ до $2,26 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$) для эрбиевого силикатного стекла инверсная населенность снижается от 24 % до 9 %. При увеличении концентрации ионов эрбия также уменьшается расстояние между ионами. Это приводит к росту миграции возбуждения. Как следствие, возрастают вероятности концентрационного тушения люминесценции и ап-конверсионного тушения [11].

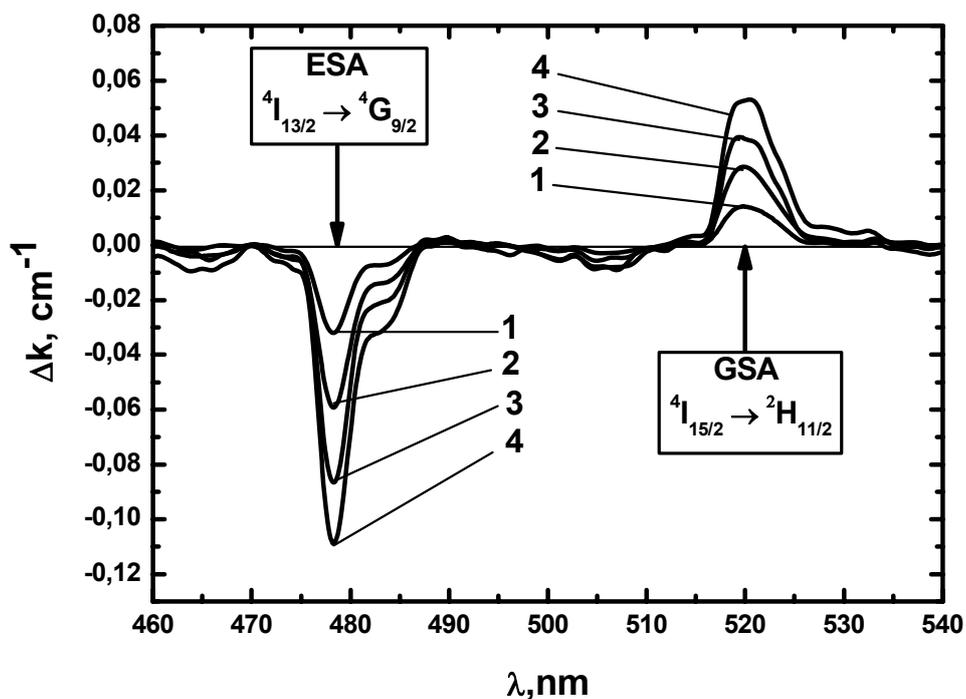


Рис. 2. Спектры полос GSA и ESA для разных мощностей накачки. (1 – 50 мВт, 2 – 110 мВт, 3 – 220 мВт, 4 – 590 мВт) для иттербиевого фосфатного ряда ($N_{Er} = 0,29 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $N_{Yb} = 10,5 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$)

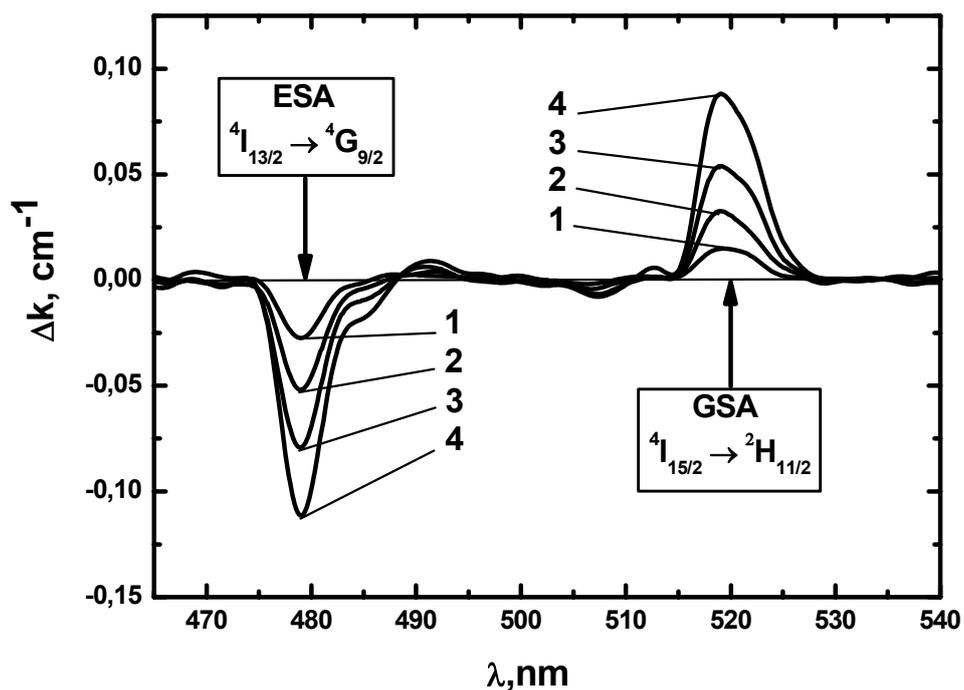


Рис. 3. Спектры полос GSA и ESA для разных мощностей накачки. (1 – 50 мВт, 2 – 110 мВт, 3 – 220 мВт, 4 – 590 мВт) для эрбиевого силикатного ряда ($N_{Yb} = 17,8 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$, $N_{Er} = 2,26 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$)

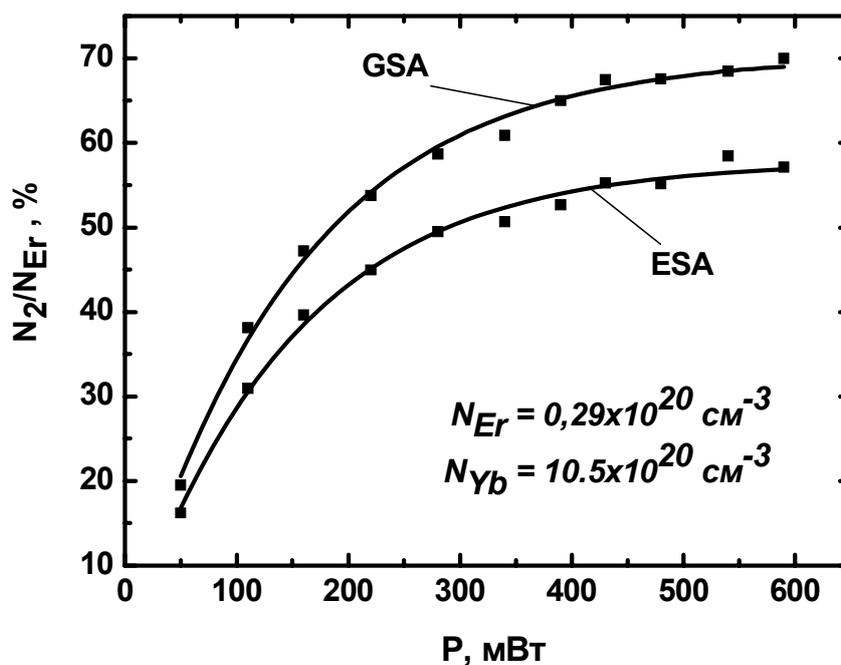


Рис. 4. Зависимость инверсной населенности (N_2/N_{Er}) при переходах $^4I_{15/2} \rightarrow ^2H_{11/2}$ (GSA) и $^4I_{13/2} \rightarrow ^4G_{9/2}$ (ESA) от мощности лазерного излучения для иттербиевого фосфатного стекла (образец №1 $N_{Yb} = 10,5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$)

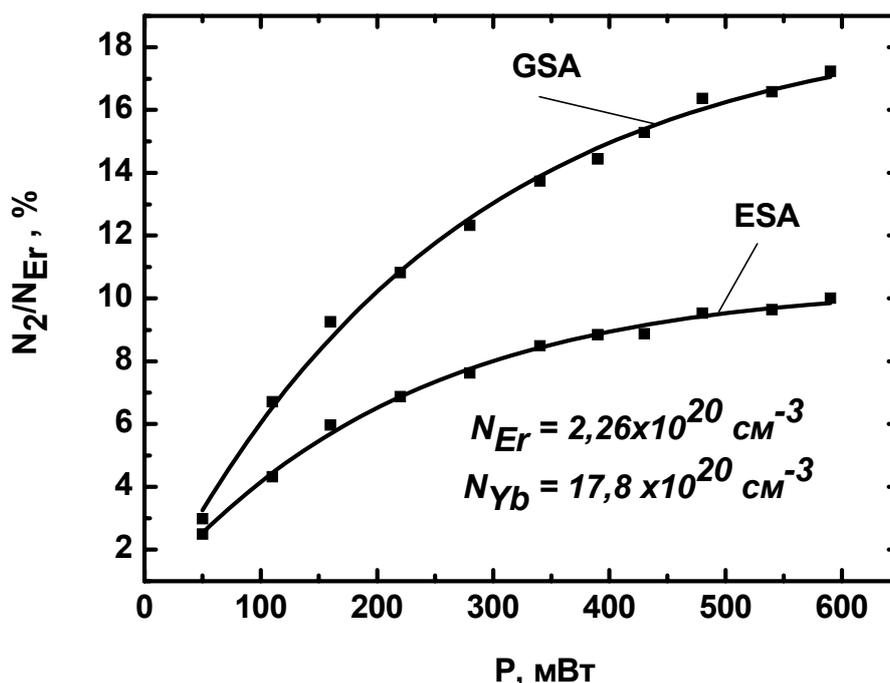


Рис. 5. Зависимость инверсной населенности (N_2/N_{Er}) при переходах $^4I_{15/2} \rightarrow ^2H_{11/2}$ (GSA) и $^4I_{13/2} \rightarrow ^4G_{9/2}$ (ESA) от мощности лазерного излучения для иттербиевого фосфатного стекла (образец №4 $N_{Er} = 2,26 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$)

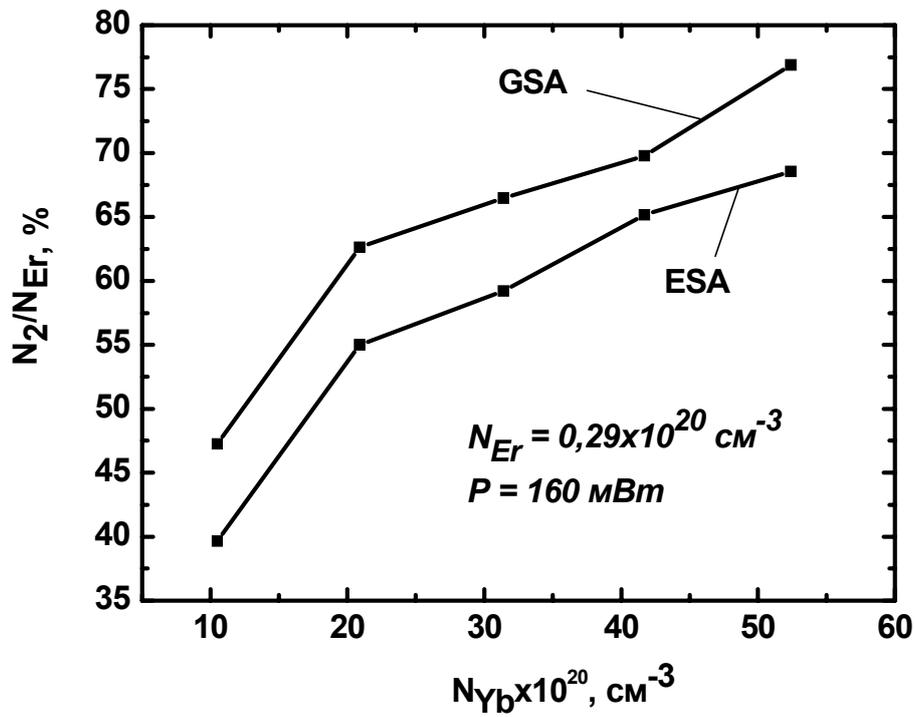


Рис. 6. Зависимость инверсной населенности (N_2/N_{Er}) при переходах ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^2H_{11/2}$ (GSA) и ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4G_{9/2}$ (ESA) от концентрации иттербия при постоянной мощности лазерного излучения ($P = 160$ мВт)

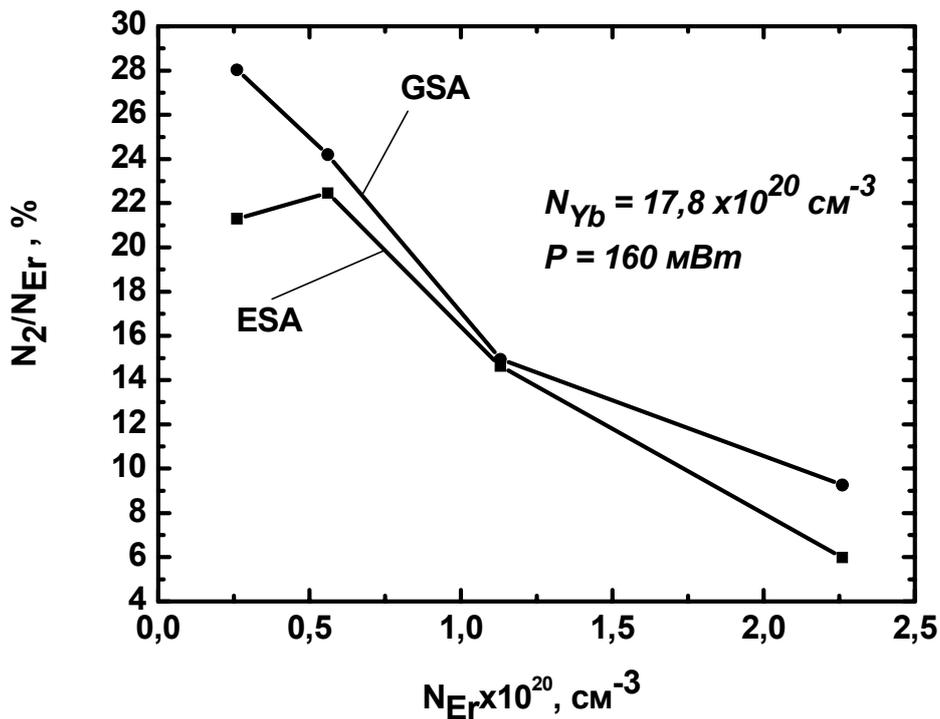


Рис. 7. Зависимость инверсной населенности (N_2/N_{Er}) при переходах ${}^4I_{15/2} \rightarrow {}^2H_{11/2}$ (GSA) и ${}^4I_{13/2} \rightarrow {}^4G_{9/2}$ (ESA) от концентрации эрбия при постоянной мощности лазерного излучения ($P = 160$ мВт)

Выводы

Проведены измерения спектров поглощения из основного состояния и из возбужденного состояний фосфатных и силикатных стекол с различным содержанием ионов активаторов. Установлено, что:

- увеличение концентрации ионов Yb (от $10,5 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ до $52,4 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$) в фосфатном стекле приводит к повышению населенности метастабильного уровня;
- в силикатном стекле увеличение концентрации ионов Er (от $0,26 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$ до $2,26 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$), наоборот, снижает инверсию населенности;
- у фосфатных и силикатных стекол с увеличением мощности лазерного излучения (от 50 мВт до 590 мВт) происходит рост населенности на метастабильном уровне (поглощение с основного состояния для иттербиевого фосфатного стекла увеличивается на 51 %, для эрбиевого силикатного стекла – на 14 %; поглощение с возбужденного состояния для фосфатного стекла возрастает – на 41 %, для силикатного – на 9 %).

На основе полученных данных можно провести оптимизацию концентрации ионов эрбия и иттербия и их соотношения.

Литература

1. Snitzer E., Woodcock R. // *Appl. Phys. Lett.* 1965. V. 6. P. 45.
2. Рудницкий Ю.П., Шачкин Л.В., Залевский И.Д. О кинетике безызлучательного переноса энергии в фосфатных Yb-Er – стеклах, возбуждаемых диодным лазером. М.: Наука. 2002, 197 с.
3. Алексеев Н.Е., Гапонцев В.П., Жаботинский М.Е., Кравченко В.Б., Рудницкий Ю.П. Лазерные фосфатные стекла. М.: Наука. 1980. 352 с.
4. Асеев В.А., Жукова М.Н., Федорова Е.М. Влияние концентрации активаторов на вероятность безызлучательного переноса энергии в высококонцентрированных иттербий-эрбиевых стеклах. // *Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО.* 2006. №26. Исследования в области приборостроения. С. 123–126.
5. Lunter S.G., Fyodorov Yu K. Development of erbium laser glasses. / *Proc. of F. Simp. Light materials, Laser Technology material for Optic Telecomm.* 1994. V. 2. P. 327–333.
6. Schott Glass Technologies «IOG-1 laser glasses».
7. Kigre Inc. «QX-type glass».
8. Georgiou E., Musset O., Boduquillon J-P, Denker B., Sverchkov S.E. 50mJ/30ns FTIR Q-switched diode pumped Er:Yb glass 1.54 μm laser. // *Opt.Comm.* 198 (2001), P. 147–153.
9. Асеев В.А., Никоноров Н.В., Пржеvusкий А.К., Чухарев А.В., Рохмин А.С. Измерение спектров усиления/потерь в высококонцентрированных лазерных стеклах, активированных иттербий-эрбием // *Оптический журнал.* 2003. Т. 70. № 11. С. 18–22.
10. Златов А.С., Асеев В.А., Никоноров Н.В., Пржеvusкий А.К., Федоров Ю.К. Спектральные свойства высококонцентрированных метафосфатных иттербиевых стекол, активированных ионами эрбия. // *Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО.* 2006. №34. Современная оптика. С. 58–60.
11. Nikonorov N.V., Przhevuskii A.K., Chukharev A.V. Characterization of non-linear up-conversion quenching in Er-doped glasses: modeling and experiment // *J. of Non-Crystalline Solids.* 2003. 324. P. 92–108.

РОЛЬ СУРЬМЫ В ФОРМИРОВАНИИ НАНОРАЗМЕРНЫХ СЕРЕБРЯНЫХ КОЛЛОИДНЫХ ЦЕНТРОВ В ФОТОТЕРМОРЕФРАКТИВНОМ СТЕКЛЕ

Е.В. Цыганкова, В.А. Цехомский

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор Н.В. Никоноров

Синтезированы серебряные фототерморефрактивные стекла с переменным содержанием сурьмы от 0 до 0,1 весового процента. Исследована роль сурьмы в формировании коллоидных центров серебра в стекле. Показано, что коэффициент поглощения коллоидного серебра симбатно изменяется с содержанием сурьмы в стекле, а при отсутствии сурьмы в стекле коллоидное серебро в процессе термообработки не образуется.

Введение

Наноразмерные коллоидные частицы серебра, распределенные в матричном стекле, являются типичными плазмонами. Уникальные физические свойства плазмонов открывают огромные возможности их практического использования. Так, например, плазмоны считаются средством передачи информации на компьютерные чипы, так как они могут поддерживать очень высокую частоту. Их также рассматривают в качестве среды для высокоразрешающей литографии и микроскопии из-за их очень малой длины волны. Плазмоны также используются для усиления электромагнитного поля в рамановской спектроскопии. Кроме того, большое внимание уделяется поверхностным плазмонам в биотехнологиях [1].

При образовании коллоидного серебра изменяются спектральные и оптические свойства стекла – пропускание и показатель поглощения. Такой процесс можно использовать для записи объемных амплитудно-фазовых голограмм. В этом случае используют фото-термо-индуцированный процесс образования коллоидного серебра в матрице стекла [2] – под действием ионизирующего излучения в локальном месте стекла образуются центры коллоидообразования, и последующая термообработка приводит к росту коллоидных частиц серебра. Чтобы стекло было чувствительным к воздействию ионизирующего излучения, в него, как правило, вводят ионы церия, меди и другие ионы переменной валентности [2], являющиеся донорами электронов при воздействии излучения. Вместе с тем обязательным компонентом светочувствительных [2] и фототерморефрактивных стекол являются ионы сурьмы, роль которых недостаточно выяснена. Целью настоящей работы явилось исследование роли сурьмы в формировании наноразмерных серебряных коллоидных центров (плазмонов) в фоточувствительном стекле.

Методика эксперимента

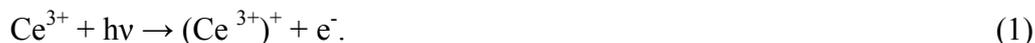
Для проведения исследований в работе синтезированы стекла системы $\text{Na}_2\text{O}-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{ZnO}-\text{SiO}_2$ с переменным содержанием сурьмы от 0 до 0,1 вес.%. Стекла синтезировались в кварцевых тиглях при температуре 1480 °С в воздушной атмосфере. Температура стеклования (T_g) составляла 495 °С. Образцы толщиной 1 мм в виде полированных плоскопараллельных пластин облучались УФ-излучением и термически обрабатывались.

Облучение УФ-излучением осуществлялось ртутной лампой высокого давления. Исследования проводились для следующих доз облучения: 10, 100, 1000 и 10000 Дж. Из спектра излучения ртутной лампы интерференционными фильтрами вырезалась область 290–410 нм. Образец облучался через диафрагму диаметром 5 мм. Термообработка проводилась в муфельной печи при температуре 560 ± 2 °С 3 часа. Спектры поглощения измерялись на всех стадиях эксперимента: 1) у исходного стекла, 2) после УФ-облучения исходного стекла, 3) после термической обработки исходного и облученного

стекла. Измерение спектров поглощения осуществлялось на спектрофотометре Cary-500 в диапазоне длин волн 200–1000 нм с шагом 1 нм.

Результаты и обсуждение

Первым этапом работы явилось исследование спектров поглощения образцов стекол после УФ-облучения. Под действием УФ-излучения в данных стеклах происходит фотоионизация Ce^{3+} с образованием свободных электронов по следующей реакции [3]:



Освободившиеся электроны захватываются на ловушках, которыми могут являться Ag^+ , Sb^{5+} , Ce^{4+} , анионные вакансии стекла и другие дефекты и примеси стекла. В нашем случае наиболее вероятны следующие процессы:



Атомарное серебро Ag^0 термически нестабильно и при нагревании может разрушаться до Ag^+ [4]. В то же время заряженный центр $(\text{Sb}^{5+})^-$ может сохраняться при высоких температурах [5].

На рис. 1 приведены спектры поглощения исходных стекол с разным содержанием сурьмы. Наблюдаемые изменения в спектрах очень небольшие, однако можно заметить определенные тенденции – переход от стекла, не содержащего сурьму, к стеклу, содержащему 0.03 Sb_2O_3 (по синтезу), приводит к смещению границы поглощения в коротковолновую часть спектра. Это можно связать с восстановлением примесей стекла (например, Fe_2O_3) при введении сурьмы. Дальнейшее увеличение содержания сурьмы приводит к смещению границы поглощения в длинноволновую часть спектра. Этот результат согласуется с работой [6].

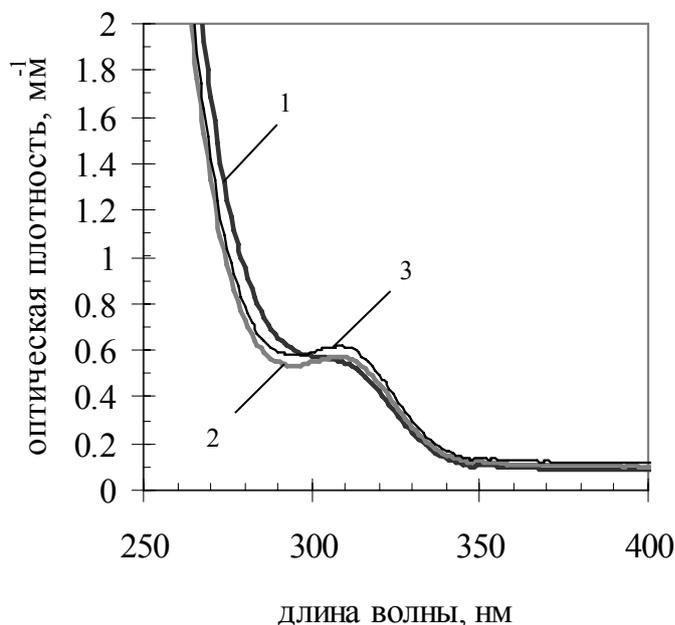


Рис. 1. Спектры поглощения исходных стекол, содержащих Sb_2O_3 (0 вес.% – кривая 1, 0,03 вес.% – кривая 2 и 0,1 вес.% – кривая 3)

На рис. 2 приведены спектры поглощения, полученные при различных дозах облучения образца стекла, содержащего 0.03 вес.% сурьмы. Для стекол, содержащих 0 и 0.1 вес.% сурьмы, наблюдаются похожие зависимости.

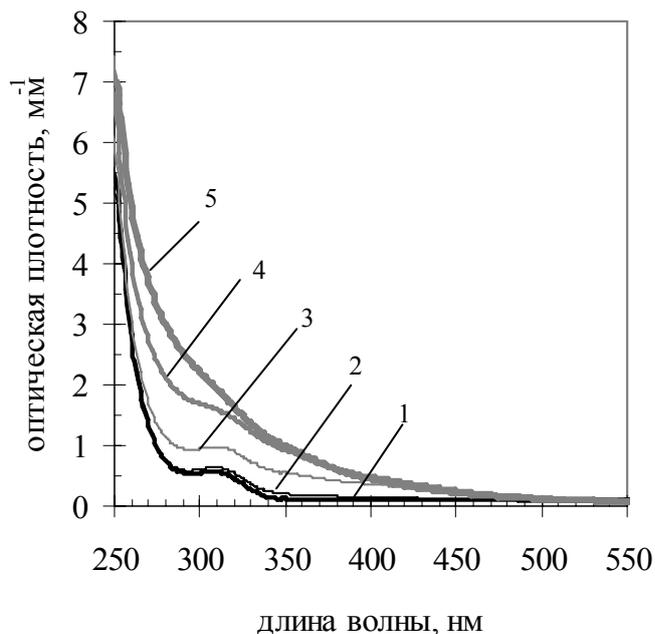


Рис. 2. Спектр поглощения стекла с содержанием сурьмы 0,03 вес.% при различных дозах облучения УФ (необлученный образец – кривая 1, облученный образец 10 Дж – кривая 2, 100 Дж – кривая 3, 1000 Дж – кривая 4, 10000 Дж – кривая 5)

Из графиков видно, что при увеличении дозы облучения увеличивается поглощение в области 250–450 нм и сдвигается край фундаментального поглощения в длинноволновую область.

Следует отметить, что изменение содержания сурьмы в стекле не оказывает существенного влияния на спектры, наведенные при облучении. Во всех исследованных стеклах наблюдается рост поглощения и смещение края фундаментального поглощения. Учитывая, что при последующей термической обработке поведение этих стекол в корне изменяется, была предпринята попытка, более детально изучить фотоиндуцированные спектры.

На рис. 3 приведены спектры добавочного поглощения для стекла без сурьмы при разных дозах облучения. Спектры добавочного поглощения представляют собой разность в спектрах между облученным и необлученным стеклом. Анализ этих спектров позволяет увидеть две широкие полосы поглощения в области 270 и 330 нм. С ростом дозы облучения интенсивность полос поглощения возрастает. Появление этих добавочных полос можно связывать с несколькими причинами: ростом полосы поглощения $(\text{Ce}^{3+})^+$ в области 270–280 нм (реакция 1) и ростом широкой полосы поглощения атомарного серебра с максимумом в районе 405 нм (реакция 2).

На рис. 4 показаны спектры добавочного поглощения для двух стекол – с сурьмой (0.1 вес.%) и без сурьмы, облученных одинаковой дозой 1000 Дж. Следует отметить, что интенсивность полосы в области 270 нм для сурьмяного стекла больше, чем для стекла без сурьмы. Дополнительный рост поглощения на 270 нм может быть связан с захватом фотоэлектрона на Sb^{5+} образованием комплекса $(\text{Sb}^{5+})^-$ по реакции (3). Эффект увеличения поглощения в районе 270 нм нами наблюдался для всех стекол, содержащих сурьму.

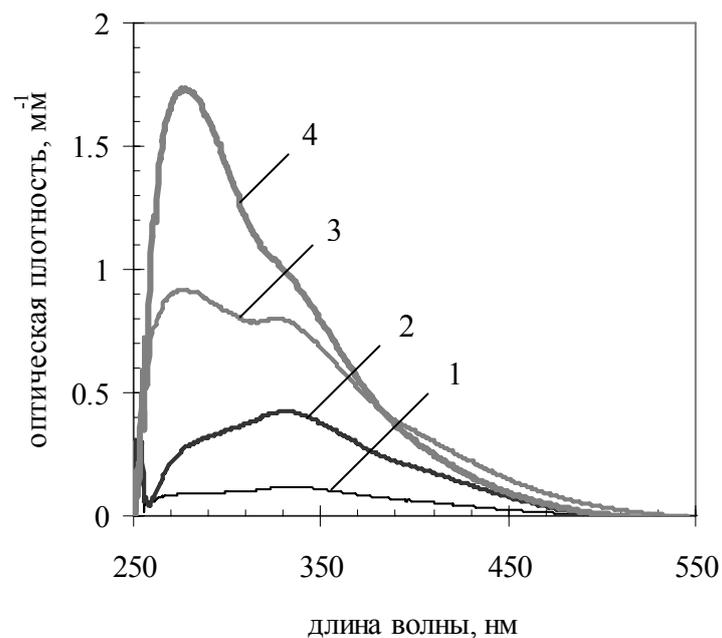


Рис. 3. Спектры добавочного поглощения стекла без сурьмы при различных дозах облучения (10 Дж – кривая 1, 100 Дж – кривая 2, 1000 Дж – кривая 3, 10000 Дж – кривая 4)

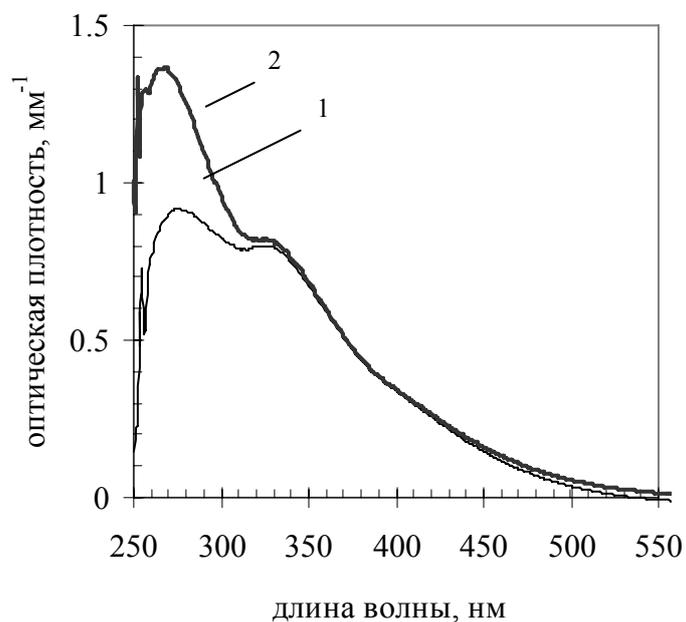


Рис. 4. Спектры добавочного поглощения стекол с содержанием сурьмы (0 вес.% – кривая 1 и 0,1 вес.% – кривая 2), облученных дозой 1000 Дж

На рис. 5, 6, 7 приведены спектры поглощения стекол после облучения УФ и последующей термообработки при 560 °С.

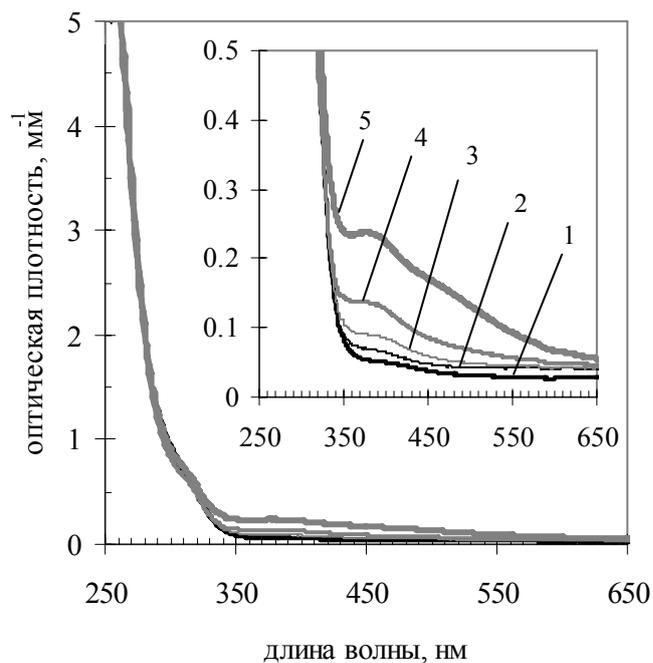


Рис. 5. Спектр поглощения стекла без сурьмы после термообработки 560 °С (необлученный образец – кривая 1, облученный образец 10 Дж – кривая 2, 100 Дж – кривая 3, 1000 Дж – кривая 4, 10000 Дж – кривая 5)

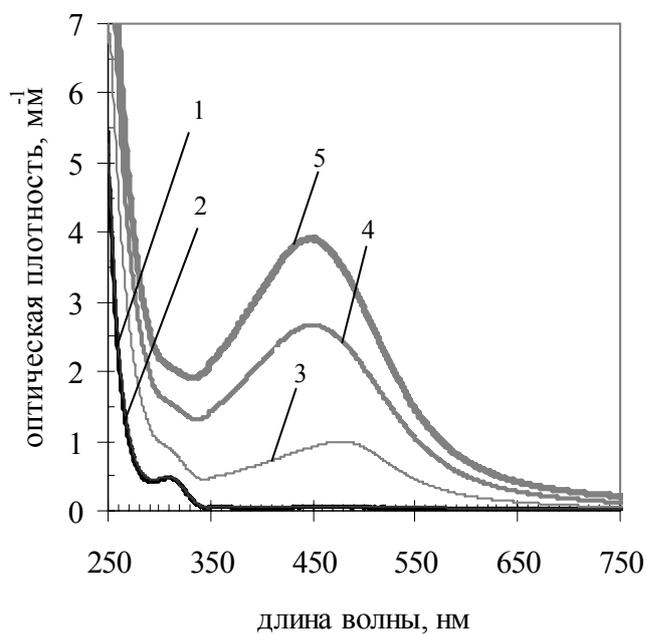


Рис. 6. Спектр поглощения стекла с содержанием сурьмы 0,03 вес.% после термообработки 560 °С (необлученный образец – кривая 1, облученный образец 10 Дж – кривая 2, 100 Дж – кривая 3, 1000 Дж – кривая 4, 10000 Дж – кривая 5)

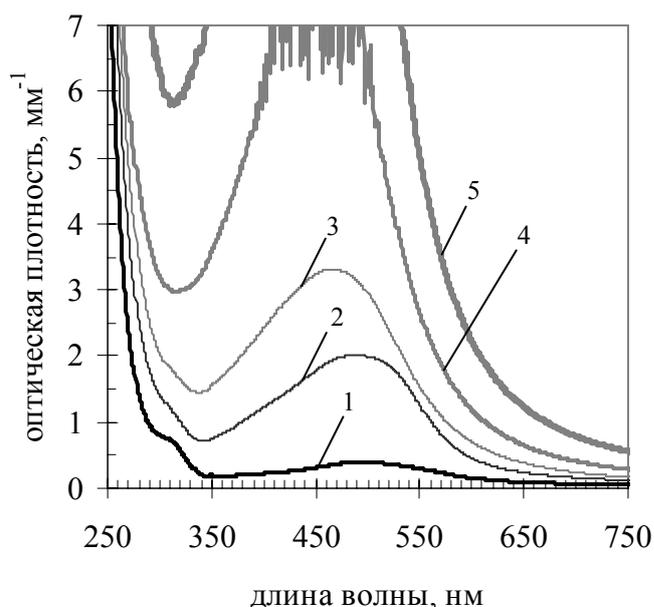


Рис. 7. Спектр коэффициента поглощения стекла с содержанием сурьмы 0,1 вес.% после термообработки 560 °С (необлученный образец – кривая 1, облученный образец 10 Дж – кривая 2, 100 Дж – кривая 3, 1000 Дж – кривая 4, 10000 Дж – кривая 5)

Анализ графиков показывает, что при термообработке образуется коллоидное серебро с максимумом поглощения в районе 450 нм. Интенсивность этой полосы возрастает с увеличением дозы облучения. Следует также отметить, что коэффициент поглощения коллоидного серебра увеличивается с увеличением содержания сурьмы в стекле, а при отсутствии сурьмы коллоидное серебро в процессе термообработки не образуется. Т.е. полоса поглощения с максимумом 450 нм отсутствует в стекле, не содержащем сурьму (рис. 5).

Наблюдаемые эффекты объясняются следующим образом. При нагревании стекла без сурьмы атомарное серебро разрушается, т.е. идет процесс



Освободившийся термический электрон может захватываться Ce^{4+} , который переходит в Ce^{3+} .

В сурьмяносодержащих стеклах при термообработке облученного стекла реакция (4) не идет. Сурьма способна удерживать электрон вплоть до температуры T_g [3]. При температуре выше T_g сурьма может освобождать электрон, который в свою очередь перезахватывается ионом серебра с последующей сегрегацией и образованием коллоидного серебра. Эти реакции могут быть записаны следующим образом



Заключение

Синтезированы фоточувствительные стекла с переменным содержанием сурьмы от 0 до 0,1 вес.%. Показано, что коэффициент поглощения коллоидного серебра симбатно изменяется с содержанием сурьмы в стекле, а при отсутствии сурьмы в стекле коллоидное серебро в процессе термообработки не образуется. Предложен механизм влияния сурьмы на процесс фототермоиндуцированного образования коллоидного серебра.

Литература

1. Tominaga J. The application of silver oxide thin films to plasmon photonic devices// J. Phys.: Condens. Matter 15, 2003. P. 1101–1122.
2. Stookey S.D., Beat G.K, Pierson J.E. Full-color photosensitive glass I J. Appl. Phys. 1978. V. 49. N10. P. 5114–5123.
3. Никоноров Н.В., Панышева Е.И., Туниманова И.В., Чухарев А.В. Влияние состава стекла на изменение показателя преломления при фототермоиндуцированной кристаллизации // Физ. и хим. стекла, 2001. Т.27 № 3. С. 365—376.
4. Житников П.А., Перегуд Д.Н. ЭПР исследования Ag и Ag₂ центров в фосфатном стекле.// ФТТ, 1975, 17, №6, С. 1655–1660.
5. Панышева Е.И., Соловьева Н.Д., Туниманова И.В. Взаимодействие УФ-излучения с мультихромным стеклом. // Физ. и хим. стекла, 1993. Т. 19. N° 1. С. 109–116.
6. Paje S.E., Garcia M.A., Villegas M.A., Plopis J. Optical properties of silver ion-exchangeed antimony doped glass// J. Non-Cryst. Solid 2000. P. 128–136.

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И МАГНИТНЫЕ СПЕКТРЫ ПОЛЯРИЗОВАННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В СТЕКЛАХ, АКТИВИРОВАННЫХ ЭРБИЕМ

С.Н. Жуков, В.А. Асеев, В.М. Ситдинов

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор Н.В. Никоноров

Разработана методика, позволяющая отдельно регистрировать электрическую и магнитную компоненты в спектре поляризованной люминесценции эрбия в лазерных стеклах. С помощью методики была создана установка и измерены спектры поляризованной люминесценции для основного лазерного перехода ${}^4I_{13/2} \leftrightarrow {}^4I_{15/2}$ при нерезонансном возбуждении.

Введение

Протяженность современных участков оптоволоконных линий составляет тысячи километров. Затухание сигнала и потери в волокне не позволяют на таком расстоянии доставить сигнал до приемника. И поэтому в настоящее время главной проблемой волоконно-оптической связи является широкополосное усиление сигнала. Для решения данной задачи используются планарные и волоконные оптические усилители света. Наиболее широкое применение на сегодняшний день получили усилители на волокне, легированном эрбием – EDFA (Erbium-Doped Fiber Amplifiers). Но при разработке протяженных (более 10 м) усилителей света возникает ряд поляризационных эффектов – выжигание поляризационных дыр (polarization hole burning) и поляризационно-зависимое усиление (polarization depending gain) [1–3]. Эти эффекты существенно ухудшают работу волноводного усилителя, понижая отношение сигнал/шум. В основе этих поляризационных эффектов лежит анизотропия поглощения и излучения оптических центров, открытая в конце 50-х годов членом-корреспондентом академии наук СССР П.П. Феофиловым на примере атомов, молекул и кристаллов [4]. В связи с этим исследования поляризационной люминесценции активированных стекол на лазерных переходах в ИК-области становятся актуальными. Сравнительно недавно поляризованная люминесценция наблюдалась в лазерных стеклах, активированных эрбием [5]. Но до настоящего времени отсутствуют эксперименты по выделению в сложном контуре полосы ${}^4I_{13/2} \leftrightarrow {}^4I_{15/2}$ электрической и магнитной составляющей. Именно поэтому целью данной работы было экспериментальное исследование поляризованной люминесценции для основного лазерного перехода ${}^4I_{13/2} \leftrightarrow {}^4I_{15/2}$ эрбия в стеклах при нерезонансном возбуждении.

Методика эксперимента

Схема отдельной регистрации люминесценции электрических и магнитных переходов

Применявшаяся в настоящей работе схема отдельной регистрации электрических и магнитных спектров является оригинальной (рис. 1, а). Она была предложена и впервые реализована для исследования стекол, активированных трехвалентными ионами европия [2]. В этой схеме направление наблюдения люминесценции (параллельно X) составляло прямой угол с направлением возбуждающего света (параллельно Y). В установке использовались два поляроида. Один из них устанавливался в канале возбуждающего света, другой – в канале люминесценции. Поляририд в канале люминесценции мог занимать два фиксированных положения – параллельно оси Z и перпендикулярно оси Z.

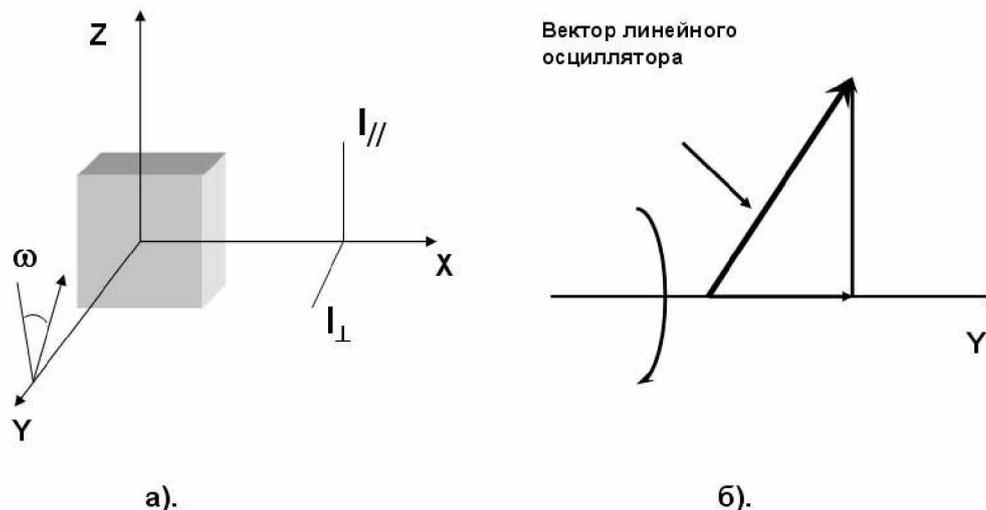


Рис. 1. Принципиальная схема отдельной регистрации люминесценции, соответствующей электрическим и магнитным переходам

Для повышения чувствительности регистрации применялась модуляционная методика, в которой поляририд в канале возбуждающего света вращался с частотой ω , а регистрация сигнала осуществлялась на частоте 2ω . Этот сигнал пропорционален только интенсивности электрических переходов (I_{\parallel}) в случае регистрации света люминесценции, поляризованного параллельно оси Z , и пропорционален только интенсивности магнитных переходов (I_{\perp}) при регистрации света люминесценции, поляризованного перпендикулярно оси Z .

Схема эксперимента

Схема экспериментальной установки, использовавшейся для селективного изменения люминесценции соответствующей магнитным и электрическим переходам, изображена на рис. 2.

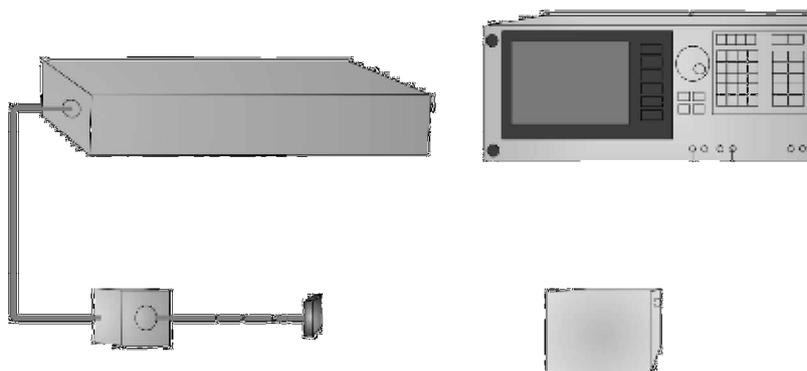


Рис. 2. Экспериментальная установка: 1 – Nd-лазер ($\lambda = 532$ нм), 2 – кристалл шпата, 3 – вращающийся поляризатор, 4 – образец, 5 – пленочный поляризатор, 6 – линза, 7 – монохроматор, 8 – InGaAs-приемник, 9 – цифровой синхронизированный усилитель

Линейно поляризованное излучение неодимового лазера с удвоением частоты 532 нм (модель Millennium-Xs, Spectra Physics) (1) при помощи плоскопараллельной пластинки исландского шпата (2) преобразовывалось в излучение с круговой поляризацией. Люминесценция образца (4) возбуждалась линейно-поляризованным светом, вращающимся с частотой ω (3). Далее излучение фокусировалось линзой (6) на щель мо-

нохроматора (модель Acton-300, Acton Research Corporation) (7), регистрировалось приемником (модель ID-441, Acton Research Corporation) (8) и усиливалось на цифровом усилителе (модель SR850 фирмы «Stanford Research Systems») (9), синхронизованном с вращением поляризатора. При помощи поляризатора (5) вырезалась поляризация I_{\perp} или I_{\parallel} .

Объект исследования

В работе исследовались фосфатные и силикатные стекла, активированные ионами Er^{3+} с содержанием эрбия 0.1, 0.2, 0.4, 0.8 и 1.6 мол.%. Образцы представляли собой полированные пластинки, у которых были отполированы 4 грани, с целью предотвращения деполяризации как возбуждающего света, так и света люминесценции. Толщина пластинок была выбрана такой, чтобы уменьшить реабсорбцию света люминесценции.

Результаты и обсуждения

В качестве основного экспериментального подхода применялось исследование поляризованной люминесценции, которая возникает при возбуждении линейно поляризованным светом. Ввиду неупорядоченной структуры стекла эрбиевые центры не обладают симметрией, и вырождение их энергетических уровней снимается настолько, насколько это возможно в отсутствии магнитного поля. А именно, так как число электронов на 4f-оболочке нечетно – 11, то каждый уровень представляет собой дважды вырожденный кramerсов дублет. Поэтому состояния оптического центра в матрице не характеризуются определенной четностью, и запрет на электрические дипольные переходы снимается. Но степень снятия запрета невелика. Она определяется воздействием окружения на состояния 4f-оболочки. Эксперименты показывают, что интенсивности возникающих при этом электрических переходов сопоставимы по величине с интенсивностями магнитных переходов.

Рис. 3 демонстрирует спектры люминесценции, измеренные отдельно для электрических и магнитных переходов. Из рис. 3 видно, что для обоих типов стекол (фосфатное и силикатное) спектры электрических и магнитных переходов различны.

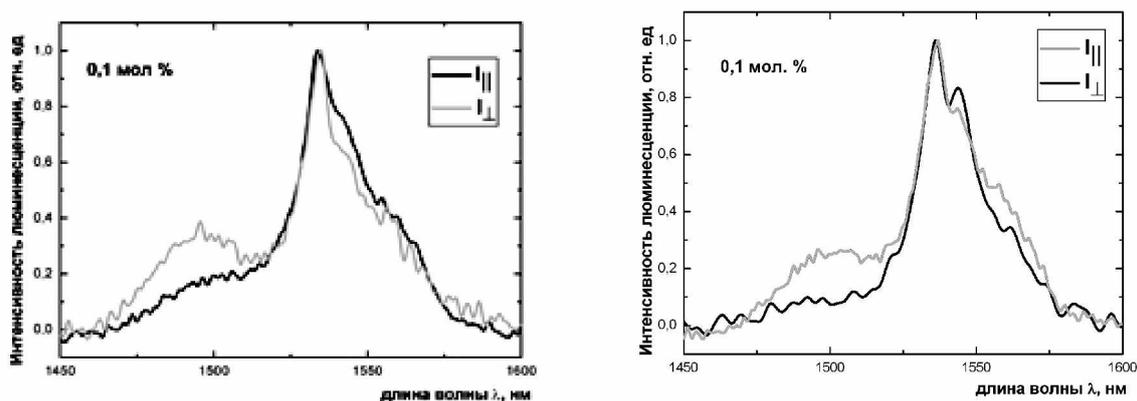


Рис. 3. Спектры люминесценции для электрических (I_{\parallel}) и магнитных (I_{\perp}) переходов для фосфатного (а) и силикатного (б) стекла ($\text{Er}_2\text{O}_3 = 0.1$ мол.%.)

Были проведены исследования концентрационной зависимости спектров поляризованной люминесценции соответствующим электрическим и магнитным переходам (рис. 4 и 5).

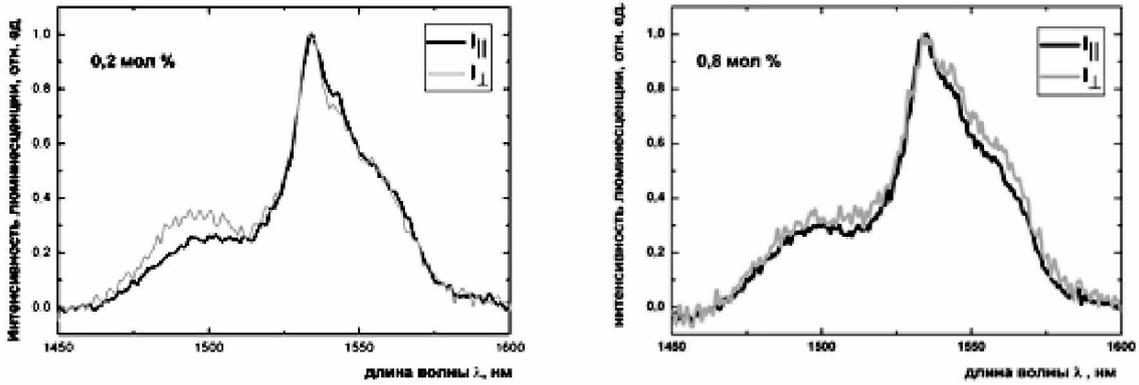


Рис. 4. Спектры люминесценции фосфатных стекол, активированных ионами эрбия, электрических ($I_{||}$) и магнитных (I_{\perp}) для различных концентраций Er_2O_3 (0.2 и 0.8 мол.%)

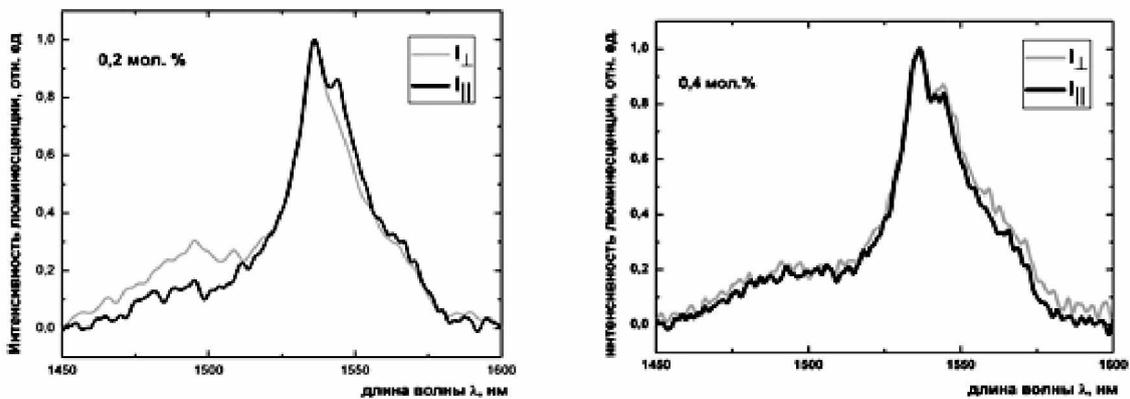


Рис. 5. Спектры люминесценции силикатных стекол, активированных ионами эрбия, электрических ($I_{||}$) и магнитных (I_{\perp}) для различных концентраций Er_2O_3 (0.2 и 0.4 мол.%)

Из рисунков видно, что как для фосфатных (рис. 4), так и для силикатных (рис. 5) стекол увеличение концентрации приводит к уменьшению различия между спектрами люминесценции магнитных и электрических переходов. При увеличении концентрации Er_2O_3 до 0.8 мол.% исчезают различия между спектрами переходов в фосфатных стеклах (рис. 4). Для силикатных стекол различия в спектрах пропадают уже при концентрации 0.4 мол.% эрбия. Это можно объяснить хорошо известным эффектом концентрационной деполяризации [4]. Миграция возбуждений по метастабильному уровню $^4I_{13/2}$ сопровождается потерей информации об ориентации осциллятора первоначально возбужденного светом. В случае эрбиевых стекол картина концентрационной деполяризации усложняется явлением концентрационного тушения люминесценции – уменьшением времени затухания люминесценции τ с ростом концентрации.

Заключение

Была разработана и создана методика, позволяющая отдельно регистрировать электрическую и магнитную компоненты в спектре поляризованной люминесценции основного лазерного перехода фосфатных и силикатных эрбиевых стекол при нерезонансной накачке линейно поляризованным светом $\lambda_{\text{возб}} = 532$ нм. В итоге были впервые получены по отдельности электрический и магнитный спектры люминесценции в области сложного контура полосы $^4I_{13/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$. Показано различие между спектрами люминесценции магнитных и электрических переходов в как в фосфатном, так и в сили-

катном стеклах. Увеличение концентрации эрбия приводит к увеличению скорости миграции возбуждения между ионами эрбия, и различие между спектрами люминесценции соответствующих магнитных и электрических переходов уменьшается. Полученные данные могут быть использованы при расчетах и оптимизации волоконных и интегрально-оптических лазеров и усилителей света на основе материалов, активированных ионами эрбия.

Литература

1. Kushida T, Takushi E, Oka V. // J. Luminescence. 1976. 12/13. P. 723–727.
2. Лебедев В.П., Пржеvusкий А.К. // Физ. твердого тела. 1977. 19. С. 1373–1376.
3. Holl D.W. and Weber M.J. // Appl. Phys. Lett. 1983. 42. №2. P. 157–159.
4. Феофилов П.П. Поляризованная люминесценция атомов, молекул и кристаллов. М.: ГИФМЛ. 1959. 288 с.
5. Никоноров Н.В., Пржеvusкий А.К., Рохмин А.С., Чухарев А.В., Уляшенко А.М. Исследование поляризованной люминесценции в лазерных стеклах, активированных эрбием. // Оптика и спектроскопия, 2004. Т. 96. №2. С. 203–209.

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОРИСТЫХ СТЕКОЛ

Н.А. Есикова

**(Институт аналитического приборостроения РАН)
Научный руководитель – к.т.н., с.н.с. А.А. Евстапов
(Институт аналитического приборостроения РАН)**

Измерены спектральные характеристики двухфазных и пористых стекол. Рассмотрено влияние сорбируемой в порах воды на пропускание пористых стекол и подтвержден эффект релаксации в пористых структурах. Найдены спектральные диапазоны преобладания релеевского рассеяния, при котором применимы простые модели. Определены оптические и структурные характеристики пористых стекол. Оценены размеры пор и пористость.

Введение

Пористые стекла (ПС) – продукты химической проработки термообработанных щелочноборосиликатных стекол определенного состава. Они обладают рядом преимуществ по сравнению с другими пористыми материалами: термической, химической и микробиологической устойчивостью, прозрачностью в видимой части спектра, лучевой прочностью, регулируемыми структурными характеристиками и превосходными адсорбционными свойствами [1]. Новые возможности и перспективы открываются в случае применения ПС как функциональных элементов микрофлюидных чипов (электроосмотических насосов, микро- и нанофильтров, индикаторных и сенсорных элементов). В связи с широким применением оптических методов детектирования в микрофлюидных аналитических системах (МФАС) и других микроаналитических системах, представляется целесообразным исследовать оптические свойства ПС с целью изучения возможности применения пористых структур, как сенсорных элементов. Актуальным в таком исследовании является получение максимальной информации о структурных характеристиках ПС из оптических спектров.

Оценки и характеристики

Измерение спектральных зависимостей светопропускания ПС позволяет получить интегральную информацию об образце и его структуре: о поглощении материала, об отражении и рассеянии светового потока от границ раздела сред и неоднородностей структуры. В двухфазных стеклах с низким поглощением света для оценки оптических характеристик (показателя преломления и коэффициента поглощения) вполне оправдано применение простых моделей, где предполагается, что коэффициенты поглощения и рассеяния малы по сравнению с коэффициентом преломления. В других случаях, когда существенную роль играет светорассеяние, необходимо использовать иные модели, учитывающие поглощение и рассеяние света.

Одним из наиболее вероятных источников светорассеяния двухфазных стекол, по мнению авторов [2, 3], является структурная неоднородность ликвационного типа (размеры каркаса кремнеземной фазы и ликвационных каналов, занимаемых нестойкой фазой), параметры которой определяются составом исходного стекла и режимом его тепловой обработки. Чем крупнее области структурной неоднородности, тем больше светорассеяние в двухфазных стеклах [2]. Пористые стекла также имеют неоднородности ликвационного типа, но отличаются от двухфазных наличием дополнительных неоднородностей – отложения кремнегеля (страты, стержневидные структуры и т.п.), поры и микровключения (микросталлические фазы). Эти неоднородности слабо поглощают свет, поэтому вклад в ослабление светового потока вносит светорассеяние. Пропускание в видимой области спектра пластин ПС снижается с увеличением размеров ликвационных областей неоднородности в исходных двухфазных стеклах [3].

В зависимости от размеров, формы и распределения неоднородностей следует ожидать различные варианты рассеяния света. Наиболее хорошо изучены случаи релеевского рассеяния, когда размеры фазовых неоднородностей гораздо меньше, чем длина волны зондирующего излучения. Наличие более крупных неоднородностей в ПС приводит к дифракционному рассеянию и рассеянию Ми. В реальных образцах не следует исключать наличие как мелких, так и крупных неоднородностей (хотя бы в силу того, что локальная концентрация мелких неоднородностей может рассматриваться как макровключение), что может приводить к сложной картине рассеяния света. Для некоторых образцов удается выявить спектральный диапазон, где превалирует тот или иной тип светорассеяния (обычно – релеевское) и определить характеристики микроструктур, используя достаточно простые модели и приближенные решения [4–6].

Авторы работ [7, 8] полагают, что в диапазоне $\lambda = (350–800)$ нм строгая связь величин пропускания пластин ПС с размерами их пор при $r \ll \lambda$ отсутствует. Это может быть обусловлено неоднородной структурой ПС, а именно, рассеянием светового потока на стратах, которое выражено тем в большей степени, чем больше рельефность поверхности раздела граничащих друг с другом слоев (толщиной, соизмеримой с λ) [9, 10]. При полном удалении страт раствором щелочи наблюдается снижение прозрачности образцов ПС, вызванное увеличением размеров пор. При этом возрастает значение пропускания у образцов ПС, в которых рельефность поверхности раздела слоев до щелочной проработки была резко выражена, что вызывало значительное светоослабление. Уровень пропускания макропористых стекол определяется лишь релеевским рассеянием на границе кремнеземная фаза – пора (с размерами, равными размерам ликвационных каналов). Низкая прозрачность ПС обусловлена, по-видимому, рассеянием внутренними слоями образца, в которых расположены стержневидные кремнеземные неоднородности, и возможным присутствием микрокристаллических щелочеборатных фаз [11].

Таким образом, для более полного представления о структуре ПС необходимо изучение спектров отраженного света, которые позволяют дополнить информацию о неоднородности структуры и о состоянии поверхности ПС. Зная спектральные характеристики пористых стекол и исходных двухфазных, можно оценить их оптические характеристики показатель преломления и коэффициент поглощения.

Оптические характеристики

По измеренным отражению R и пропусканию T для *слабопоглощающих и слабо-рассеивающих стекол* толщиной l коэффициент отражения от границы раздела сред r_0 , коэффициент поглощения k и эффективный показатель преломления n можно определить по следующим формулам [12]:

$$r_0 = \frac{-(T^2 - R^2 + 2R + 1) \pm \sqrt{(T^2 - R^2 + 2R + 1)^2 + 4R(R - 2)}}{2(R - 2)},$$

$$k = -\frac{1}{2l} \ln \frac{r_0 - R}{r_0[r_0(2 - R) - 1]}, \quad (1)$$

$$n = \frac{1 + r_0 + \sqrt{4r_0 - (1 - r_0)^2 k_1^2}}{1 - r_0},$$

где $k_1 = \frac{k\lambda}{4\pi}$. Формулы применимы при выполнении условия $k < 10^3 \text{ см}^{-1}$, в случае слабого релеевского рассеяния и высокой прозрачности изучаемых образцов. Получаемая погрешность определения оптических постоянных зависит от точности измерения R и T .

Структурные характеристики пористой среды

Так как ПС представляют собой сложную гетерогенную структуру, то поглощение и рассеяние, в основном, осуществляется на структурных неоднородностях, которые можно характеризовать средним размером неоднородностей и их количеством в единице объема. Поэтому, используя полученные оценки и выбрав соответствующую модель среды, можно найти характеристики пористой структуры: пористость (или количество рассеивающих частиц) и средний размер пор (или рассеивающих частиц). Расчет структурных характеристик основан на моделях эффективной среды, предполагающей, что эффективный показатель преломления связан с объемами и показателями преломления компонентов, составляющих среду.

В работе рассмотрены следующие модели пористой среды.

1. Для системы одинаковых произвольных частиц в случае, когда расстояние между частицами больше и длины волны, и размеров частиц, а размеры неоднородностей пренебрежимо малы, в случае малых значений $(n-1)$, можно использовать выражение [13]:

$$\frac{n_{ef}}{n_m} = 1 - \frac{NV}{2} \left(\frac{n_m^2 - 1}{n_m^2} \right) - i \frac{N2(\pi V)^2 (n_m^2 - 1)^2}{3\lambda^3 n_m}, \quad (2)$$

$$\frac{n_{ef}}{n_m} = \frac{n_{PG}}{n_m} - i \frac{k\lambda}{2\pi}, \quad (3)$$

где n_{ef} – эффективный показатель преломления, n_m – показатель преломления исходного двухфазного стекла, n_{PG} – показатель преломления пористого стекла, N – количество пор в единице объема, V – средний объем пор, λ – длина волны. Воспользовавшись оценками (1) и подставив их в формулы (2) и (3), можно определить объем пор, их количество в единице объема и средний радиус, предположив, что рассеяние происходит на сферических частицах.

2. Для прозрачных ($k=0$) тонких пористых сред, поры которых – пустоты сферической формы, соединяющиеся между собой, с эффективным размером $d_{пор} \sim 0,5-10$ нм (модель открытых пор) применима формула Бруггемана [14].

$$\eta \frac{n_{por}^2 - n_{ef}^2}{n_{por}^2 + 2n_{ef}^2} + (1 - \eta) \frac{n_m^2 - n_{ef}^2}{n_m^2 + 2n_{ef}^2} = 0, \quad (4)$$

где $n_{por}=1$ – показатель преломления пустот (воздуха), η – пористость.

3. В гетерогенной системе одинаковых сферических частиц из материала с показателем преломления n в матрице с показателем преломления n_m эффективный показатель преломления может быть определен как [5]

$$n_{ef} = n_m \sqrt{\frac{(1 + 2f)n_{por}^2 + 2(1 - f)n_m^2}{(1 - f)^2 + (2 + f)n_m^2}}, \quad (5)$$

где f – относительный объем, занимаемый частицами в среде.

Образцы и оборудование

В работе исследовались образцы двухфазного стекла NFF и пористого стекла PG9 (по данным электронной микроскопии пористость образцов около 30 %) толщиной 1, 2 и 4 мм. Образцы предоставлены профессором Т.В. Антроповой, институт химии силикатов РАН. Спектры пропускания и отражения измерялись на спектрофотометре HITACHI U3410 (Япония).

Результаты и обсуждение

Пропускание

Из полученных спектров (рис. 1) следует, что пропускание двухфазных стекол выше, чем пористых. При выщелачивании двухфазных стекол происходит изменение

их оптических характеристик, связанных с формированием новых поглощающих и рассеивающих структур – пор. В коротковолновой области спектра (менее 700 нм) пропускание ПС значительно меньше, чем у двухфазных стекол. Для ПС наблюдаются три явно выраженных пика поглощения, максимумы которых соответствуют 1400, 1900 и 2200 нм. Аналогичные пики поглощения, но значительно меньшей интенсивности, проявляются и для двухфазных стекол на длине волны 1400 и в диапазоне 2200–2350 нм.

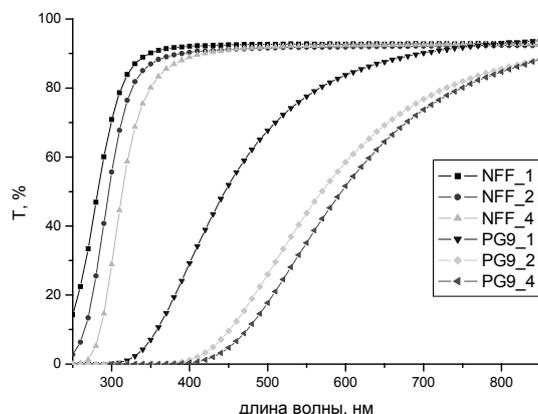


Рис. 1. Пропускание двухфазных стекол NFF и ПС PG9 в видимой части

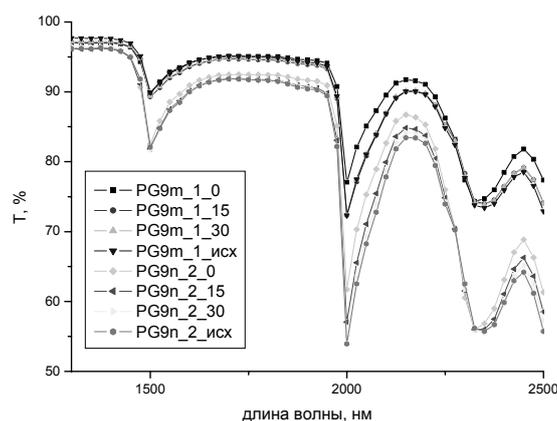


Рис. 2. Пропускание ПС PG9 до и после термической обработки

Обнаруженные характерные пики поглощения в большей степени проявлялись для ПС. Можно предположить, что изменение пропускания в ближней ИК области связано с пористой структурой. Но сами пористые структуры не могут вызывать высокое ослабление светового потока. Рассеяние в ближней ИК области на порах должно быть невелико. Сравнивая полученные результаты характерных пиков поглощения с литературными данными, можно предположить, что, в основном, поглощение определяют молекулы воды, адсорбированные в порах из окружающей среды. Эта гипотеза была подтверждена следующими экспериментами.

Образцы PG9 толщиной 1 и 2 мм в течение получаса сушили в печи при температуре 120 °С. После этого они помещались в двулучевой спектрофотометр, и измерялось пропускание в диапазоне 1200–2400 нм ($4166\text{--}8333\text{ см}^{-1}$) непосредственно после сушки и через 15, 30 и 120 мин пребывания на воздухе при комнатной температуре.

Из полученных зависимостей (рис. 2) следует, что по мере пребывания высушенных структур на воздухе происходит релаксация спектральных свойств и возвращение их к начальным. Это, по-видимому, вызвано сорбцией в пористой среде вторичного кремнезема и воды [4], имеющей полосы поглощения на 1890–1960 нм, и 1410–1610 нм, относящиеся к обертонам и составным тонам валентных и деформационных

колебаний ОН-группы [15]. Для двухфазных стекол также наблюдаются подобные пики, но со значительно меньшей интенсивностью. Это может свидетельствовать о сорбции молекул воды на поверхности двухфазного стекла, в нанопорах и нанотрещинах.

Определение спектральных диапазонов, в которых преобладает релеевское рассеяние

Чтобы получить достоверные оценки оптических характеристик стекол, необходимо использовать адекватные модели. Это, в свою очередь, приводит к задаче определения области применения тех или иных моделей. Большинство достаточно простых моделей разработано для случая релеевского рассеяния образцов. Поэтому первоначально необходимо определить, состоятельна ли гипотеза о релеевском светорассеянии образца и как соотносятся эффекты поглощения и светорассеяния в образце.

Ослабление светового потока в среде из частиц связано с поглощением и рассеянием на этих частицах. В случае малых частиц, когда преобладающую роль играет поглощение, спектр экстинкции меняется пропорционально $1/\lambda$ ($Q_{\text{abs}} \sim 1/\lambda$), если доминирует рассеяние (релеевское) – $1/\lambda^4$ ($Q_{\text{sca}} \sim 1/\lambda^4$). Предположим, что ослабление светового потока может быть выражено как $\lg\left(\frac{1}{T}\right) = D_\lambda = C_1 \lambda^\beta$, тогда после логарифмирования

получим

$$\ln(D_\lambda) = C_2 + \beta \ln(\lambda). \quad (6)$$

Линейность этой зависимости и соответствующие коэффициенты β могут являться подтверждением наличия рассеивающих частиц. Подобный подход может быть плодотворным при определении не только соотношения между поглощением и релеевским рассеянием, но и другими видами светорассеяния. Кроме того, аппроксимируя полученные зависимости прямыми линиями, можно определить и спектральные диапазоны, в которых эффективно будет использоваться та или иная модель [16].

Зависимость (6) для NFF (рис. 3) можно интерполировать двумя прямыми линиями. Причем, если в диапазоне (250–330) нм тангенс угла наклона достаточно большой, то в более длинноволновой области – он много меньше 1, т.е. можно предположить, что спектральной области от 340 до 450 нм преобладает поглощение.

Малость коэффициента β в длинноволновой области измерений для двухфазного стекла, может свидетельствовать о слабом уровне поглощения и отсутствии рассеяния, что еще раз подтверждает правильность использования простых моделей для двухфазных стекол при нахождении оптических постоянных.

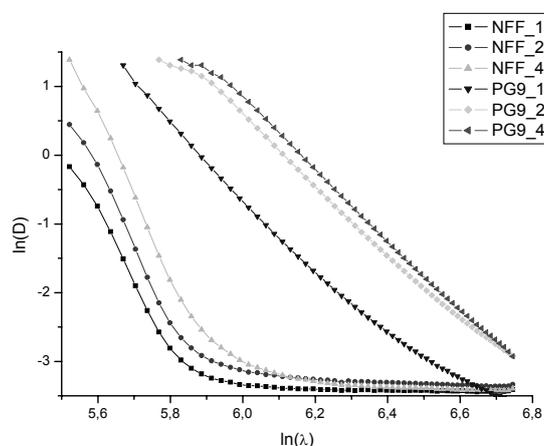


Рис. 3. Спектральные зависимости $\ln(D)$ для двухфазных (NFF) и пористых стекол PG9

Для PG9 полученные зависимости (рис. 3) близки к линейным, а $\beta=4.2$, т.е. для этих образцов можно полагать, что преобладающую роль играет релеевское рассеяние света, и использовать ранее предложенный метод определения характеристик структур [17]. Конечно же, более корректным было бы определить спектральный диапазон, где $\beta \rightarrow 4$, а затем получить для него нужные оценки. Но такой подход значительно сужал бы рабочую спектральную область. С другой стороны, полученные значения коэффициентов β свидетельствуют о сложных процессах поглощения и рассеяния в двухфазных и пористых стеклах.

Из вышеизложенного следует, что релеевское рассеяние для стекла PG9 преобладает в области от 350 до 800 нм. Для двухфазного стекла поглощение превалирует в области от 250 до 850 нм.

Оптические характеристики образцов

Значения коэффициента ослабления для двухфазного стекла NFF и ПС PG9 возрастают в коротковолновой части спектра. Коэффициент ослабления для ПС выше, чем для двухфазных. Это связано с многократным переотражением и рассеянием света в порах структуры, что подтверждается наиболее высоким ослаблением почти во всем видимом диапазоне длин волн у наиболее толстого образца ПС.

Для показателя преломления ПС (рис. 4) наблюдается нормальная дисперсия, кроме образца толщиной 4 мм в области 550-800 нм. Вероятно, при этой толщине превышена граница пропускания ПС PG9. Показатель преломления двухфазного стекла возрастает в диапазоне длин волн 500–850 нм. Показатель преломления двухфазного стекла выше, чем пористого.

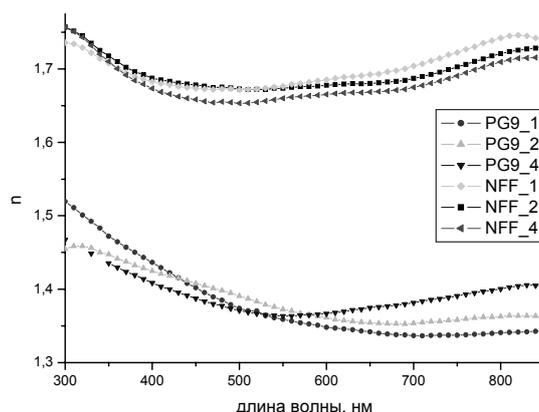


Рис. 4. Дисперсия показателя преломления для двухфазного стекла NFF и ПС PG9

Если ПС можно представить как гетерогенную систему с некоторым эффективным размером фазовых неоднородностей, то в случае, когда размеры неоднородностей много меньше, чем длина волны, а среда может быть представлена как система сферических частиц из материала с показателем преломления n_{ef} , то эффективный показатель преломления может быть выражен как $n_{ef} = V_{SiO_2} n_{SiO_2} + V_{air} n_{air}$, где V_{SiO_2} и V_{air} – соответствующие объемы фракций в ПС, n_{SiO_2} и n_{air} – показатели преломления матрицы и воздуха (поры). Это объясняет меньшую величину показателя преломления ПС по сравнению с двухфазным стеклом.

Пористость и размер пор

На рис. 5 приведены оценки зависимости пористости образца PG9 толщиной 1 мм, полученные в соответствии с моделями, изложенными ранее (формулы (2), (3), (4), (5)).

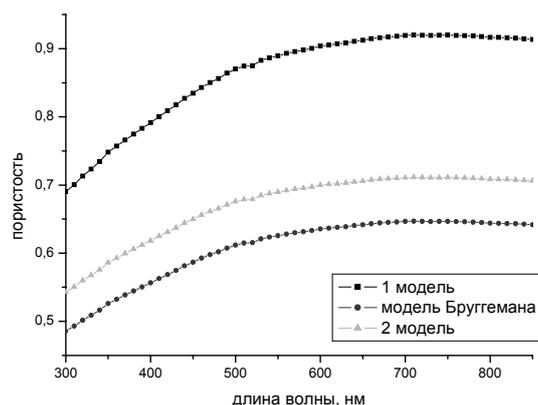


Рис. 5. Спектральная зависимость оценки пористости ПС PG9 толщиной 1 мм

Вид зависимостей во всех случаях одинаков. Для образца PG9 наблюдаются относительно низкие значения пористости в коротковолновой области и самые высокие, начиная от 600 нм. Модель 3 дает завышенные значения оценок пористости, а использование модели 2 позволяет получить оценки, близкие к оценкам, получаемым по результатам электронной микроскопии (пористость $\approx 30\%$). Вероятно, завышенность результатов связана с тем, что в двухфазном стекле, показатель преломления которого использовался как показатель матрицы ПС, также имеются рассеивающие частицы. Разброс полученных результатов связан с тем, насколько показатель преломления матрицы влияет на пористость в каждом подходе.

С помощью электронного микроскопа невозможно обнаружить самые мелкие поры, поэтому их вклад в общее значение пористости не учитывается. Спектральными же методами значение пористости получается из интегральных оценок пропускания и отражения образцов. Возможно, этим и объясняется заниженная оценка, полученная для пористости с помощью электронного микроскопа.

Из формулы Рэля [18] и соотношения (6) следует, что с ростом длины волны размер частиц перестает влиять на процессы пропускания и рассеяния. Таким образом, наиболее достоверными оценками следует считать объем пор и пористость, определенные на минимальной длине волны части спектра, на котором наблюдается релеевское рассеяние. Для образца ПС PG9 это 350 нм. Тогда размер пор оценивается как 2,7 нм, а пористость образца – как 0,5 (или 50 %). Такой размер пор позволяет задерживать мелкие молекулы, некоторые типы вирусов, короткие фрагменты ДНК, что может быть использовано при фильтрации таких частиц. На рис. 6 приведена дисперсия оценок среднего объема пор, полученная из уравнения (2), из которого следует, что длина волны зондирования определяет величину определяемой оценки.

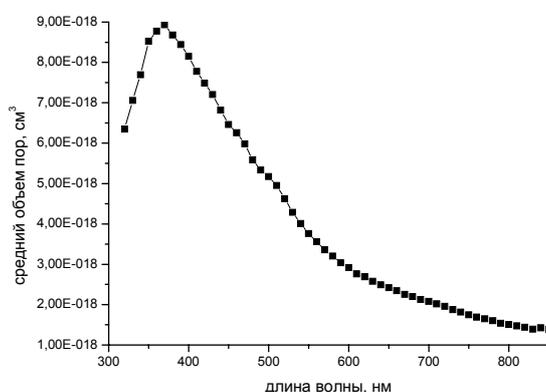


Рис. 6. Оценка средний объем пор ПС PG9

Заключение

Проведены спектральные измерения слабо рассеивающих и слабо поглощающих образцов двухфазных (NNF) и пористых стекол (PG9) в проходящем и отраженном свете. Выявлено, что существенное влияние на спектры поглощения ПС в ближней ИК области оказывает сорбируемая в порах вода.

Рассмотрен способ проверки гипотезы релеевского рассеяния, основанный на анализе спектров светопропускания образцов, позволяющий определить спектральный диапазон, где могут быть получены эффективные оценки.

Для слабо поглощающих и рассеивающих образцов в рамках модели эффективной среды по данным спектрофотометрических измерений получены оценки для пористости образца с помощью нескольких методов.

Предложенный подход для определения оптических характеристик ПС может быть использован в случае применения пористых структур для обнаружения веществ или других объектов задерживаемых порами при использовании пористых стекол в качестве сенсорных элементов в микрофлюидных чипах.

Литература

1. Антропова Т.В. Физико-химические процессы создания пористых стекол и высококремнеземных материалов на основе ликвирующих щелочноборосиликатных систем. // Автореферат на соискание ученой степени доктора химических наук. Санкт-Петербург. 2005. 45 с.
2. Порай-Кошиц Е.А., Левин Д.И., Андреев Н.С. О структуре натриевоборосиликатных стекол в связи с явлением опалесценции. Сообщение 4. Зависимость строения натриевоборосиликатных стекол от продолжительности их прогрева при постоянной температуре // Изв. АН СССР. ОХН. 1956. 3. С. 287–293.
3. Роскова Г.П., Морозова Э.В., Баханов В.А. Светопропускание пористых пластин, получаемых из двухфазных натриевоборосиликатных стекол с различной структурой. // Физика и химия стекла. 1991. 17. 4. С. 623–630.
4. Альтшулер Г.Б., Баханов В.А., Дульнева Е.Г., Мешковский И.К. Исследование оптических характеристик активных элементов из кварцевого микропористого стекла. // Оптика и спектроскопия. 1983. 55, 2. С. 369–374.
5. Кучинский С.А., Суханов В.И., Хазова М.В. Принципы формирования голограмм в капиллярных композитах. // Оптика и спектроскопия. 1992. 72, 3. С. 716–730.
6. Кучинский С.А., Суханов В.И., Хазова М.В., Доценко А.В. Эффективные оптические постоянные пористого стекла. // Оптика и спектроскопия. 1991. 70, 1. С. 150–154.
7. Роскова Г.П., Цехомская Т.С., Вензель Б.И. Светопропускание пористых стекол различной структуры. // Физ. и химия стекла. 1988. 14, 6. С. 911–914.
8. Крылова Н.Л., Антропова Т.В., Сидорова М.П., Ермакова Л.Э. Исследование структурного сопротивления и извилистости пор пористых стекол методом электропроводности. // Коллоид. ж. 1992. 54, 3. С. 86–91.
9. Евстапов А.А., Муравьев Д.О., Антропова Т.В., Ястребов С.Г. Изучение оптических свойств двухфазных и микропористых стекол. // Оптический журнал. 2001. 68, 1. С. 34–40.
10. Antropova T.V., Drozdova I.A., Yastrebov S.G., Evstrapov A.A. Porous Glass: Inhomogeneities and Light Transmission // Optica Applicata. 2000. 30, 4. P. 553–567.
11. Смирнова И.С., Антропова Т.В., Сидорова М.П., Ермакова Л.Э., Роскова Г.П. Влияние условий получения микропористых стекол на их светопропускание и величины коэффициентов структурного электросопротивления // Физика и химия стекла. 1996. 22, 4. С. 551–558.

12. Шишловский А.А. Прикладная физическая оптика. М.: Физматгиз. 1961. 487 с.
13. Верещагин В.Г., Дынич Р.А., Понявина А.Н. Эффективные оптические параметры пористых диэлектрических структур // Оптика и спектроскопия. 1998. 84, 3. С.486–490.
14. Ovechko V.S., Dmytruk A.M., Fursenko O.V., Lepeshkina T.P. Ellipsometry and spectroscopy of porous glass surfaces // Vacuum. 2001. 61. P. 123–128.
15. Вечкасов И.А., Кручинин Н.А, Поляков А.И., Резинкин В.Ф. Приборы и методы анализа в ближней инфракрасной области. М.: Химия, 1977.
16. Evstrapov A.A., Esikova N.A., Antropova T.V., Spectral characteristics and structure of porous glasses. // Optica Applicata. 2005, XXXV, 4. p. 753–759.
17. Evstrapov A.A., Antropova T.V., Drozdova I.A., Yasrtebov S.G. Optical properties and structure of porouse glasses. // Optica Applicata. 2003. XXXIII, 1. P. 45–54.
18. Коллоидная химия: Учеб. для университетов и химико-технолог. вузов. / Щукин Е.Д., Перцов А.В., Амелина Е.А. 3-е изд., перераб. и доп. М.: Высш. шк., 2004. 445 с.

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ В КВАРЦЕВОМ СТЕКЛЕ НА ВЯЗКОСТЬ

Д.В. Ильин

Научный руководитель – д.т.н., профессор Е.Б. Яковлев

Рассмотрен процесс быстрого лазерного нагревания кварцевого стекла с добавками. Проведен анализ зависимости вязкости материала от концентрации примесей, содержащихся в нем.

Введение

В литературе описано достаточно большое количество моделей и методов, объясняющих в той или иной степени различные свойства стекла и изменения их при нагревании [1]. В предлагаемой работе с использованием модели ЖДVK проведен анализ термодинамически неустойчивого по концентрации вакансий кислорода состояния стекла с примесями, которое возникает при лазерном локальном нагревании. Показано, что в этом случае вязкость материала зависит как от концентрации вакансий, так и от концентрации примесей. Математически доказана пригодность вакансионной модели для анализа вязкости стекла и влияния на неё, содержащихся в стекле примесей.

Определения и общие понятия

Вязкость является важнейшим свойством стекла, она определяет особенности технологии производства стекла, режимы формования и отжига, устойчивость изделий из стекла при их использовании в области высоких температур, время протекания процессов релаксации структуры и напряжение [2]. Для того чтобы иметь возможность установить связь между временем и температурой вышеперечисленных процессов, необходимо знать температурную зависимость вязкости.

Основы теории вязкости жидкостей были заложены Я.И. Френкелем на основе разработанного им механизма теплового движения частиц, который представляет собой колебательно-поступательные перемещения кинетических единиц (атомов, молекул, сегментов полимерной цепи). Частица, или кинетическая единица, некоторое время находится в положении равновесия, совершая колебательные движения, а затем вследствие тепловых флуктуации перемещается в новое равновесное положение, преодолевая некоторый энергетический барьер, обусловленный наличием соседних частиц и силами взаимодействия.

Классические модели вязкости стекол основаны на представлениях о переключении связей между соседними атомами под влиянием флуктуации энергии теплового движения. Речь идет о флуктуационном разрыве связи с образованием пары атомов с ненасыщенными валентными связями. Эти атомы оттягиваются друг от друга окружающими их соседями. Аналогичным образом может произойти разрыв соседней химической связи с образованием новых двух ненасыщенных связей, одна из которых насыщается, реагируя с возникшей ранее соседней ненасыщенной связью; в результате происходит своего рода перескок через барьер – переключение связи.

Таким образом, ненасыщенные атомы, перемещаясь с атома на атом, удаляются друг от друга. Если к стеклу приложено сдвиговое напряжение, то переключение связи атома на атом в направлении силы более вероятно. Благодаря таким переключениям разрывов сетки стекла все атомы стекла переместятся со своих мест и в целом произойдет сдвиг участка стекла в направлении силы, т.е., в конечном счете, будет иметь место вязкое течение стекла [1].

Вязкость по модели ЖДVK

Используя модель «жидкость – деформированный вакансиями кристалл» [3], можно провести анализ механизма появления текучести при плавлении кристалла. Те-

кучесть жидкости проявляется при наличии внешней силы, сохраняющей свое направление достаточно длительное время. Такая сила вызывает перемещение атомов (молекул) в среднем в направлении приложенной силы. Начальное и конечное состояние вязкоупругого тела при деформации схематически представлены на рис. 1 а и 1 г.

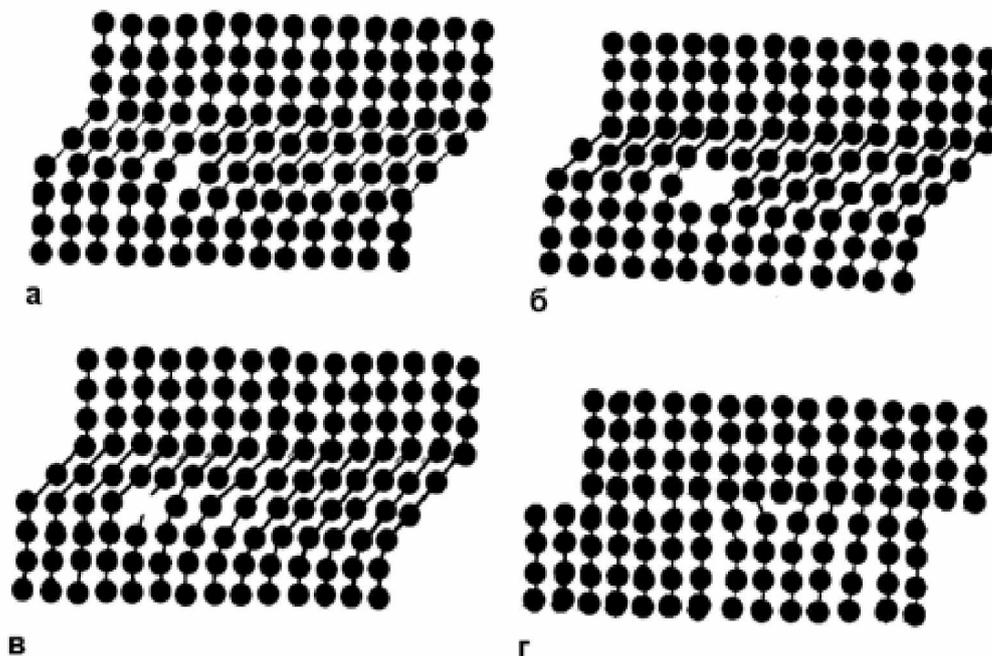


Рис. 1. Схема вязкого течения

В начальный момент времени деформация упругая – деформирована кристаллическая решетка. В конечном состоянии упругая деформация полностью снята, но одна часть тела оказывается сдвинутой относительно другой. Этот процесс обычно описывают уравнением Максвелла для вязкоупругих тел [3].

Применив для описания структуры стекла модель ЖДВК, можно показать, что изменение энергии активации вязкого течения стекла связано со скоростью изменения температуры. Согласно этой модели, стекло в состоянии термодинамического равновесия представляет собой кристалл SiO_2 с большой концентрацией кислородных вакансий, которые искажают кристаллическую решетку. Искажения структуры оказываются столь большими, что нарушается дальний порядок расположения атомов.

Вязкость стекла в термодинамическом равновесии определяется энергетическими параметрами кристалла

$$\eta \sim 2^{-3/5} \tau \cdot \alpha^{-1} \cdot \exp\left(\frac{2,2E_v + E_{db} + 0,6E_b - 0,6E_c}{kT}\right), \quad (1)$$

где τ – время порядка обратной частоты Дебая, E_v – энергия образования вакансий кислорода, E_{db} – энергия активации вакансионного механизма диффузии В-дефектов (В-дефекты – дефекты, ответственные за вязкое течение стекла [4]), E_b – энергия образования дивакансий, E_c – энергия активации самодиффузии В-дефектов. При лазерном воздействии изменение температуры происходит с высокими скоростями. Это означает, что стекло, вследствие малых скоростей диффузии вакансий, не успевает придти в состояние термодинамического равновесия. Поэтому вязкость будет определяться не равновесной концентрацией вакансий, а текущей. В этом случае выражение для вязкости (1) можно представить в виде

$$\eta \sim \frac{\exp\left(\frac{E_{db} + 0,6E_b - 0,6E_c}{kT}\right)}{n_v^{2,2}}, \quad (2)$$

где n_v – текущая концентрация вакансий.

Для анализа влияния примесей на вязкость стекла надо найти зависимость концентрации вакансий от примесей в стекле.

Согласно вакансионной модели, влияние примеси на температуру плавления связано с характером зависимости свободной энергии от температуры.

При определении свободной энергии раствора замещения будем считать его состоящим из трех компонент: растворителя, примеси и вакансий. Кроме того, в выражении для составляющей свободной энергии кристалла F , зависящей от концентрации примеси – m и концентрации вакансий – n , будем учитывать парные взаимодействия примесь-примесь, вакансия-вакансия, примесь-вакансия. Поскольку при температурах T , близких к температуре плавления T_m , растворы замещения имеют хаотическое распределение атомов примеси по узлам кристаллической решетки [5], то парные взаимодействия учтем через вероятности нахождения в некотором объеме v (определяемом радиусом взаимодействия) двух вакансий, двух атомов примеси, вакансии и атома примеси. Считая объем взаимодействия v одинаковым для всех взаимодействий, для F можно записать:

$$F = E(m, n)n + E_1(m, n)m - kTn \ln\left(\frac{Ne}{n}\right) - kTm \ln\left(\frac{Ne}{m}\right), \quad (3)$$

где $E(m, n) = E - \alpha_1 \times f(n) - \alpha_3 \times f(m)$, $E_1(m, n) = E_1 - \alpha_1 \times f(m) - \alpha_2 \times f(n)$, E и E_1 – изменение энергии кристаллической решетки при образовании вакансии или растворение одного изолированного атома примеси, соответственно, α_3 – изменение энергии E , вызванное присутствием вблизи от вакансии (в объеме взаимодействия v) атома примеси, E_1 – изменение энергии кристаллической решетки при растворении одного изолированного атома примеси, α_1 и α_2 – изменение энергии E_1 , вызванное присутствием вблизи от атома примеси второго атома примеси или вакансии, соответственно, e – основание натурального логарифма, k – постоянная Больцмана, $f(x) = 1 - \exp(-vx)$. В выражении (3) не учтено влияние вакансий и атомов примеси на колебательную энтропию раствора, поскольку для анализа рассматриваемых свойств это влияние не играет решающей роли. Согласно модели «жидкость – деформированный кристалл» выражение (3) справедливо как для твердого раствора, так и для его расплава.

Для анализа зависимости растворимости от температуры определим dm/dT с учетом зависимости концентрации вакансий от температуры $n(T)$.

Из (3) при $\partial F / \partial n = 0$ получим:

$$n = N \cdot e \cdot \exp\left[-\frac{E + \alpha + \alpha_3 - \alpha_3 \cdot \exp(-vm)}{kT}\right]. \quad (4)$$

Подставляя выражение (4) в (2) получим:

$$\eta \sim \frac{1}{N^{2,2}} \cdot \exp\left(\frac{E_{db} + 0,6E_b - 0,6E_c}{kT}\right) \cdot \exp\left(\frac{2,2(E - \alpha - \alpha_3 + \alpha_3 \cdot \exp(-vm))}{kT}\right).$$

Определим отношение вязкости стекла с примесью к вязкости чистого плавленого кварца.

$$\eta^{отн} = \exp\frac{-2,2\alpha_3(1 - \exp(-mv))}{kT}.$$

В этом выражении уже отсутствуют такие неизвестные параметры, как энергия активации вакансионного механизма диффузии В-дефектов, энергия образования дивакансий и энергия активации самодиффузии В-дефектов.

На рис. 2 представлено относительное изменение вязкости от концентрации примеси при следующих значениях параметров: $\alpha_3 = 0,05$ эв, $v = 1,685 \cdot 10^{-21}$ см³, $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К, $m_1 > m_2$ ($m_1 = 13$ %, $m_2 = 1,7$ %)

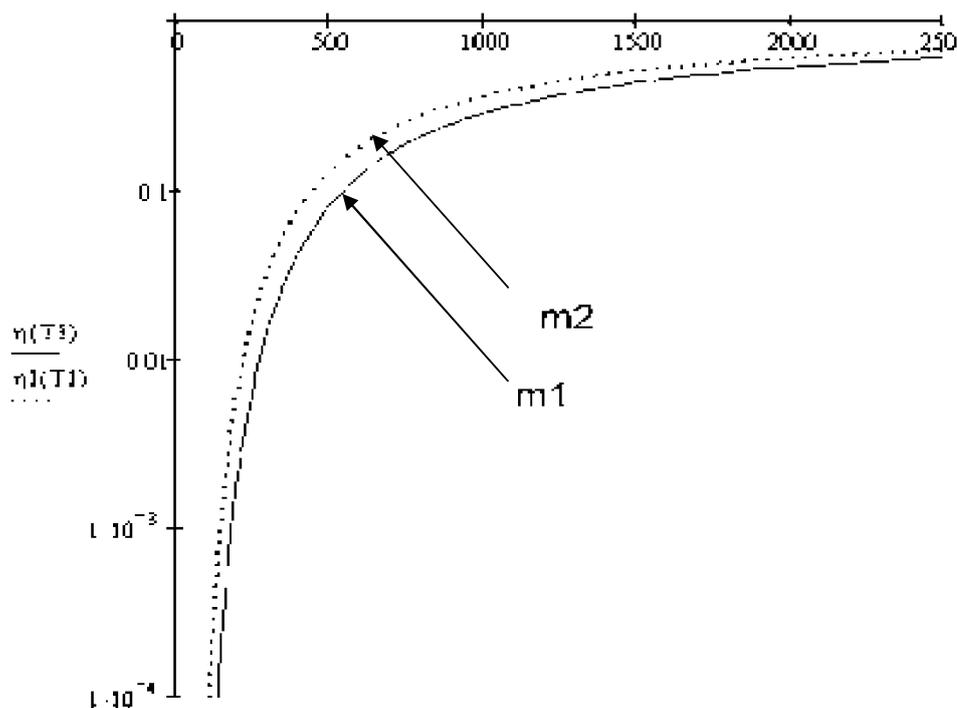


Рис. 2. Зависимость относительной вязкости от температуры нагрева при разных концентрациях вакансий

Из графика следует, что вязкость стекла при нагревании зависит от концентрации примесей. В данном случае чем больше примесей – тем меньше вязкость, но это зависит от примеси, добавленной в кварцевое стекло.

Заключение

В работе рассмотрен процесс лазерного нагрева кварцевого стекла на основе модели ЖДВК, а также математически продемонстрирована возможность применения этой вакансионной модели для анализа вязкости кварцевого стекла с примесями.

Работа выполнена при поддержке ведущей научной школы НШ-5967.2006.8.

Литература

1. Бартенев Г.М., Сандитов Д.С. Релаксационные процессы в стеклообразных системах. Новосибирск: Наука, 1986. 239 с.
2. Леко В.К., Мазурин О.В. Свойства кварцевого стекла. Л.: Наука, 1985. 167 с.
3. Яковлев Е.Б. Особенности поведения стекол и стеклообразных материалов при быстром нагревании. СПб: СПбГУ ИТМО, 2004. С. 49–72.
4. Яковлев Е.Б. Изменение структуры стекла при лазерном воздействии // Оптический журнал. 1996. №2. С. 3–7.
5. Хачатурян А.Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. М.: Наука, 1974. 384 с.
6. Яковлев Е.Б. Аномальное поведение вязкости стекол при лазерном нагревании. // Известия вузов. Приборостроение. 2001. № 6. С. 26–31.

ЛАЗЕРНЫЙ МЕТОД ОСАЖДЕНИЯ МЕДИ ИЗ РАСТВОРА ЭЛЕКТРОЛИТА НА ПОВЕРХНОСТЬ ДИЭЛЕКТРИКА

А.В. Аверина, А.В. Поволоцкий

(Санкт-Петербургский государственный университет)

Научный руководитель – к.ф.-м.н., доцент А.А. Маньшина

(Санкт-Петербургский государственный университет)

Метод лазерного осаждения металла из растворов электролитов (ЛОМР) использовался для осаждения медных структур на поверхность оксидных стекол. Определены оптимальные параметры осаждения в стационарном режиме (без сканирования лазерного излучения по поверхности подложки), исследованы зависимости диаметра полученных металлических структур от времени воздействия и мощности лазерного излучения.

1. Введение

Метод лазерного осаждения металла из растворов электролитов (ЛОМР) позволяет решать задачи локального нанесения металла и создавать качественные малоразмерные металлические структуры на поверхности диэлектриков, кроме того, он считается наиболее эффективным и дешевым в своем классе [1–5]. Метод ЛОМР состоит в том, что лазерное излучение фокусируется на границу раздела «подложка-электролит». Вследствие термически либо фотолитически инициированной химической реакции восстановления происходит осаждение металла из раствора электролита на поверхность подложки. В результате могут быть получены проводящие структуры из Cu, Pd, Ni, Ag, Ni, Al, осажденные на различные типы подложек, например, на полупроводники (Si, Ge, GaAs) или диэлектрики (Si_xN_y , оксидные стекла, полимеры) [1]. Получение металлических структур методом ЛОМР может использоваться при создании интегральных микросхем, контактных соединений и электродов. Осаждение металлических дорожек на полимерные материалы позволяет создавать гибкие экраны, клавиатуры и т.д.

Для осаждения сложных структурных элементов и проводящих дорожек методом ЛОМР используется динамический режим осаждения (обеспечивается сканирование лазерного излучения по поверхности подложки, покрытой слоем жидкого электролита). При осаждении металла методом ЛОМР побочным результатом химической реакции восстановления является выделение газа (водорода). Образование пузырьков газа в области протекания химической реакции приводит к расфокусированию лазерного излучения, что негативно сказывается на процессе осаждения металла. Для минимизации этого явления авторы работ [1–5] уменьшают мощность лазерного излучения, что приводит к уменьшению скорости протекания химической реакции и, как результат, к уменьшению количества выделяемых продуктов реакции. При таких условиях для достижения равномерного распределения металла необходимо увеличивать число сканирований лазерного излучения по подложке. Однако режим многократного сканирования является малоэффективным с технологической точки зрения, кроме того, использование низких мощностей лазерного излучения и многократных сканирований приводит к осаждению неоднородных металлических структур, имеющих высокие значения сопротивления (до тысячи Ом) [1].

В данной работе метод ЛОМР использовался для осаждения меди в стационарном режиме (без сканирования лазерного излучения по поверхности подложки). Для борьбы с негативным влиянием образования пузырей предложена новая геометрия осаждения, позволяющая создавать качественные однородные металлические структуры. Определены пороговые мощности лазерного излучения, при которых происходит процесс осаждения меди, а также исследованы зависимости диаметра осажденных структур от времени воздействия и мощности лазерного излучения.

2. Экспериментальная часть

Схема экспериментальной установки представлена на рис. 1.

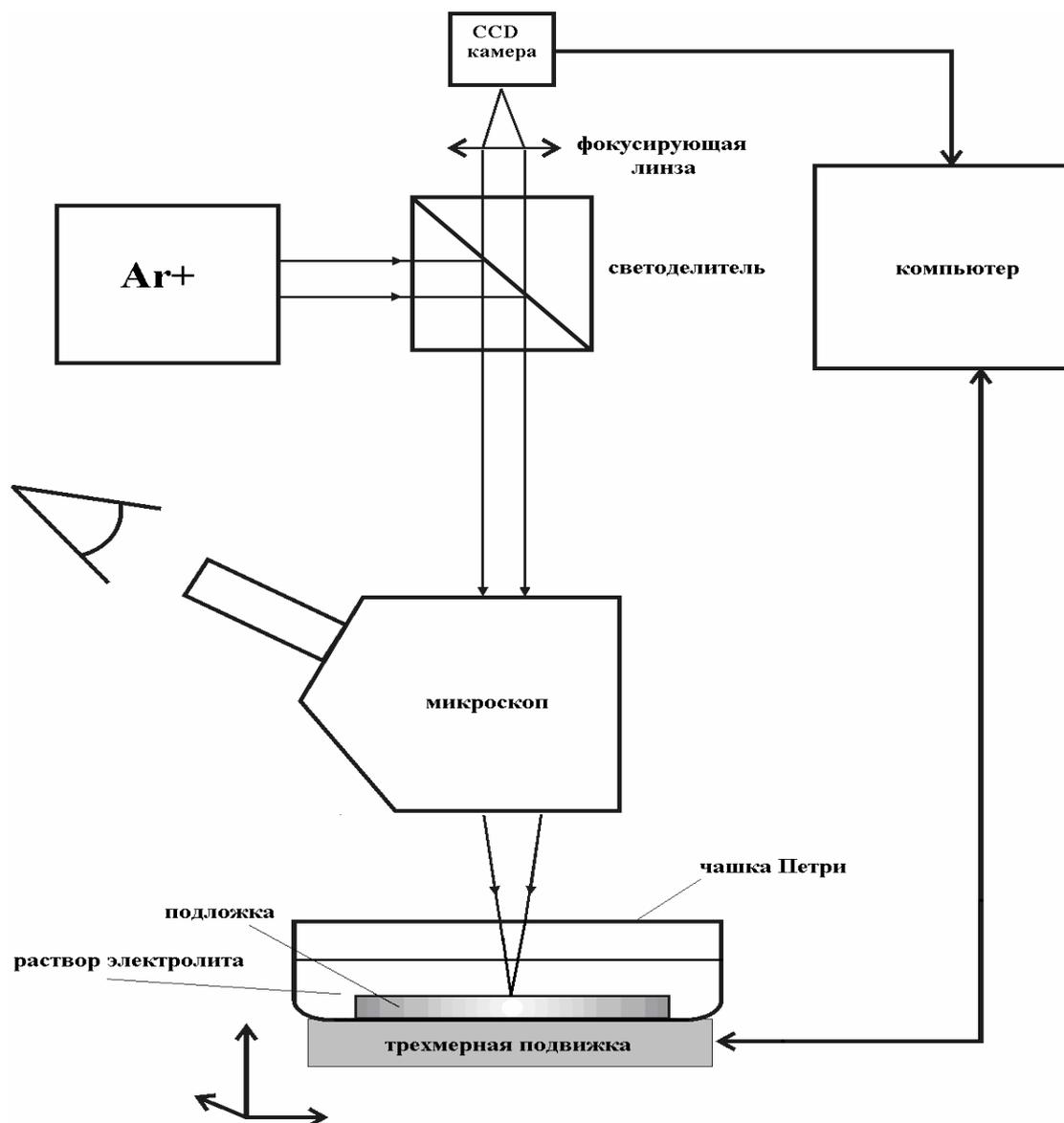


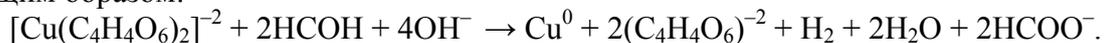
Рис. 1. Схема экспериментальной установки для осаждения металла методом ЛОМР

В качестве источника лазерного излучения для осаждения меди методом ЛОМР использовался аргоновый (Ar^+) лазер ЛГН-502, работающий в многомодовом режиме генерации, что позволяло варьировать мощность лазерного излучения в широком диапазоне – от 5 до 600 мВт (мощность лазерного излучения контролировалась при помощи ваттметра LPM-905). Лазерное излучение через светоделительный куб направлялось в микроскоп (MIN-8) и фокусировалось на поверхность подложки, погруженной в раствор электролита, толщина которого составляла 1 мм. В качестве подложек использовались химически очищенные оксидные стекла SiO_2 размером $24 \times 24 \times 0,17$ мм. Для осаждения меди использовался водный раствор электролита на основе сульфата меди: 0,260 г CuSO_4 , 1,320 г $\text{KNaC}_4\text{H}_4\text{O}_6$ (тарtrat), 0,386 г NaOH , 2,2 г HCON (формальдегид), 2,5 г CH_3OH (метанол) (на 100 мл H_2O). Температура раствора составляла 298 К. Раствор электролита и подложка помещались в чашку Петри, которая устанавливалась на трехмерную подвижку. Процесс осаждения металла на поверхность подложки контролировался при помощи CCD-камеры.

3. Результаты и их обсуждение

В качестве осаждаемого металла в данной работе была использована медь. Медь обладает наибольшей удельной проводимостью, медные проводники способны выдерживать большую плотность тока, чем, например, алюминиевые, и к тому же обладают более высокой устойчивостью к разрушению под воздействием тока, что позволяет продлить время жизни микросхемы.

Реакция восстановления меди из раствора электролита может быть описана следующим образом:



Процесс осаждения меди является автокаталитическим, после осаждения некоторого количества металла на каталитических центрах поверхности процесс продолжается уже до полного израсходования содержащихся в растворе компонентов, т.е. до окисления восстановителя или восстановления ионов металла. Осаждение протекает без приложения внешнего электрического поля. В общем случае диэлектрическая поверхность не содержит каталитических центров и должна быть активирована. Применение для этой цели лазерного излучения обеспечивает высокую скорость и высокое пространственное разрешение процесса [6].

В первых проведенных нами экспериментах по осаждению меди из раствора электролита использовалась стандартная геометрия (подложка погружалась в электролит, толщина которого составляла 1 мм). Излучение фокусировалось на границу раздела «подложка-электролит» со стороны электролита, мощность лазерного излучения составляла 300 мВт. В процессе осаждения меди в результате химической реакции образовывались пузыри (за счет выделения газа H_2), что приводило к расфокусированию лазерного луча и препятствовало равномерному осаждению металла (рис. 2).

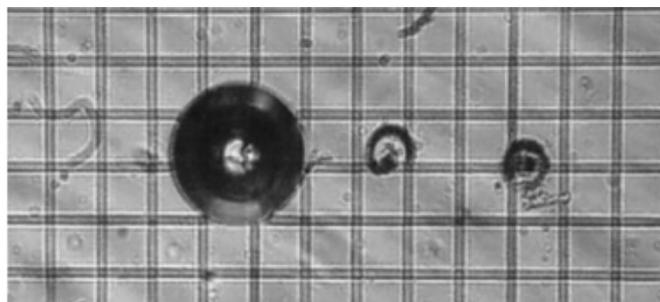


Рис. 2. Негативное влияние образования пузырей. Слева направо: пузырь, две образовавшиеся металлические структуры

Для минимизации негативного влияния образования пузырей на процесс осаждения меди была изменена геометрия осаждения (рис. 3). Подложка была помещена на поверхность раствора (толщина раствора составляла 5 мм), лазерный луч фокусировался на границу раздела «подложка-электролит» со стороны подложки. В предложенной геометрии осаждения пузыри газа вытесняются из области протекания химической реакции и не препятствуют воздействию лазерного излучения на границу раздела «подложка-электролит».

Таким образом, использование новой геометрии осаждения позволило создавать качественные медные структуры и исследовать влияние условий осаждения (время лазерного воздействия, мощность лазерного излучения) на размер осажденных структур. В результате работы был определен оптимальный диапазон мощности лазерного излучения для осаждения меди методом ЛОМР в стационарном режиме. Так, было обнаружено, что при мощностях лазерного излучения меньше 240 мВт не удастся инициировать химическую реакцию восстановления меди. При мощностях, превышающих 500 мВт, происходит разрушение осажденной структуры. На фотографии (рис. 4) пред-

ставлены металлические структуры, осажденных при различных временах воздействия лазерного излучения.

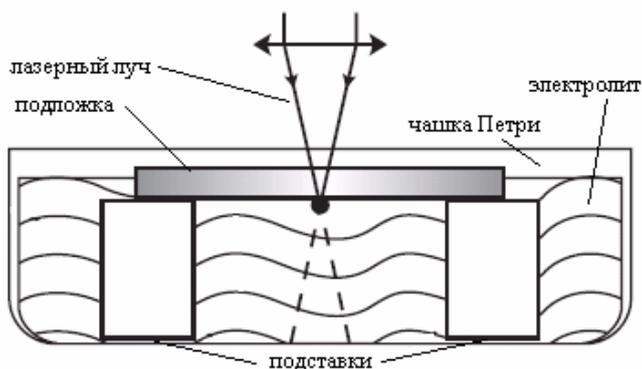


Рис. 3. Новая геометрия осаждения металла из раствора электролита

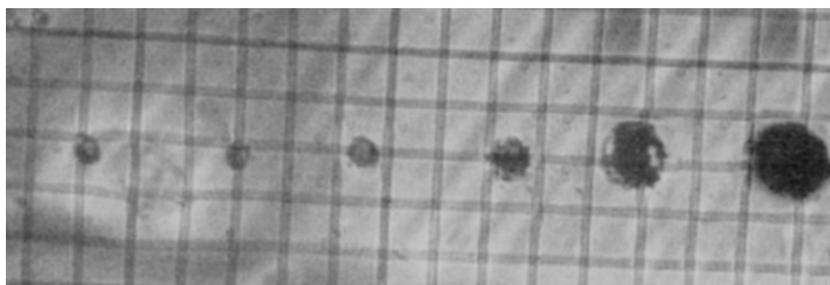


Рис. 4. Микрофотография полученных металлических структур. Крайняя левая точка соответствует времени лазерного воздействия 4 с далее 5 с, 10 с, 15 с, 25 с и крайняя правая – 35 с

Были получены следующие зависимости размера структур от условий осаждения:

1. При увеличении мощности от 240 до 500 мВт и фиксированном времени воздействия (1 мин) диаметр полученных структур увеличивался от 40 до 110 мкм (рис. 5).
2. При увеличении времени воздействия от 5 до 55 секунд и фиксированной мощности излучения (300 мВт) диаметр полученных структур увеличивался от 50 до 160 мкм (рис. 6).

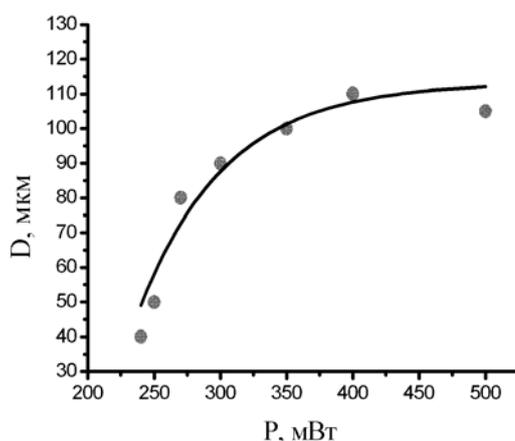


Рис. 5. Зависимость диаметра полученных металлических структур от мощности лазерного излучения

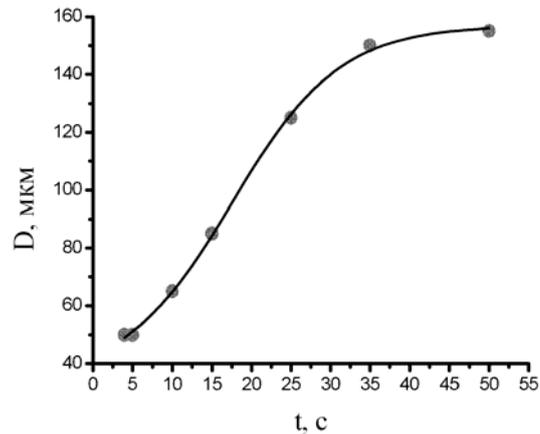


Рис. 6. Зависимость диаметра полученных металлических структур от времени воздействия

4. Заключение

В работе метод лазерного осаждения металла из растворов электролитов (ЛОМР) был использован для создания медных структур на поверхности оксидных стекол. Определены оптимальные параметры осаждения в стационарном режиме (без сканирования лазерного излучения по поверхности подложки), исследованы зависимости диаметра полученных металлических структур от мощности лазерного излучения и времени воздействия.

В дальнейшем мы намерены осаждать металлы методом ЛОМР в динамическом режиме для создания сложных структурных элементов и проводящих дорожек. При осаждении в динамическом режиме будет использована новая разработанная геометрия и полученные зависимости размера осажденных структур от мощности и длительности лазерного воздействия.

Литература

1. K. Kordás, K. Bali, S. Leppävuori, A. Uusimäki, L. Nánai Laser direct writing of copper on polyimide surface from solution. // *Applied Surface Science*. 2000. № 154–155. P. 399–404.
2. A. Manshina, A. Povolotskiy, T. Ivanova, A. Kurochkin, Yu. Tver'yanovich, D. Kim, M. Kim and S.C. Kwon Laser-assisted metal deposition from CuSO₄-based electrolyte solution. // *Laser Physics Letters*. 2007. № 2. P. 163–167.
3. L.M. Wee, L. Li. Multiple-layer laser direct writing metal deposition in electrolyte solution // *Applied Surface Science*. 2005. №247. P. 285–293.
4. K. Kordás, L. Nánai, G. Galbács, A. Uusimäki, S. Leppävuori, K. Bali. Reaction dynamics of CW Ar⁺ laser induced copper direct writing from electrolyte on polyimide substrates. // *Applied Surface Science*. 2000. №158. P. 127–133.
5. A. Manshina, A. Povolotskiy, T. Ivanova, A. Kurochkin, Yu. Tver'yanovich, D. Kim, M. Kim and S.C. Kwon. CuCl₂-based liquid electrolyte precursor for laser-induced metal deposition. // *Laser Physics Letters*. 2007. №3. P. 242–246.
6. Г.А. Шафеев Лазерная активация и металлизация диэлектриков. // *Квантовая электроника*. 1997. № 12. С. 24.

СТРУКТУРНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В МОНОКРИСТАЛЛАХ КВАРЦА ПРИ ОБЛУЧЕНИИ БЫСТРЫМИ НЕЙТРОНАМИ

Е.Ю. Акишина, К.Е. Лазарева

Научный руководитель – д.х.н., с.н.с. В.В. Голубков
(Институт химии силикатов РАН)

Методом рассеяния рентгеновских лучей под малыми углами были исследованы образцы монокристалла кварца, облученные быстрыми нейтронами дозами от 2×10^{16} до 2×10^{20} . При дозах от 2×10^{16} до 1.7×10^{18} чувствительность метода не позволяет обнаружить изменения структуры, плотность образцов также не изменяется в пределах погрешности измерений 0.001 г/см^3 . Начиная с дозы 5×10^{18} , в образцах наблюдается появление областей неоднородности с размерами порядка 20 \AA (в приближении рассеяния сферическими частицами с постоянной плотностью), плотность уменьшается от 2.65 до 2.648 г/см^3 . Одновременно регистрируется появление дополнительного рассеяния, обусловленного рассеянием тепловыми флуктуациями плотности аморфизованных областей. Величина этого рассеяния позволяет оценивать относительный объем аморфизованных областей, при дозе $5 \times 10^{18} \text{ б.н./см}^2$, он равен 2–3 %.

Введение

Значительное внимание исследователей было уделено изучению взаимодействия быстрых нейтронов с оксидом кремния в различных структурных состояниях – стеклообразным кремнеземом (кварцевыми стеклами) [1–4] и монокристаллами кварца [5] из-за отсутствия долгоживущих элементов. Было установлено, что при облучении монокристаллов и стеклообразного кремнезема дозой 2×10^{20} достигается одинаковое состояние с плотностью 2.26 г/см^3 .

Методом рассеяния рентгеновских лучей под малыми углами (РМУ) фиксировалось появление аморфизованных областей с размерами $50\text{--}60 \text{ \AA}$ [3–5].

В работе были исследованы образцы кварца, облученные в ядерном реакторе различными дозами нейтронов: 2×10^{16} , 7.7×10^{17} , 1.7×10^{18} , 5×10^{18} , 2×10^{20} , а также исходный монокристалл кварца и кварцевое стекло.

Методика эксперимента

Метод РМУ является прямым методом изучения среднего порядка в неупорядоченных системах – их неоднородности в масштабе от нескольких ангстрем до сотен и тысяч ангстрем. Рассеяние рентгеновских лучей под малыми углами однокомпонентными жидкостями и переохлажденными жидкостями связано только с их неоднородностью, обусловленной тепловыми флуктуациями плотности. Интенсивность рассеяния тепловыми флуктуациями плотности при углах близких к нулю ($I_p(0)$) может быть представлена в виде

$$I_p(0) = \rho^2 k T \chi_T V,$$

где ρ – средняя плотность всех электронов образца, k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, χ_T – изотермическая сжимаемость, V – объем. Эта интенсивность не зависит от угла рассеяния. Вклад интенсивности рассеяния рентгеновских лучей под большими углами приводит к росту интенсивности РМУ образцом при увеличении угла рассеяния. При этом угловая зависимость измеряемой в эксперименте интенсивности может быть представлена в виде:

$$I(s) = I(0) \exp(-Ks^2),$$

$$s = 4\pi \sin(\varphi/2) / \lambda,$$

где φ – угол рассеяния, λ – длина волны электромагнитного излучения, K – постоянная, зависящая от типа стекла.

Интенсивность рассеяния тепловыми флуктуациями плотности, в свою очередь, является суммой рассеяния структурной неоднородностью, $I_{ст}$, и рассеяния неоднород-

ностью, обусловленной тепловыми колебаниями атомов – фононной составляющей, I_{ϕ} . При температурах ниже температуры стеклования и при временах наблюдения много меньших времени релаксации структуры величину $I_{ст}$ можно считать не зависящей от температуры, тогда как I_{ϕ} в общем случае зависит от температуры и определяет температурную зависимость измеряемой интенсивности РМУ:

$$I_{\rho}(N) = I_{ст} + I_{\phi}(N).$$

Однако, так как величина I_{ϕ} обычно составляет несколько процентов от I_{ρ} , то температурная зависимость измеряемой интенсивности РМУ тепловыми флуктуациями плотности выражена очень слабо, и в узком интервале температур (50–70 °С ниже T_g) ее можно считать постоянной.

Жидкости и стекла, неоднородность которых обусловлена только тепловыми флуктуациями плотности и флуктуациями концентрации, можно рассматривать как гомогенные среды. Микронеоднородными являются стекла, жидкости (расплавы), в которых присутствуют области неоднородности – области, отличающиеся по составу или структуре от окружающей их матрицы, что приводит к отличию их электронной плотности от электронной плотности матрицы.

Появление областей неоднородности может быть связано с протеканием процессов фазового разделения, кристаллизации или кластерообразования различной природы. Их присутствие легко обнаружить по наличию характерной угловой зависимости – интенсивность РМУ уменьшается при увеличении угла рассеяния. В случае идентичных сферических областей интенсивность РМУ такой структурой, $I_{сс}$, можно представить в виде

$$I_{сс}(s) = I(0) \exp(-s^2 R^2/5) = Nn^2 \exp(-s^2 R^2/5), \text{ при } sR \ll 1,$$

где R – радиус сферической области с постоянной плотностью в объеме, N – количество рассеивающих областей, n – количество электронов в отдельной области.

Важной характеристикой структуры является величина среднего квадрата разности электронных плотностей фаз, $\langle(\Delta\rho)^2\rangle$. В случае двухфазной системы:

$$\langle(\Delta\rho)^2\rangle = (\rho_1 - \rho_2)^2 w_1 w_2,$$

где ρ_1 и ρ_2 – электронные плотности фаз, а w_1 и w_2 – их относительные объемы.

При этом величина $\langle(\Delta\rho)^2\rangle$ определяется следующим образом:

$$\langle(\Delta\rho)^2\rangle = \frac{1}{4\pi^2 v} \int_0^{\infty} s I(s) ds,$$

где $I(s)$ – интенсивность РМУ, измеренная в э.е. (1 э.е. равна интенсивности рассеяния одним электроном) при использовании «бесконечно» высокого первичного пучка, v – объем частицы.

Экспериментальные результаты

На рис. 1 приведены угловые зависимости интенсивности РМУ исследованными образцами. При относительно больших углах рассеяния (начиная примерно с угла, отмеченного вертикальной чертой), интенсивности рассеяния всеми образцами кварца очень низки. В области малых углов наблюдается интенсивное рассеяние, что свидетельствует о присутствии в образцах крупных областей неоднородности.

Из рис. 1 видно, что в интервале от $s \sim 1$ и до 5.5 ($s = 4\pi \sin(\varphi/2)/\lambda$) интенсивности исходным монокристаллом (не облученным) и образцами, облученными дозами до $1.7 \cdot 10^{18}$, не зависят от величины s и от дозы облучения в пределах ошибки измерений (ошибка в точке $\pm 10\%$).

Но интенсивность РМУ образца, облученного дозой 5×10^{18} , и по величине, и по виду угловой зависимости заметно отличается. Интенсивность РМУ этим образцом уменьшается при увеличении величины s , зависящей от угла рассеяния, и остается за-

метно выше при максимальных углах рассеяния, где уже, по-видимому, начинается увеличение интенсивности при увеличении угла рассеяния, связанное с влиянием рассеяния рентгеновских лучей под большими углами.

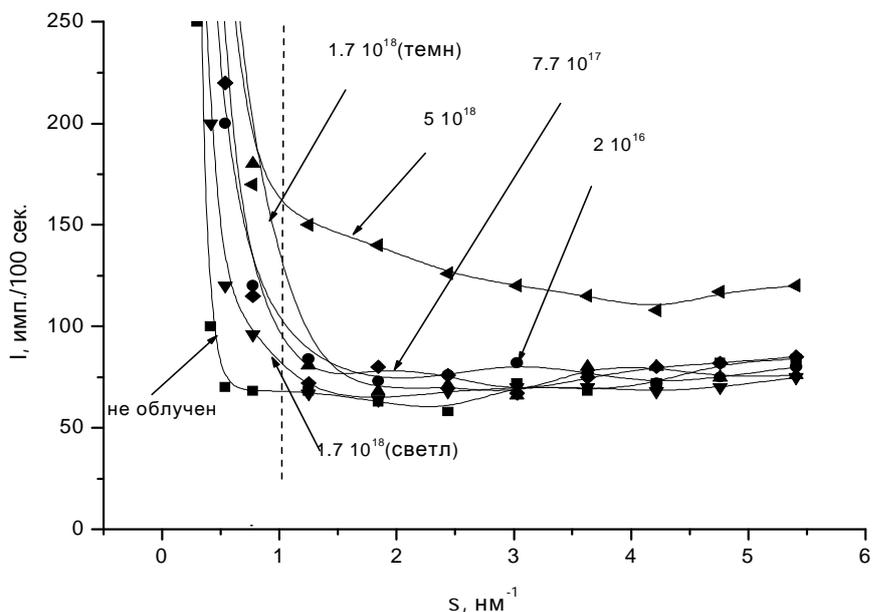


Рис.1. Угловые зависимости интенсивности РМУ образцами различных доз

Таким образом, из вида угловой зависимости можно заключить, что в образце появились новые рассеивающие области. Радиусы этих областей равны примерно 20 \AA (в приближении рассеяния сферическими частицами с постоянной плотностью в объеме). Увеличение интенсивности РМУ при больших углах связано с рассеянием образовавшихся аморфизованных областей.

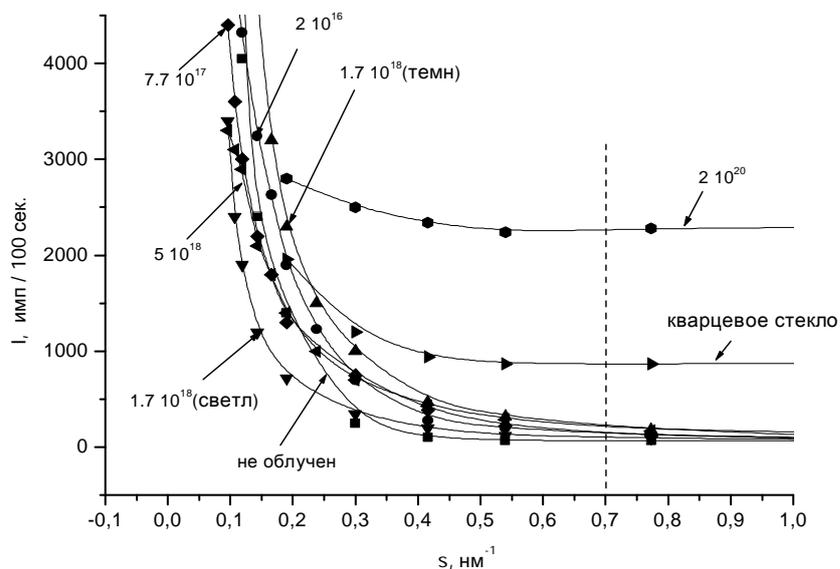


Рис. 2. Угловые зависимости интенсивности РМУ образцами различных доз при углах до $s = 1 \text{ nm}^{-1}$

Среди облученных образцов были такие, что одна половина образца была светлая и прозрачная, а вторая половина имела темный оттенок, который был отчетливо виден.

Были вырезаны кусочки для измерений таким образом, что на пластине половина была из светлой части, а вторая из темной. Для образца, облученного дозой 1.7×10^{18} , были получены угловые зависимости светлым и темным образцом. Интенсивности РМУ этих частей по своей величине максимально различались. Как видно из рис. 2, интенсивности РМУ всеми другими образцами, в том числе и необлученным кварцем, лежат между этими кривыми. Таким образом, все рассеяние, наблюдаемое в области малых углов, обусловлено случайной структурой образцов и никакого отношения к облучению не имеет.

Видно, что интенсивность рассеяния кварцевым стеклом велика, но интенсивность РМУ образцом, облученным максимальной дозой, существенно больше интенсивности рассеяния кварцевым стеклом.

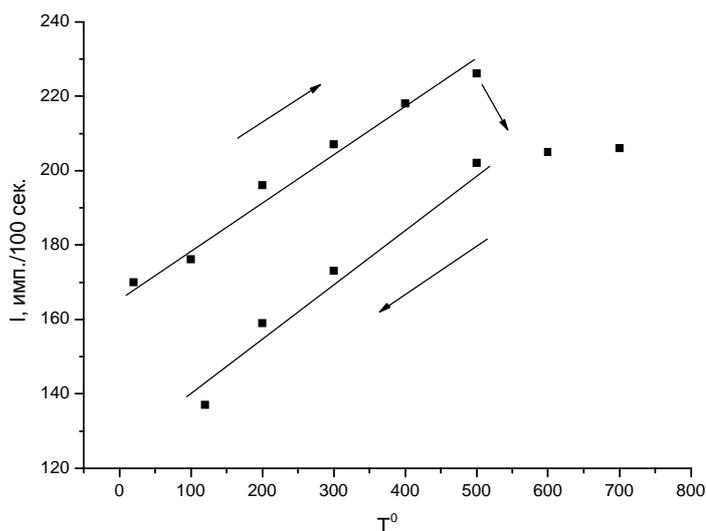


Рис. 3. Зависимости интенсивности РМУ образцом, облученным дозой 5×10^{18} , от температуры

При рассмотрении зависимости температуры от интенсивности рассеивания (рис. 3) при угле рассеивания 350° , можно обнаружить, что при увеличении температуры до 570°C интенсивность рассеивания увеличивается, а в интервале температур $550\text{--}600^\circ\text{C}$ происходит резкое понижение интенсивности РМУ. При дальнейшем повышении температуры интенсивности РМУ не изменяется.

При понижении температуры интенсивность остается неизменной до примерно 570°C , а в интервале температур от 570°C до комнатной линейно уменьшается. При этом в пределах ошибки измерения интенсивности наклон графиков как при повышении температуры, так и при понижении, одинаков. Однако интенсивность РМУ при комнатной температуре остается более высокой, чем у необлученного кварца или образцов кварца, облученных меньшими дозами.

Так как интенсивность РМУ при термической обработке уменьшается, то, следовательно, во время термообработки происходят изменения структуры в аморфизованных областях.

Рис. 4 позволяет увидеть, насколько сильно изменяется плотность образцов с увеличением дозы относительно изначальной плотности кристалла кварца. Плотность образцов, облученных дозами от 2×10^{16} до 1.7×10^{18} , в пределах погрешности эксперимента $\pm 0.001 \text{ г/см}^3$ остается неизменной. При дозе 5×10^{18} наблюдается уменьшение плотности. А плотность образца с дозой 2×10^{20} значительно отличается от плотности образцов с меньшей дозой облучения быстрыми нейтронами, по своему значению она более близка к кварцевому стеклу. Образец, облученный максимальной дозой, практически

полностью аморфизован, соответственно, значительно увеличивается интенсивность РМУ. При этом интенсивность РМУ аморфизованным образцом оказывается примерно в три раза выше интенсивности рассеяния кварцевым стеклом.

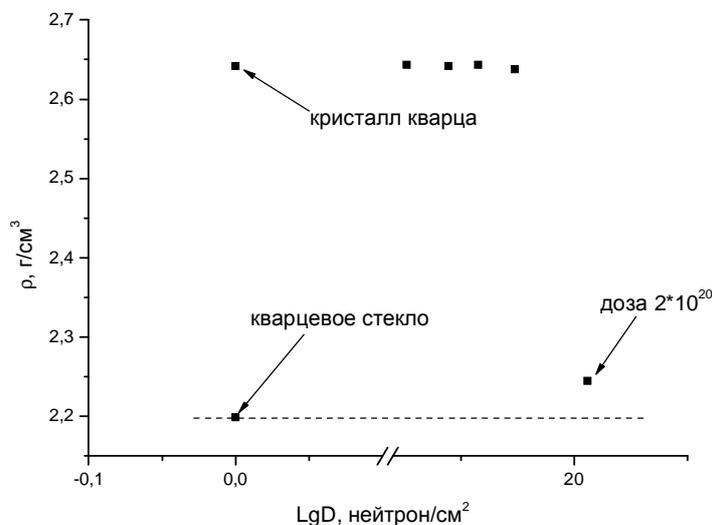


Рис. 4. Зависимость плотности образцов от дозы облучения

Обсуждение результатов

При рассмотрении угловых зависимостей интенсивности РМУ при s до $\sim 1 \text{ нм}^{-1}$ наблюдалось интенсивное рассеяние, следовательно, в образцах имеются крупные области неоднородностей. Но так как никакой связи между дозой облучения нейтронами и интенсивностью РМУ не наблюдается, то можно сделать вывод, что обнаруженные нами области неоднородности – это случайная структура образцов. Рассеяние, связанное с присутствием аморфизованных областей, в этом интервале углов не выявлено.

В интервале углов от $s \sim 1$ и до 5.5 интенсивность исходным монокристаллом (не облученным) и образцами, облученными дозами включая 1.7×10^{18} , не зависят от угла рассеяния и от дозы облучения. Следовательно, здесь также не наблюдаются аморфизованные области, а все рассеяние – это рассеяние дефектами кристаллической решетки образцов и рассеяние на колебаниях атомов. А вот при дозе облучения 5×10^{18} на рис. 1 хорошо видно, что появляется угловая зависимость интенсивности РМУ и сама интенсивность заметно увеличивается. Это можно объяснить появлением аморфизованных областей радиусом порядка 20 \AA , которые и дают это добавочное рассеяние, и дополнительным рассеянием тепловыми флуктуациями плотности в объеме аморфизованных областей.

Из рис. 2 и 5 видно, что интенсивность РМУ при дозе 2×10^{20} намного больше, чем у кварцевого стекла. Это произошло из-за того, что уровень тепловых флуктуаций выше. Это можно объяснить в предположении, что структура образца соответствует структуре жидкости при значительно более высоких температурах. Эта структура закаляется благодаря высокой скорости охлаждения.

Точно определить связь между дозой облучения и интенсивность РМУ на данном этапе затруднительно. Не хватает набора образцов в пределах дозы облучения от 5×10^{18} до 2×10^{20} . И, соответственно, как видно из рис. 5, мы не можем построить точный ход зависимости кинетики аморфизации.

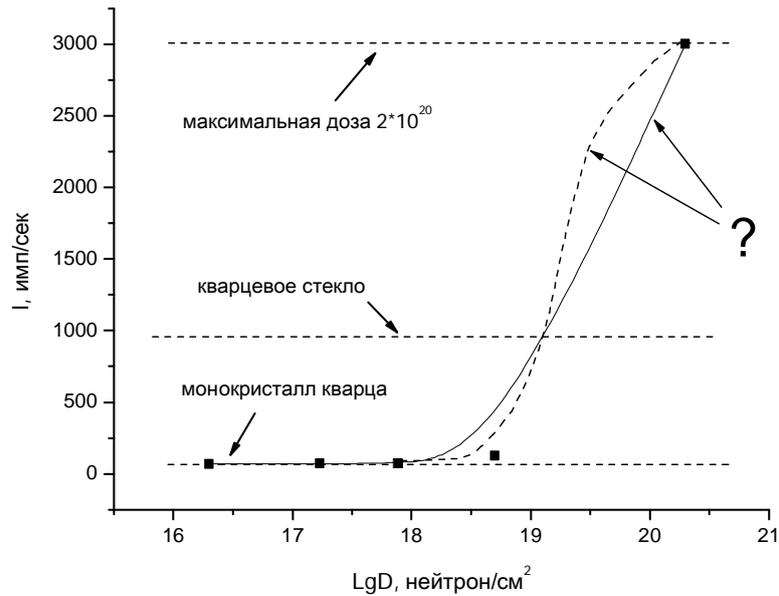


Рис. 5. Зависимость интенсивности рассеяния тепловыми флуктуациями плотности от дозы облучения

При температуре 0 К интенсивность РМУ определяется рассеянием на неоднородностях, обусловленных распределением атомов (ионов) в объеме, т.е. на различных точечных дефектах в кристаллической решетке (вакансии, дислокации, микротрещины и т.д.). А при $T > 0$ К добавляется интенсивность рассеяния неоднородностью, вызванной колебаниями атомов около положения равновесия без изменения взаимного расположения атомов – колебательная составляющая. И структурная, и колебательная интенсивности составляют вместе интенсивность рассеяния тепловыми флуктуациями плотности жидкости. В силу того, что данные образцы облучены быстрыми нейтронами, т.е. имеются области аморфизации, интенсивность РМУ этими областями вносит дополнительный вклад в интенсивность рассеивания всем объемом образца. При нагревании такого образца происходят структурные изменения в областях аморфизации. Так как интенсивность РМУ остается значительно выше, чем в случае монокристалла, можно заключить, что в областях аморфизации происходят перестройки структуры и, по-видимому, структура этих областей приближается к структуре кварцевых стекол.

Заключение

Облучение дозами 2×10^{16} , 7.7×10^{17} , 1.7×10^{18} метод РМУ не фиксирует изменений структуры. Начиная с дозы 5×10^{18} , наблюдается угловая зависимость интенсивности РМУ, что можно связать с рассеянием областями неоднородности. Радиусы по данным РМУ составляют 20 А. Также увеличивается интенсивность РМУ флуктуационной структурой, что связано с появлением аморфизованной структуры в объеме областей неоднородности.

При прогревании образца с дозой 5×10^{18} в области температур от 500 °С до 600 °С происходит уменьшение интенсивности РМУ и при дальнейшем увеличении температуры она остается постоянной. При охлаждении образца в интервале температур от 570 °С до комнатной температуры интенсивность уменьшается, но при всех температурах остается все равно выше, чем интенсивность монокристалла кварца, примерно на одну и ту же величину.

На основании этого можно сделать вывод, что аморфизованные области остаются в объеме образца. Плотность этих областей отличается от плотности окружающей их матрицы, но средняя плотность образца остается неизменной.

Литература

1. Bale H.D., Shepler R.E., Gibbs G.W. X-ray Diffraction from Neutron Irradiated Vitreous Silica // J. Appl. Phys. 1970. V 41. № 1. P. 241.
2. Primak W., Szymanski H. Radiation Damage in vitreous Silica Annaling of the Density Changes // Phys. Rev. 1956. V.101. P. 1268–1271.
3. Lukesh J.S. Neutron Damage to the Structure of Vitreous Silica. // Phys. Rev. 1955. V.97. №.2. P. 345.
4. Maurer R.D. Light Scattering by Neutron irradiated silica. // J. Phys. Chem. Solids . 1960. V. 17. № 1–2. P. 44–51.
5. Weissmann S., Nakajima K. Defect Structure and Density Gecrease in Neutron Irradiated Quartz. // J. Appl. Phys. 1963. V 34. P. 611.
6. Голубков В.В. Проблема неоднородного строения стекол // Физ. и хим. стекла. 1988. Т. 24. № 3. С. 289–304.
7. Свергун С.В., Фейгин Л.А. Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние // М.: Наука. Гл. ред. физ.- мат. лит., 1986. 280 с.
8. Андреев Н.С., Мазурин О.В., Порай-Кошиц Е.А., Роскова Г.П., Филипович В.Н. Явление ликвации в стеклах / Под ред. М.М. Шульца. Л.: Наука, 1974. 218 с.

АКРИЛАТНЫЕ СОПОЛИМЕРЫ В КАЧЕСТВЕ ФИКСИРУЮЩЕЙ МАТРИЦЫ КАРБОНИЗИРОВАННЫХ ОСТАТКОВ

В.С. Соловьев

Научный руководитель – к.т.н., доцент М.В. Успенская

Рассмотрены акрилатные сополимеры в качестве фиксирующей матрицы для карбонизированных остатков, найденных после пожаров. Показано влияние условий синтеза на время начала гелеобразования и свойства конечного материала.

Введение

После пожаров необходимо сохранить остатки сгоревших материалов в неизменном состоянии для проведения дальнейшей экспертизы, в частности, для установления причины пожара и источника воспламенения. Для проведения экспертизы используют различные оптические и спектральные методы анализа. При подготовке образцов для исследований на электронном микроскопе карбонизованные остатки разрушаются. Поэтому необходимо было создать полимерную матрицу, которая фиксирует исходные карбонизованные остатки.

Экспериментальная часть

В качестве фиксирующего агента были выбраны акрилатные полимеры, полученные путем радикальной полимеризации в водной среде. В качестве исходных материалов были выбраны три группы карбонизованных остатков, найденных после пожара: проволоки медные, резины и остатки дерева. В качестве мономеров использовались акриловая кислота (АК) и акриламид (АА). В ходе опытов варьировалось соотношение акриламида и акриловой кислоты АА: АК = 0–100 мас.%. Массовая доля мономеров в исходной мономерной смеси составляла 30 мас.%. Как сшивающий агент использовался N,N'-метилден-бис-акриламид с массовой долей(%) 0,7. В экспериментах использовалась окислительно-восстановительная система, состоящая из персульфата аммония и тетраметилэтилен-диамина, соотношением 1:1.

В ходе опыта исходные карбонизованные остатки погружались в готовую мономерную смесь и выдерживались там до полного затвердевания массы. Время начала гелеобразования устанавливалось по началу потери текучести смеси.

Обсуждение результатов

Одной из важнейших технических задач данного исследования было нахождение оптимального времени гелеобразования: с одной стороны, при быстром процессе гелеобразования получают материалы с дефектной структурой, с другой стороны, увеличение времени начала гелеобразования более 20–25 мин, приводит к разрушению карбонизованных остатков в процессе синтеза. Время начала гелеобразования зависит от соотношения мономеров – акриламида и акриловой кислоты в исходной реакционной смеси, а также от температуры синтеза, поэтому необходимо было исследовать влияние указанных выше параметров на время начала гелеобразования.

Результаты экспериментов приведены в табл. 1. Из табл. 1 видно, что при увеличении температуры синтеза время начала гелеобразования уменьшается.

При увеличении доли акриламида в реакционной смеси также наблюдается уменьшение времени начала гелеобразования, что объясняется большей активностью акриламида по сравнению с акриловой кислотой (константы сополимеризации $r_{AA} = 1,38$; $r_{AK} = 0,36$) [1].

Соотношение АК: АА	Время начала гелеобразования, мин	Температура синтеза, С°
100:0	20	60
100:0	25	50
100:0	30	40
70:30	12	50
70:30	15	45
70:30	17	40
40:60	12	50
40:60	10	40
40:60	8	30
30:70	7	50
30:70	5	40
30:70	4	30
0:100	1	22

Таблица 1. Зависимость времени начала гелеобразования от температуры синтеза и соотношения мономеров в реакционной смеси

В ходе экспериментов было установлено оптимальное соотношение акриламида и акриловой кислоты в реакционной смеси: АА:АК = 30:70 и температуре 45 °С. Готовый продукт, полученный при этих условиях, проявляет все необходимые физико-механические свойства, требуемые для создания фиксирующей матрицы карбонизированных остатков, обнаруженных после пожаров.

Заключение

Получены акрилатные гидрогели для фиксации карбонизированных остатков. Выявлена зависимость времени начала гелеобразования от соотношения мономеров в реакционной смеси и температуры синтеза. Указан оптимальный состав смеси акриловая кислота-акриламид.

Литература

1. Энциклопедия полимеров. М., 1972. Т.1, С. 31.
2. Таггер А.А. Физико-химия полимеров, М.: Химия, 1968.
3. Тугов И.И., Корыстина Г.И. Физика и химия полимеров, М.: Химия, 1989.

ОСОБЕННОСТИ ПОВЕДЕНИЯ ТЕТРАЗОЛСОДЕРЖАЩИХ АКРИЛОВЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ СОЛЯНОЙ КИСЛОТЫ

Д.Н. Макин

Научный руководитель – к.т.н., доцент М.В. Успенская

Исследовано поведение тетразолсодержащих акриловых гидрогелей в растворе HCl при различных степенях нейтрализации мономеров. Проанализировано изменение равновесной степени набухания, скорости и константы набухания гидрогелей в зависимости от степени нейтрализации акриловой кислоты и 5-винилтетразола.

Введение

Акриловые гидрогели или, как еще их называют, супервлагоабсорбенты, представляют собой химически сшитые сополимеры на основе ионогенных мономеров. Они способны поглощать от нескольких грамм до более килограмма жидкости на один грамм геля в зависимости от внешних параметров, таких как pH, ионная сила раствора, температура и т.д. Благодаря абсорбирующему свойству гидрогели перспективно использовать в ресурсосберегающих, очищающих, медицинских технологиях, при этом во многих случаях при использовании гидрогели взаимодействуют с водными средами различной кислотности.

Поведение акрилатных гидрогелей в водных растворах с различными значениями pH, в частности в кислых средах, хорошо изучено. В частности, было показано [1], что на поведение акрилового гидрогеля оказывает заметное влияние связывание ионов водорода диссоциированными карбоксильными группами.

Полиэлектролитные или, иначе говоря, ионные (анионными или катионные) гидрогели чувствительны к изменению pH внешнего раствора. Будучи незаряженными, они находятся в сколлапсированном состоянии, ионизация же вызывает их набухание из-за электростатического отталкивания одноименно заряженных звеньев и “распирающего” осмотического давления противоионов. Гидрогели с кислотными группами набухают в щелочной среде и коллапсируют в кислой, где ионизация подавлена.

Для объяснения влияния pH среды на поведение гидрогелей используются различные подходы [2, 3].

Поведение гидрогелей на основе акриловой кислоты и 5-винилтетразола в нейтральных средах хорошо исследованы [4]. Целью данной работы было изучение кинетических процессов набухания сополимера на основе акриловой кислоты и 5-винилтетразола в водном растворе соляной кислоты с начальным значением pH = 3,98 с различной степенью нейтрализации мономеров в исходной мономерной смеси.

Методы исследования и расчета

Сополимеры синтезировали радикальной полимеризацией акриловой кислоты и 5-винилтетразола с N,N'-метилден-бис-акриламидом (МБАА) в качестве сшивающего агента в водной среде по методике, представленной в работе [5], в присутствии окислительно-восстановительной системы: персульфат аммония-тетраметилэтилен-диамин. Соотношение акриловой кислоты (АК) и 5-винилтетразола (ВТ) составляет АК : ВТ = 90:10 мас.%, концентрация сшивающего агента – МБАА составляла 0,1 мас.% на загрузку мономеров. Мономеры были нейтрализованы раствором гидроксида натрия $\alpha = 0-1$. Готовые образцы представляли собой эластичные прозрачные гели, которые отмывали в большом количестве дистиллированной воды от золь-фракции и высушивались при 40 °С до содержания влаги 20–30 %.

Степень набухания гидрогелей определялась по формуле

$$Q = \frac{m - m_0(1 - \gamma)}{m_0(1 - \gamma)}, \quad (1)$$

где Q – степень набухания гидрогеля, г/г, m_0 – исходная масса образца геля, г, m – масса набухшего образца, г, γ – влагосодержание образца геля, масс.доли.

Для определения степени набухания образцы гидрогеля массой $m_0 = 0,05-0,1$ г взвешивали на аналитических весах с точностью 0,0002 г и помещали в сосуд со средой набухания (водный раствор HCl) на заданное количество времени. Через одинаковые интервалы времени набухшие образцы отфильтровывали через тонкую пористую сетку (фильтр Шотта), переносили в химический стакан и взвешивали.

Определение pH растворов проводилось на pH-метре «Электрон-001». Эксперимент проводился при термостатировании в жидкостном термостате марки ТЖ-ТС-01 при температуре 24 °С.

Исходное влагосодержание геля определяли высушиванием навески аналогичного образца гидрогеля до постоянной массы при 90–100 °С:

$$\gamma = (m_0 - m_c) / m_0, \quad (2)$$

где m_c – масса высушенного до постоянной массы образца, г, m_0 – исходная масса образца, г.

По данным опытов по формуле (1) производили вычисление степени набухания геля в соответствующие периоды времени и определяли кинетические параметры набухания гидрогелей: константу и скорость набухания.

Для расчета константы и скорости набухания использовали графический метод. Строили график зависимости $\ln [Q - Q_m]$ от времени набухания t (мин) для расчета константы набухания в данном растворителе и по тангенсу угла наклона полученной прямой (коэффициенту k уравнения аппроксимации $y = kx + b$) определяли константу набухания. Аналогично определялась скорость процесса абсорбции воды по тангенсу угла наклона полученной прямой (коэффициенту k уравнения аппроксимации $y = kx + b$) при построении зависимости степени набухания Q_m (г/г) от времени набухания t (мин).

Результаты и их обсуждение

Кинетические кривые набухания для тетразолсодержащих акриловых гидрогелей в водном растворе соляной кислоты с начальным значением pH, равным 3,98, при различной степени нейтрализации мономеров представлены на рис. 1. Поскольку акриловая кислота и ВТ являются слабыми кислотами ($pK_a \cong 4.1$ для 5-винилтетразола и $pK_a = 4,2$ для акриловой кислоты), можно предположить одновременную нейтрализацию этих мономеров. Из рис. 1 видно, что равновесная степень набухания тетразолсодержащих акриловых гидрогелей достигается в среднем за 3–5 ч, за исключением гидрогелей, полученных без предварительной нейтрализации мономерной смеси. При этом максимальное значение степени набухания имеют гидрогели со степенью нейтрализации кислотных групп $\alpha = 0,8$. Резкое увеличение равновесной степени набухания с увеличением степени ионизации полимерных цепей закономерно и свойственно любым редкошитым полиэлектролитным гидрогелям, что обусловлено ионным вкладом в суммарное давление набухания [6]. Степень набухания зависит от 3-х факторов: осмотического давления мобильных противоионов внутри геля, смешивания полимера с растворителем, вытягивания молекул. Процесс вытягивания макромолекул описывается теорией эластичности, предполагающей, что полимерная сетка состоит из поперечно сшитых полимерных цепей, находящихся в свободной гауссовской конформации. Звенья полимерной сетки, одноименно заряженные, отталкиваются друг от друга, и потому цепи, исходно свернутые в клубки, сильно вытягиваются. В результате образец гидрогеля значительно увеличивается в размерах, т.е. набухает, поглощая растворитель.

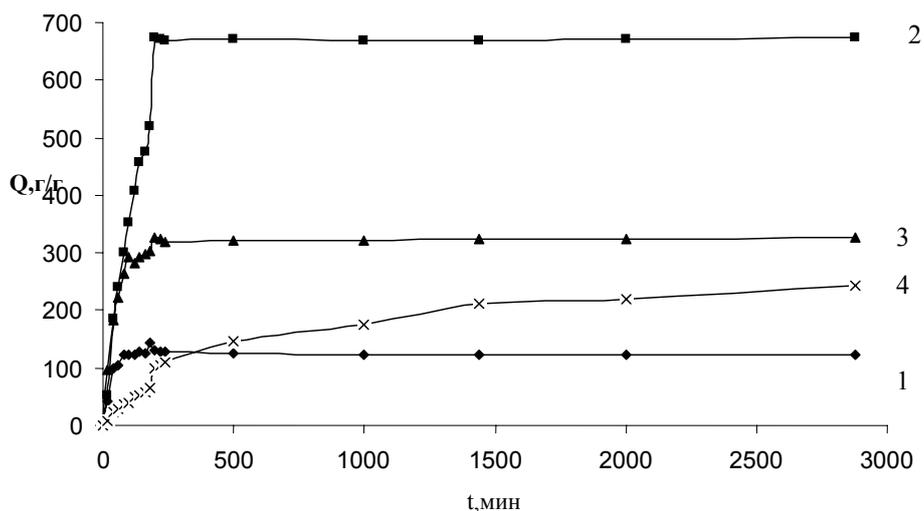


Рис. 1. Зависимость степени набухания Q (г/г) тетразолсодержащих акриловых гидрогелей от времени набухания t (мин) в водном растворе соляной кислоты при степени нейтрализации α : 1–1, 2 – 0.8, 3 – 0.5, 4 – 0

При дальнейшем увеличении степени нейтрализации мономеров равновесная степень набухания уменьшается, как видно из рис. 1. Это связано с увеличением размеров макромолекулы, вследствие чего происходит ослабление взаимодействий соседних зарядов в полимерной цепи, которое и определяет абсорбционные свойства сшитых сополимеров. Объяснение такому поведению супервлагоабсорбентов при набухании дает теория полиэлектролитных сеток, принимающая во внимание отталкивание ионизированных карбоксильных групп и их ограниченную растяжимость.

На рис. 2 приведены кинетические кривые набухания тетразолсодержащих гидрогелей на начальном этапе.

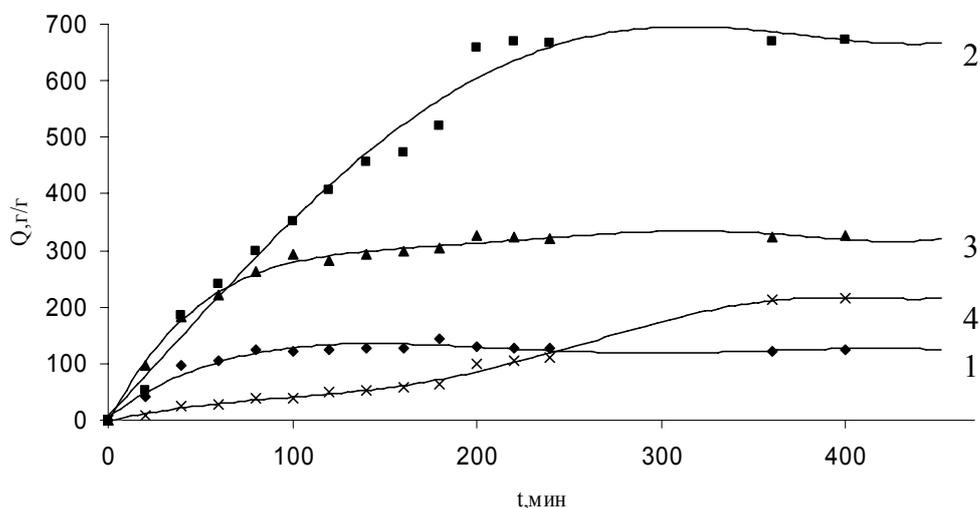


Рис. 2. Зависимость степени набухания Q (г/г) тетразолсодержащих акриловых гидрогелей от времени набухания t (мин) в начальный период процесса в водном растворе соляной кислоты при степени нейтрализации α : 1–1, 2 – 0.8, 3 – 0.5, 4 – 0

Как видно из рис. 2 и табл. 1, максимальной скоростью и константой набухания на начальном этапе обладают тетразолсодержащие акриловые гидрогели, имеющие степень нейтрализации кислотных групп $\alpha = 0,8$, а минимальной скоростью набухания – сшитые сополимеры со степенью нейтрализации $\alpha = 0$.

α	Константа набухания, мин ⁻¹	Скорость набухания на начальном участке (г/ч)
1	0,0326	1,22
0,8	0,090	3,65
0,5	0,0197	2,86
0	0,0023	0,41

Таблица 1. Значения скорости и константы набухания в зависимости от степени нейтрализации

Из данных табл. 1 также видно, что скорость набухания тетразолсодержащих гидрогелей в водных растворах соляной кислоты с начальным значением рН, равным 3,98, невелика по сравнению со скоростями набухания аналогичных материалов в менее кислых растворах.

Заключение

Изучение поведения сополимеров на основе акриловой кислоты и 5-винилтетразола в водном растворе соляной кислоты показало, что степень набухания геля зависит от степени нейтрализации кислотных групп. Установлено, что максимальным значением равновесной степени набухания обладают тетразолсодержащие акриловые гидрогели со степенью нейтрализации $\alpha = 0.8$. Вычислены кинетические параметры процесса набухания гидрогелей при различных степенях нейтрализации мономеров.

Литература

1. Zlatanic A., Petrovic Z. Effect of crosslinking on swelling, transitions and mechanical properties of poly(N-isopropylacrylamide) responsive hydrogels. // Kansas Polymer Research Center, Plastics-the Ione star: conference proceeding – ANTEC 2001, Band 59. V. 3. P. 3319–3323.
2. Spila G. and Bertorello H. Synthesis and characterization of new poly (butadiene (g) acrylamide (g) acrylic acid). // Polymer Eng. and Sci. 1996. V.36. №8. P. 1097–1102.
3. Кижняев В.Н., Горковенко О.П., Сафронов А.П., Адамова Л.В. Термодинамика взаимодействия тетразолсодержащих полиэлектролитов с водой. // Высокомолек. соед. 1997. Т.39А. № 3. С. 527–532.
4. Кабакова М.М., Успенская М.В., Сиротинкин Н.В., Санатин Н.Е.// Поведение сшитых сополимеров акриловой кислоты и 5-винилтетразола в водных средах // ЖПХ. 2003. Т.76. №7. С. 1210–1212.
5. Игрунова А.В., Сиротинкин Н.В., Успенская М.В. Синтез и абсорбционная способность новых полиэлектролитных тетразолсодержащих акриловых гидрогелей. // Журн. прикл. химии. 2001. Т.74. № 5. С. 793–797.
6. Будтова Т.В., Сулейменов И.Е., Френкель С.Я. Сильнонабухающие полимерные гидрогели – некоторые современные проблемы и перспективы (обзор) // Журн. прикл. химии. 1997. Т.70. № 4. С. 529–539.

СТРУКТУРНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ И ДЕФОРМАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ СМЕСЕЙ ОСОБОГО КЛАССА МЕЗОМОРФНЫХ СОЕДИНЕНИЙ – *ODIS**-КРИСТАЛЛОВ

Е.Г. Беленова, И.В. Разумовская, Е.В. Матухина, О.И. Щеголихина*,
В.Г. Васильев*

(Московский педагогический государственный университет,
*Институт элементоорганических соединений РАН)

Научный руководитель – д.х.н., к.ф.-м.н., профессор И.В. Разумовская
(Московский педагогический государственный университет)

Впервые исследовано термотропное фазовое поведение трех индивидуальных органоциклотетрасилоксанов (ЦТС), формирующих пластические кристаллы (ПК), и двух типов их бинарных смесей с различной концентрацией компонентов. Изучены их реологические характеристики в диапазоне существования мезофазы. В результате капиллярного течения с последующим охлаждением (экструзии) получены монокристаллы и ориентированные мезоморфные и кристаллические структуры. Определены условия, необходимые для формирования монокристаллов и ориентированных структур. Предложены механизмы течения ПК.

Введение

Мезоморфное состояние (от греч. «мезос» – промежуточное) представляет собой состояние с промежуточным, по степени упорядочения молекул, уровнем структурной организации между жидким и кристаллическим. При определенных условиях ряд соединений, называемых мезоморфными, способен переходить в это термодинамически стабильное состояние, т.е. образовывать мезофазу.

*Odис**-кристаллы (сокр. от англ. orientationally-disordered crystals [1, 2]) или пластические кристаллы – особый класс мезоморфных соединений. *Odис*-мезофаза характеризуется наличием дальнего 3D-порядка в расположении центров тяжести молекул, которые сами ориентационно и конформационно разупорядочены. В сравнении с жидкокристаллическими системами *odис*-кристаллы намного менее изучены, хотя сам факт их существования установлен достаточно давно [3, 4]. Наиболее полный обзор исследований ПК с 20-х по 80-е г.г. представлен в работе [1].

Физические свойства *odис*-фазы частично близки к свойствам жидкостей, а частично – к свойствам твердых тел. Это определяет важность их изучения для развития фундаментальных основ физики конденсированного состояния. Деформационное поведение ПК мало изучено [1], отсутствуют данные об их реологических свойствах. В то же время установление деформационных механизмов, реализующихся в ПК, – важная задача, решение которой позволит использовать ПК в качестве модельных соединений при изучении и описании многих процессов в твердых телах, а также отдельных явлений в жидкостях.

Постановка задачи

Для выявления механизмов течения ПК требуется проведение ряда комплексных исследований, позволяющих установить взаимосвязь параметров течения и структурно-морфологических изменений в веществе. Поэтому цель данной работы – определение возможности формирования упорядоченных структур пластическими кристаллами в процессе течения в мезофазе, определение закономерностей течения, а также установление механизмов структурно-морфологических изменений, протекающих после экструзии в этих структурах.

Объектами исследования были 3 индивидуальных соединения и две бинарные смеси мезоморфных *цис*-тетрафенилтриорганилсилоксициклотетрасилоксанов (ЦТС) общей

формулы $\text{cis-}[\text{PhSi}(\text{O})(\text{OSi}(\text{Me}_2)(R))_4]$, где $R = \text{Me}$ (ЦТСI), $\text{CH}=\text{CH}_2$ (ЦТСII), и ОФЦТС $[\text{PhSi}(\text{O})(\text{Ph})_4]$ (см. рис. 1). ОФЦТС, ЦТСI и ЦТСII синтезированы О.И. Щеголихиной (ИНЭОС РАН), причем второй и третий впервые. Чистота, по данным ЯМР, 99,9 %.

Все индивидуальные соединения образуют пластическо-кристаллическую мезофазу. Ранее нами исследованы их структурные характеристики и изучен процесс пластического течения (см. рис. 1) [5, 6]. Особенностью ЦТС является одинаковый тип молекулярной упаковки в 3D-мезофазе – объемноцентрированная кубическая (ОЦК) ячейка, сформированная центрами тяжести конформационно и ориентационно разупорядоченных молекул.

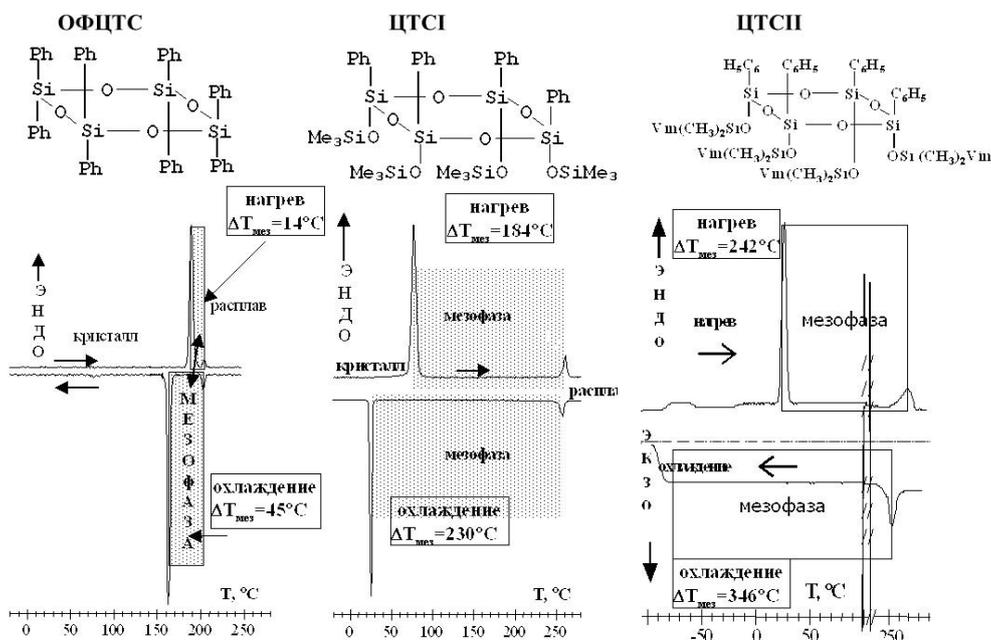


Рис. 1. Объекты исследования. Влияние боковых групп на температурный диапазон существования мезофазы ($\Delta T_{\text{мез}}$)

В результате экструзии с охлаждением до комнатной температуры нами были получены монокристаллы ОФЦТС двух кристаллических модификаций и ориентированные поликристаллические экструдаты ОФЦТС и ЦТСI, и мезоморфные структуры ЦТСII. Было показано, что этот новый способ выращивания монокристаллов позволяет получать монокристаллы и ориентированные структуры различной геометрической формы и целенаправленно формировать кристаллическую структуру, фазовый состав и морфологию экструдатов [6].

Привлечение в качестве объектов исследования бинарных смесей ПК даст возможность решить ряд важных задач, необходимых для достижения цели работы. Во-первых, исследования двухкомпонентных систем ПК позволят установить возможность образования молекулярными ПК твердых растворов в кристаллической и *odis*-фазах. Во-вторых, это расширит круг систем, образующих высокотемпературную мезофазу ПК-типа. И, в-третьих, как мы ожидаем, смешение ПК позволит расширить температурный диапазон существования *odis*-мезофазы, что значительно облегчит установление механизмов структурно-морфологических изменений, протекающих после экструзии, в частности, процессов кристаллизации.

Была поставлена задача: исследовать фазовое поведение различных типов двухкомпонентных систем различных концентраций, изучить их реологическое поведение во всем температурном диапазоне существования мезофазы, а также исследовать структурно-морфологические характеристики экструдатов и эволюцию этих характеристик со временем и под влиянием термомеханических воздействий.

Методы исследований

Структурные исследования проводились на дифрактометрах Дрон 3М, (Cu K α , высокотемпературная камера, кварцевый монохроматор, съемка на прохождение) и Ирис 3.0 (Cu, съемка на прохождение). Реологические свойства систем изучались в режиме постоянного напряжения сдвига на капиллярном микровискозиметре постоянного давления МВ-2 с различными капиллярами и с различными схемами нагружения. Калориметрические измерения выполнены на приборе ДСК Mettler Toledo 822E. Микроскопические исследования проведены на поляризационных микроскопах ЛОМО ПОЛАМ-213М, МИН-8 с нагревательным столиком и МБИ-16.

Результаты и их обсуждение

При изучении индивидуальных соединений ранее нами было показано, что замена боковых заместителей, (то есть переход от ОФЦТС к ЦТСI и ЦТСII, рис. 1) приводит к существенному расширению температурного диапазона существования мезофазы, как при нагревании, так и при охлаждении. Кроме этого, увеличение объема молекул за счет изменения боковых заместителей приводит к увеличению параметра a ОЦК ячейки. Следовательно, есть все основания предполагать, что все ЦТС изоморфны в мезофазе. Для проверки этого предположения были проведены комплексные исследования термотропного поведения их смесей.

Нами исследованы двухкомпонентные системы двух типов. Первый тип, представляет собой смесь ОФЦТС и ЦТСI, компоненты которой имеют различную кристаллическую структуру и архитектуру молекул, но, предположительно, изоморфны в мезофазе. Компоненты бинарной системы второго типа, ЦТСI–ЦТСII, предположительно изоморфны и в кристаллической фазе и в мезофазе, то есть при смешении должны образовывать непрерывный твердый раствор во всем диапазоне концентраций. Оба типа смесей с различными концентрациями компонентов были получены и осаждением из раствора, и смешением в изотропном состоянии.

Термотропное поведение двухкомпонентной системы ОФЦТС-ЦТСI. Порошковые дифрактограммы смесей при комнатной температуре (здесь не приводятся) демонстрируют различия кристаллических структур ОФЦТС и ЦТСI.

На основании данных ДСК, были построены (см. рис. 2) схематичные диаграммы фазовых состояний смеси ОФЦТС-ЦТСI при нагревании и при охлаждении. Диаграммы состояний были подтверждены методами РСА и оптической поляризационной микроскопии.

Как видно из рис. 2, область существования мезофазы зависит от концентрации и при охлаждении значительно расширяется. Термограммы нагревания и охлаждения смесей различных концентраций показывают наличие изменений температурной области существования мезофазы по сравнению с индивидуальными соединениями. При этом для всех кривых характерно наличие общего пика изотропизации. Различие температур перехода кристалл→мезофаза и мезофаза→кристалл для отдельных компонентов смеси связано с неизоморфностью соединений в кристаллической фазе.

Рассмотрим фазовое поведение (см. рис. 3) на примере эквимольной смеси ОФЦТС-ЦТСI. По данным РСА, при комнатной температуре система представляет собой смесь кристаллических фаз компонентов, затем при нагревании происходит переход в мезофазу ЦТСI, а ОФЦТС остается в кристаллическом состоянии. Выше $T=172$ °С ОФЦТС также переходит в мезофазу, и образуется совместная мезофаза. При охлаждении система претерпевает обратные изменения с понижением температур переходов.

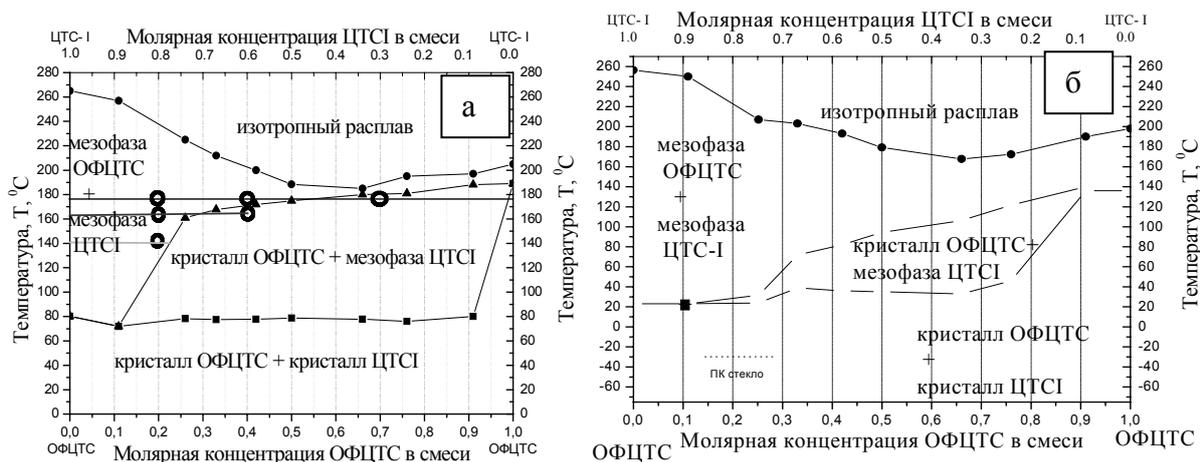


Рис. 2. Диаграмма фазовых состояний смеси ОФЦТС-ЦТСІ, построенная на основании данных ДСК и РСА: а – при нагревании, б – при охлаждении (○– отмечены состояния смеси, выбранные для реологических исследований)

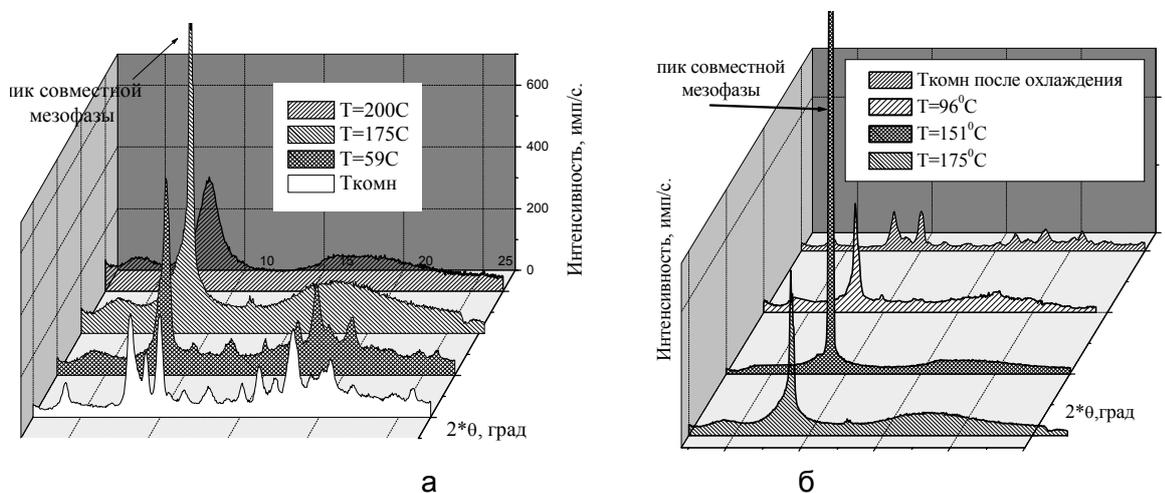


Рис. 3. Дифрактограммы эквимольной смеси ОФЦТС-ЦТСІ при различных температурах: а – при нагревании, б – при охлаждении

Фазовые переходы, происходящие в системах при нагревании и охлаждении, также были исследованы методом оптической поляризационной микроскопии.

На рис. 4, а представлена температурная эволюция параметра a ОЦК ячейки мезоморфной компоненты эквимольной смеси и индивидуальных соединений. Различия в термической стабильности кристаллических фаз компонентов приводят к сложной зависимости a (Т) (рис. 4, а). При нагревании смеси в области ниже 175 °С вначале переходит в мезофазу ЦТСІ. Поэтому a близок к a чистого ЦТСІ (участок АВ), происходит образование мезофазы ЦТСІ, сосуществующей с кристаллом ОФЦТС. По мере плавления более высокоплавкого ОФЦТС a плавно снижается, при приближении к температуре плавления ОФЦТС наблюдается его резкое уменьшение. По мере растворения ОФЦТС в ЦТСІ температурная зависимость параметра a ОЦК ячейки незначительно приближается к аналогичной зависимости a (Т) для ОФЦТС. В области 175–195 °С образуется совместная мезофаза (участок ВС), параметр a которой изменяется с температурой скачкообразно и принимает значения, промежуточные для отдельных компонентов. При охлаждении (CD) область существования совместной мезофазы расширяется, a закономерно уменьшается с уменьшением температуры. Дальнейшее охлаждение смеси (DA) приводит к фазовому разделению на мезофазу ЦТС I и кристалл ОФЦТС.

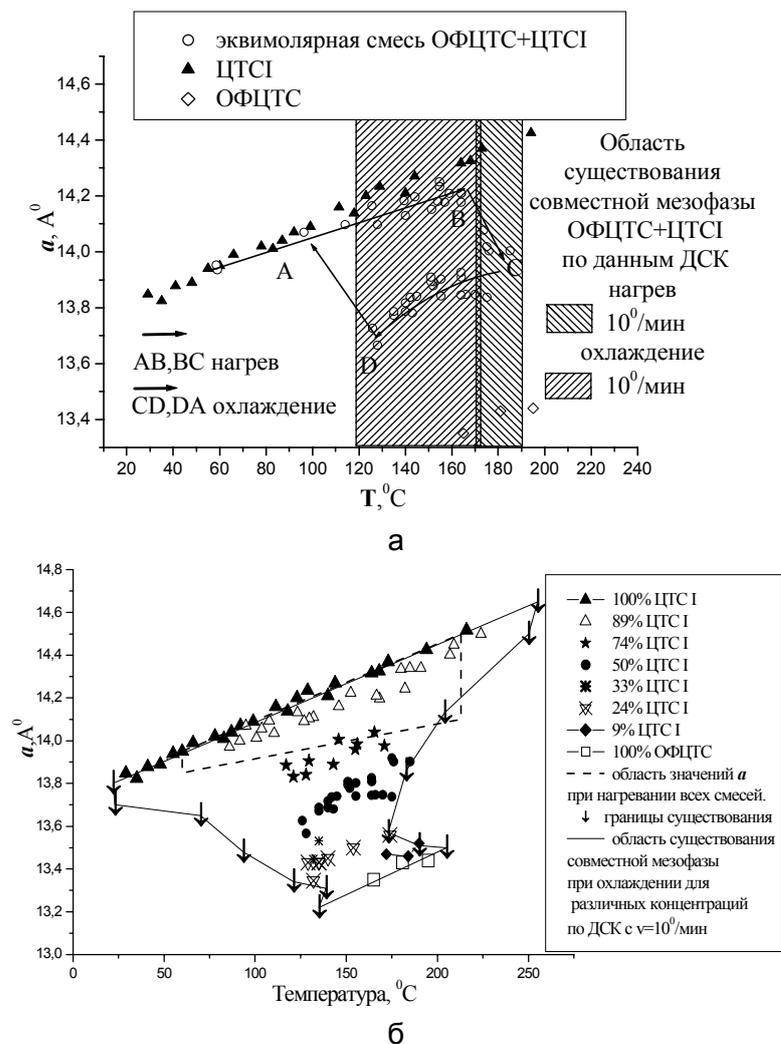


Рис. 4. а – структурные характеристики мезоморфной компоненты эквимолярной смеси; б – температурная зависимость параметра a ОЦК ячейки для различных концентраций смеси ОФЦТС-ЦТС I

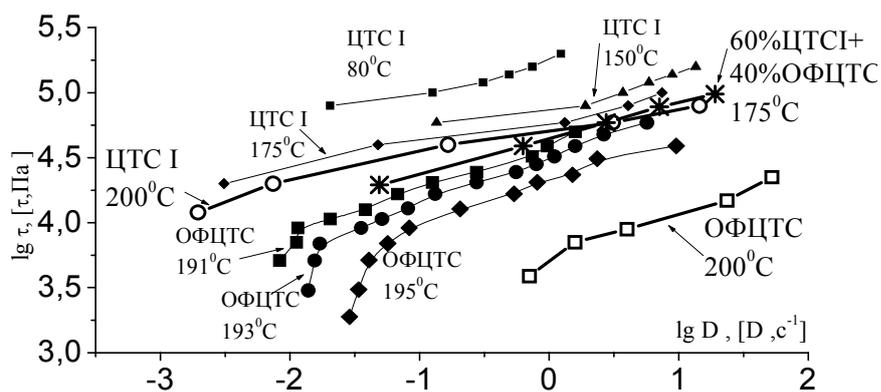
Сравнение параметра a для различных составов (см. рис. 4, б), показывает, что для всех концентраций при нагревании смесей до температуры образования совместной мезофазы изменения a ЦТСІ, связанные с частичной растворимостью в нем ОФЦТС, лежат в ограниченной области, обозначенной пунктиром. Параметр a ячейки совместной мезофазы при охлаждении принимает промежуточные значения относительно значений a для отдельных компонентов и меняется пропорционально изменению концентрационного состава.

Таким образом, наше предположение подтвердилось: компоненты смесей ОФЦТС-ЦТСІ не могут образовать совместный кристалл, но изоморфны в мезофазе.

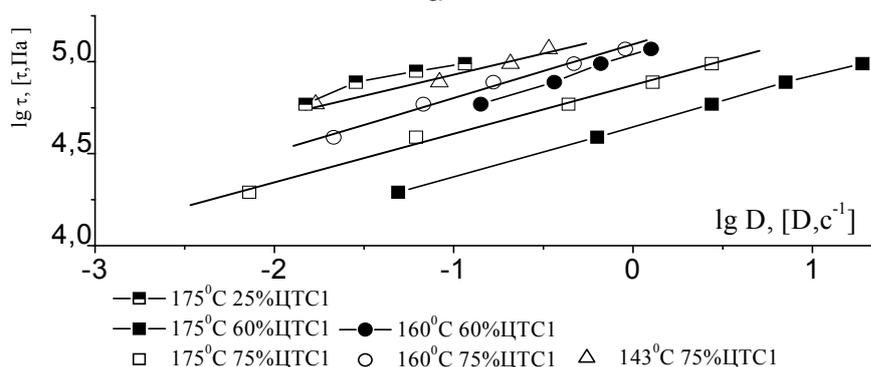
Аддитивность изменений параметра ячейки от количественного состава смеси позволяет ожидать аддитивных изменений реологических характеристик смеси в зависимости от состава.

На основании полученных данных были выбраны температуры для исследования влияния концентрационного состава смесей на их реологические свойства (отмечены кружками на рис. 2, а).

Реологические свойства смеси ОФЦТС-ЦТСІ. Кривые течения, представляющие собой зависимость скорости деформации, D , [с^{-1}] от величины постоянного приложенного напряжения сдвига, τ , [Па], в логарифмических координатах, были получены во всем диапазоне существования мезофазы смеси ОФЦТС-ЦТСІ (см. рис. 5, а).



а



б

Рис. 5. Кривые течения, полученные в области существования мезофазы смеси ОФЦТС-ЦТС I: (а) для индивидуальных соединений ОФЦТС и ЦТС I и их смеси; (б) для смесей ОФЦТС-ЦТС I с различными концентрациями компонентов при различных температурах экструзии ($T_{экстр}$)

Для ОФЦТС, ЦТС I и их смесей характерны общие особенности реологических свойств, а именно: аномально вязкое течение, возникающее после того, как касательное напряжение превысило некоторое критическое значение, τ^* – эффективный предел текучести, а также чувствительно к последовательности нагружения.

Температурный диапазон существования мезофазы ОФЦТС значительно уже, чем у ЦТС I. При этом ОФЦТС характеризуется большей температурной чувствительностью реологических характеристик. Однако наличие перекрытия температурных диапазонов существования мезофазы позволяет сравнить их вязкостные характеристики. Так, при 200 °С ОФЦТС свойственно, по сравнению с ЦТС I, течение при меньших напряжениях сдвига с более высокими скоростями деформации.

На рис. 5, а приведена кривая течения смеси состава 60 %ЦТС I-40 %ОФЦТС, полученная при 175 °С. При данной температуре ОФЦТС находится в кристаллическом состоянии и не течет. Как можно видеть, добавление ЦТС I до 60 % приводит к тому, что смесь находится в мезоморфном состоянии, и кривая течения смеси смещена по сравнению с кривой течения ЦТС I при 175 °С в область меньших вязкостей, свойственных ОФЦТС.

Сравнительный анализ кривых течения смесей различных концентраций (см. рис. 5, б) подтверждает предположение о наличии корреляций между количественным составом и реологическим поведением для смесей данных соединений. При наличии в системе кристаллической фазы система обладает большей вязкостью. Так, например, для смеси состава 25 %ЦТС I-75% ОФЦТС при 175 °С вязкость смеси превышает вязкость ЦТС I при 175 °С (см. рис. 5, б). Для систем с большими размерами кристаллитов течение может происходить с уменьшением скоростей деформации при увеличении на-

пряжений сдвига, что характерно для течения дисперсных систем при коалесценции частиц. Таким образом, для двухкомпонентной системы ОФЦТС-ЦТСІ, образующей совместную мезофазу, характерно существование зависимости эффективной вязкости смесей от концентрационного и фазового состава.

В ходе реологических исследований получены поликристаллические ориентированные двухкомпонентные структуры смесей ОФЦТС-ЦТСІ (см. рис. 6). Размер кристаллитов и степень их ориентации в экструдатах изменяются при изменении условий экструзии таким же образом, как и для индивидуальных соединений. С ростом τ размер кристаллитов и степень их ориентации уменьшаются. В ряде случаев ось преимущественной ориентировки кристаллитов ЦТСІ совпадает с осью преимущественной ориентировки экструдатов состава 100 %ЦТСІ. При наличии в системе кристаллической фазы ОФЦТС, как и большого содержания ОФЦТС, высокая дефектность кристаллитов приводит к потере ориентировки. Для экструдатов с большим содержанием ОФЦТС высокая дефектность объясняется необходимостью агрегирования молекул компонентов непосредственно перед фазовым разделением в процессе кристаллизации экструдатов. Вытеснение ОФЦТС вблизи нижней температурной границы области совместной мезофазы при охлаждении наблюдалось при исследовании методом ОПМ.

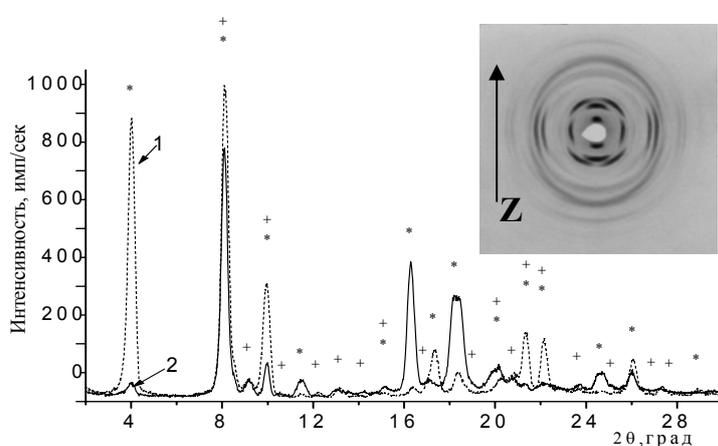


Рис. 6. Фоторентгенограмма и меридианальная (1) и экваториальная (2) дифрактограммы ориентированного кристаллического экструдата состава 26 %ОФЦТС-74 %ЦТСІ, полученного при $T_{\text{экстр}}=175\text{ }^{\circ}\text{C}$, (Z – ось экструдата): * отмечены рефлексy ЦТСІ; + отмечены рефлексy ОФЦТС)

Термотропное поведение двухкомпонентной системы ЦТСІ-ЦТСІІ. Дифрактограммы индивидуальных ЦТСІ и ЦТСІІ соединений и их смесей различных концентраций в кристаллическом состоянии идентичны в пределах экспериментальной погрешности, что позволяет предполагать близость молекулярной упаковки. Кристаллическая структура соединений на данный момент не установлена.

Диаграмма фазовых состояний смеси (рис. 7), построенная на основании ДСК, иллюстрирует, что данные вещества изоморфны во всем диапазоне температур и концентраций, т.е. образуют непрерывный твердый раствор.

Реологические свойства смесей ЦТСІ-ЦТСІІ. Ориентированные двухкомпонентные структуры смеси ЦТСІ-ЦТСІІ

На рис. 8 приведены реологические кривые соединений ЦТСІ-ЦТСІІ и их смесей различных концентраций. Кривые течения этих соединений близки, за исключением разных пределов текучести, и не чувствительны к концентрации компонентов. Лауэ-граммы ориентированных структур этих соединений и их смесей, полученных в ре-

зультате экструзии при одинаковых условиях течения, идентичны как в случае мезоморфных, так и в случае кристаллических структур.

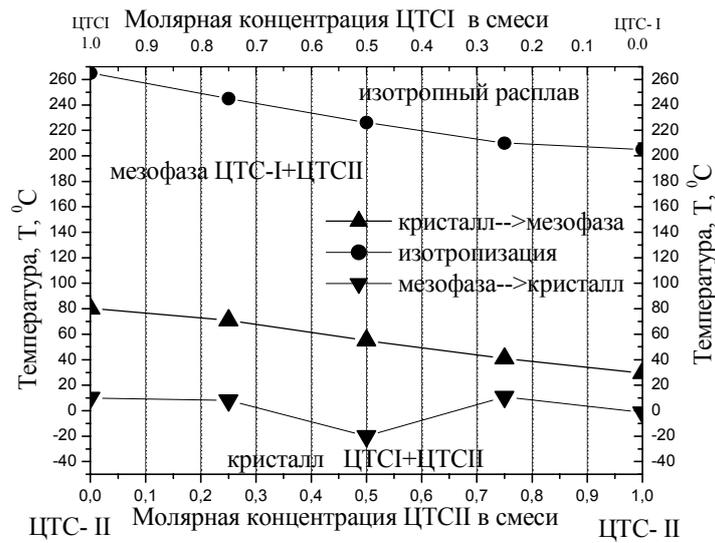


Рис. 7. Диаграмма фазовых состояний. Термотропное поведение смесей ЦТС-I–ЦТС-II с различной концентрацией компонентов

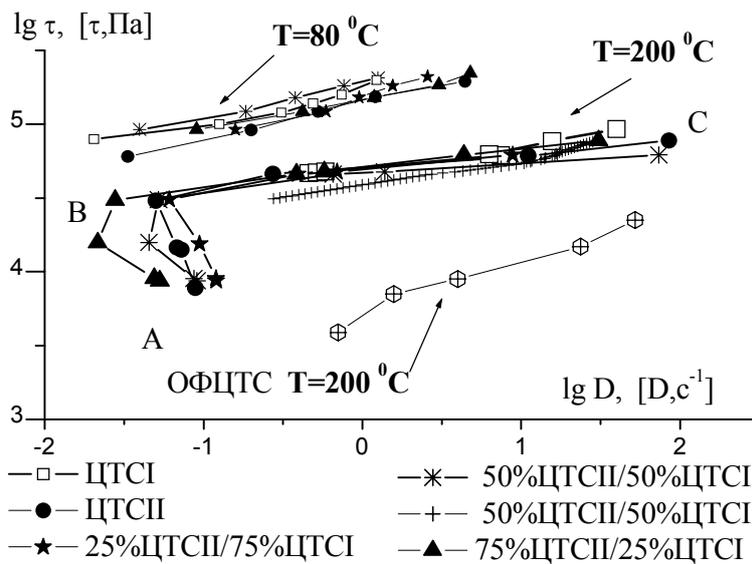


Рис. 8. Кривые течения ЦТС-I, ЦТС-II и их смесей, полученные в режиме постоянного напряжения сдвига. Длина капилляра 10 мм, диаметр 0,67 мм

Как видно из рис. 8, ОФЦТС, по сравнению с ЦТС-I и ЦТС-II, менее вязок. При этом ОФЦТС характеризуется меньшим объемом молекул и, соответственно меньшим параметром ОЦК-ячейки. Изоморфные ЦТС-I и ЦТС-II и их смеси близки и по реологическому поведению и по молекулярной упаковке в мезофазе. Таким образом, налицо корреляции структурных и реологических свойств.

Уникальной особенностью бинарных смесей ЦТС-I и ЦТС-II является резкая аномалия вязкости (участок кривых АВ на рис. 8), заключающаяся в уменьшении D при увеличении τ в области малых напряжений, которая сменяется ростом D с увеличением τ в области больших напряжений (участок кривых ВС). Кроме того, на этих двух участках (АВ и ВС) можно наблюдать различную временную характеристику изменения D . Данная аномалия не зависит от концентрации смеси и исчезает при нагружении с большего начального напряжения, τ_0 , (кривая F, рис. 9), что сопровождается ростом D при тех же τ . Все эти эффекты сопровождаются морфологическими изменениями в экс-

трудоатах. Начало эксперимента с более высоких τ_0 (F) приводит к тому, что D в начальной точке кривой выше, чем соответственно в первом опыте, отсутствует участок АВ на кривой течений и размер кристаллитов с ростом τ уменьшается.

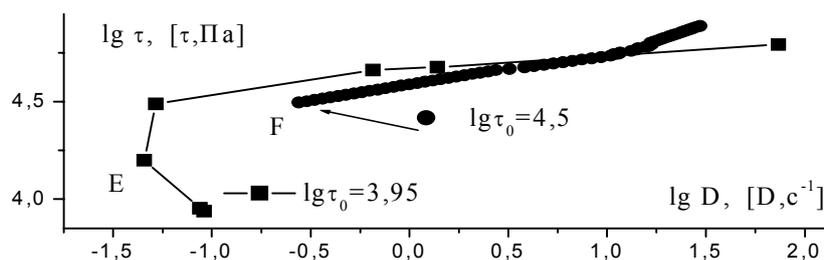


Рис. 9. Кривые течения эквимольной смеси ЦТСI–ЦТСII, полученные в режиме последовательного увеличения напряжения сдвига, с различными начальными напряжениями

Морфологические исследования экструдатов, полученных при малых τ_0 , показывают, что с ростом D (AB) происходит сначала постепенное увеличение размеров кристаллитов (в мезофазе – мезоморфных доменов), а затем их последовательное уменьшение. Характерное на участке АВ замедление D сопровождается увеличением размеров мезоморфных доменов и, следовательно, кристаллитов. Данная аномалия вязкости также обнаруживается и во влиянии на ориентировку кристаллитов в экструдате. При нагружении с малых τ_0 постепенно формируется ориентированная структура, при напряжениях, больших $\tau > \tau_{пер}$ (в точке В), ориентированная структура постепенно разрушается.

Таким образом, смеси ПК могут образовывать только совместную мезофазу и формировать непрерывный твердый раствор во всем диапазоне температур и концентраций. Причем тип смеси определяет тип реологического поведения. Так, например, реологические свойства предыдущей смеси зависят как от концентрации, так и от фазового состава, а для второй смеси подобная зависимость не обнаружена.

Влияние термомеханических воздействий на эволюцию структурно-морфологических изменений в экстудатах

С ростом концентрации ЦТСII в смеси ЦТСI–ЦТСII снижаются температура и скорость кристаллизации полученных в результате течения мезоморфных ориентированных структур. Это позволяет наблюдать происходящие в них со временем структурно-морфологические изменения.

На окончательную структуру экструдатов влияют как параметры капиллярного течения, так и условия кристаллизации. При этом оказалось, что влиять на скорость кристаллизации можно не только дополнительными внешними воздействиями (быстрое охлаждение, деформация мезоморфных экструдатов и т.д.), но и изменяя параметры течения. Варьирование этих факторов может приводить и к увеличению, и к уменьшению размеров кристаллитов в экструдате по сравнению с размерами мезоморфных доменов, из которых они образованы.

Так, снижение температуры экструзии приводит к образованию и росту монокристалла из ориентированной мезофазы (см рис. 10), что не наблюдается при течении при более высоких $T_{экстр}$. Эта структурно-морфологическая эволюция протекает быстрее в экструдатах, полученных при более высоких τ . Она завершается формированием монокристаллов, размер которых на порядок превышает размеры доменов, из которых он образован, и сравним с диаметром капилляра.

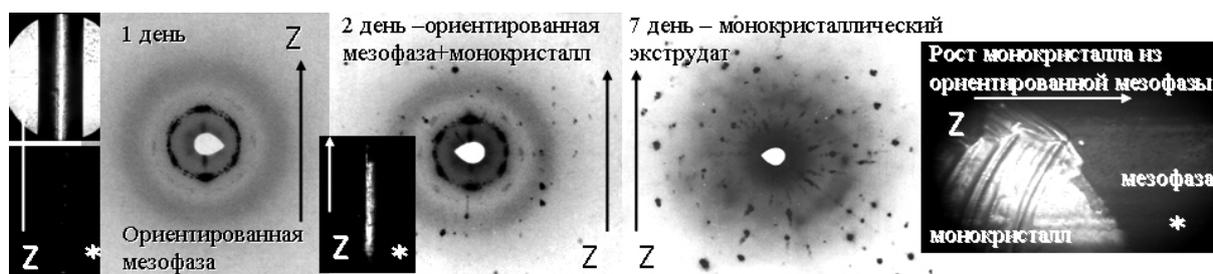


Рис. 10. Структурно-морфологическая эволюции экструдатов ЦТСII, полученных при температуре экструзии 80 °С; $Lg\tau = 4,79$, диаметре капилляра 0,67 мм.
 Z – ось экструдата, * – фотографии в скрещенных поляридах

В экструдатах, полученных в результате течения при более высоких температурах или же при больших τ , размер мезоморфных доменов меньше. При этом большие скорости деформации ускоряют охлаждение экструдатов и их кристаллизацию. Если дополнительно ускорить кристаллизацию мезоморфных экструдатов резким снижением температуры или деформированием экструдатов, то размер кристаллитов становится значительно меньше размеров мезоморфных доменов.

Обратного эффекта можно достичь, замедляя кристаллизацию снижением градиента температур на выходе капилляра или скорости охлаждения экструдатов.

Влияя на кристаллизацию, также можно изменять и ориентировку кристаллитов. При ориентированной кристаллизации в однородном поле градиента температур на выходе капилляра ось преимущественной ориентировки кристаллитов, как и мезоморфных доменов, параллельна оси экструдатов. Деформирование мезоморфного экструдата приводит к изменению оси преимущественной ориентировки кристаллитов.

В результате течения с последующим охлаждением получены монокристаллы всех соединений и даже смешанный монокристалл состава 25 %ЦТСI-75 %ЦТСII. Также получены ориентированные кристаллические структуры всех смесей и индивидуальных соединений, а также ориентированные мезоморфные структуры ЦТСII и смесей ЦТСI-ЦТСII с различными размерами кристаллитов и мезоморфных доменов и различной степенью их ориентировки в экструдате. Установлен характер влияния параметров экструзии и термическо-деформационной предыстории на структурно-морфологические характеристики экструдатов: фазовый состав, размер и ориентировку зерен кристалла или мезофазы в экструдате и на способность экструдатов к изменениям своих структурно-морфологических характеристик.

Механизмы течения ПК ЦТС

Для бинарных систем и индивидуальных соединений ПК характерно наличие общих закономерностей реологического поведения, проявляющихся в различной мере и коррелирующих со структурными характеристиками. А именно: наличие зависящего от температуры и τ_0 предела текучести, аномально-вязкий характер течения, чувствительный к термическо-деформационной предыстории, снижение на порядок скорости деформации при нагружении после разгрузки, сопровождающееся ростом мезоморфных доменов, а также аномалия вязкости, выражающаяся в виде двух участков на кривых течения.

Анализ влияния условий экструзии и кристаллизации на структурно-морфологические характеристики экструдатов позволяет предположить наличие двух конкурирующих механизмов течения пластических кристаллов (см. табл. 1). Для подтверждения этой гипотезы мы смоделировали процессы, сопровождающие течение и деформацию мезоморфных доменов ПК, на течении мыльной пены – гетерогенной дисперсной системы с размером пузырьков $\sim 1-20$ мкм.

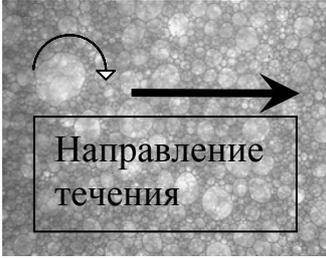
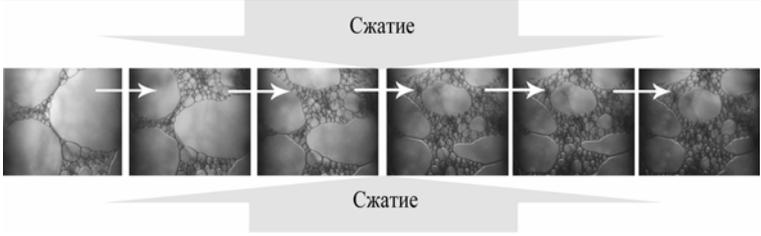
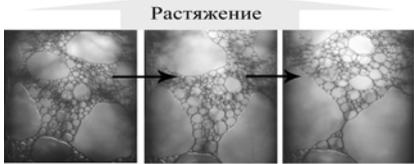
Механизмы течения ПК ЦТС	
Сепарация мелких доменов в процессе течения, $\tau < \tau_{пер}$	Деформация, дробление ориентирование доменов. $\tau > \tau_{пер}$
(мелкие пузыри при течении обгоняют большие)	(диспергирование, приводящее к изменению распределения пузырьков по размерам при сжатии в цилиндрической камере)
	
Механизм образования монодоменов при разгрузении при $T = const$ и охлаждении при $\tau = const$ (объединение пузырей при растяжении)	
	

Таблица 1. Моделирование процессов, сопровождающих течение и деформацию мезоморфных доменов

Заключение

Смеси ЦТС могут образовывать совместную мезофазу или непрерывный твердый раствор. Тип смеси определяет особенности ее реологического поведения.

Все ЦТС и их смеси имеют общие тенденции в реологическом поведении, коррелирующие с изменениями структурно-морфологических характеристик. Корреляции структурных и реологических характеристик экструдатов позволяют предположить наличие двух конкурирующих механизмов течения. Доминирование какого-либо из них определяется параметрами течения (термическо-деформационной предысторией).

Варьируя условия капиллярного течения и условия кристаллизации, можно целенаправленно влиять на морфологию экструдатов: размер кристаллитов и мезоморфных доменов, степень их ориентации в экструдате, фазовый состав экструдатов, кристаллическую модификацию монокристаллов (в случае ОФЦТС).

Исследование реологических и структурных характеристик смесей ПК позволило проанализировать влияние условий экструзии и условий кристаллизации на эволюцию структурных характеристик экструдатов. Подтверждены наши предположения о механизмах формирования монокристаллов и упорядоченных структур новым способом – экструзией в мезоморфном состоянии, что является предметом дальнейших публикаций.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 07-03-00970)

Литература

1. Sherwood N. The Plastically Crystalline State. (Orientationally-disordered Crystals) (Wiley NewYork, London), 1979. P. 1–282.

2. Wunderlich B., Grebowicz J. Thermotropic Mesophases and Mesophase Transitions of Linear, Flexible Macromolecules. *Advances in Polymer Science* 60, 61 Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1984. P. 1–59
3. Томилин М.Г., Пестов С.М., Свойства жидкокристаллических материалов СПб.; Политехника, 2005, 296 стр. с ил.
4. Oswald Pieranski. PNematic and cholesteric liquid crystals, Taylor&Fransis group, London, New York, Singapore, 2005.
5. E.V. Matukhina et. al. // *Liquid Crystals*. 2001. V. 28. 869.
6. Васильев В.Г., Беленова Е.Г. и др. // *Доклады Академии Наук*, 2003, № 11, С. 205–208.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ РАЗМЕРА АПЕРТУРЫ БЛИЖНЕПОЛЬНЫХ ОПТИЧЕСКИХ ЗОНДОВ ПО РАСПРЕДЕЛЕНИЮ СВЕТОВОГО ПОЛЯ В ДАЛЬНОЙ ЗОНЕ

Зыонг Ван Зунг, Ле Зуй Туан, Н.В. Варкентина
Научный руководитель – д.т.н., профессор Е.Б. Яковлев

Описан метод лазерной вытяжки ближнепольных оптических зондов (БОЗ) из оптоволокна. Разработана методика регистрации излучения зонда в дальнем поле с расширенным диапазоном регистрируемой освещенности. Распределение освещенности в дальней зоне сопоставлено с качеством зондов.

Введение

Сканирующий ближнепольный оптический микроскоп (СБОМ), относящийся к семейству зондовых микроскопов, работает на основе сканирования образца источником оптического излучения с размерами меньшими длины волны света. Этим источником является зонд – заостренное оптическое волокно с металлическим покрытием. Металлом не покрывается вершина острия (апертура зонда). В СБОМ фактором, который определяет его максимально возможное разрешение, является качество используемого зонда. Именно размер апертуры определяет разрешение СБОМ. Более того, основными характеристиками являются не только размер диафрагмы, но и оптическое пропускание, а также качество металлического покрытия, формирующего апертуру [1].

Известно [2, 3], что распределение интенсивности света в дальнем поле связано с параметрами апертуры. Поэтому по распределению светового поля в дальней зоне можно охарактеризовать апертуру БОЗ, что является целью этой работы.

Изготовление БОЗ методом лазерной вытяжки

Изготовление БОЗ из оптического волокна осуществлено на экспериментальной лазерной установке с тороидальным зеркалом (рис. 1). Излучение СО₂-лазера, направленное с помощью зеркала на конический элемент, разводится под определенным углом. Далее, отразившись от поворотного зеркала, оно фокусируется тороидальным зеркалом на волокно под прямым углом. Поглощенным лазерным излучением нагревается участок кварцевого волокна. К концам волокна прикладывается растягивающее механическое усилие (груз). При увеличении температуры волокна происходит уменьшение его вязкости, в результате чего происходит его растяжение, диаметр волокна уменьшается вплоть до обрыва и образования острия на концах волокна [4].

На полученные острия волокна должно быть напыленно металлическое покрытие, которое позволяет излучению, введенному в волокно, достигнуть апертуры и выйти через нее. Процесс напыления был осуществлен в вакуумной установке. В качестве металла использован алюминий, имеющей высокий коэффициент отражения в видимом диапазоне. При напылении острие вращается. Оно установлено под углом к потоку испаренного алюминия, чтобы на кончике острия была сформирована апертура.

Лазерное излучение ($\lambda = 680\text{нм}$) фокусируется с помощью линзы (микрообъектив) и направляется в БОЗ, который находится на расстоянии h от центра ПЗС-матрицы, расположенной перпендикулярно ему (рис. 3). Зонд и ПЗС-матрица расположены в изолированном от света объеме для исключения шумовых сигналов. Результат измерения выведен на экран компьютера.

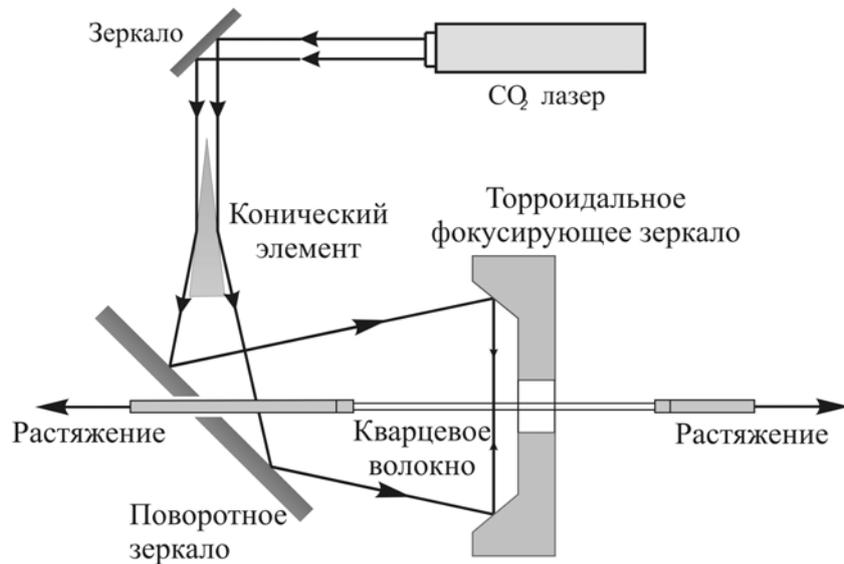


Рис. 1. Схема экспериментальной установки «лазерной вытяжки» с равномерным нагревом волокна и перпендикулярной фокусировкой лучей

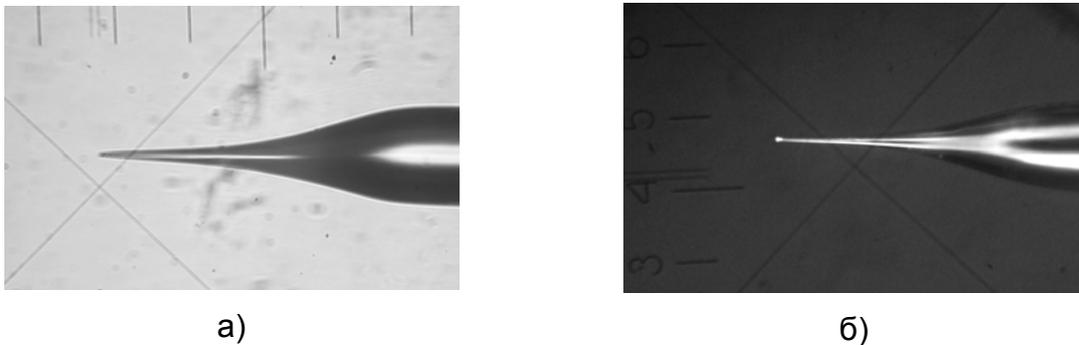


Рис. 2. Заостренное волокно а) – без покрытия и б) – с алюминиевым покрытием и введенным излучением лазера

Установка и методика измерения распределения излучения зонда в дальнем поле

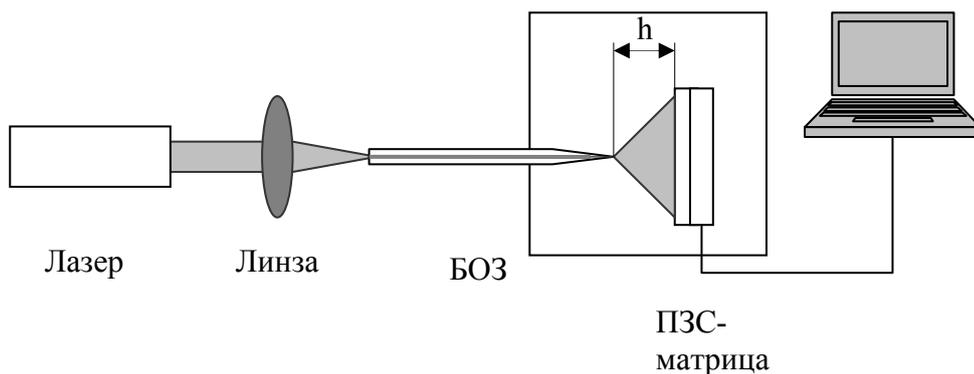


Рис. 3. Схема экспериментальной установки для регистрации излучения от зонда в дальнем поле

Для расширения диапазона регистрируемых освещенностей и устранения нелинейной световой характеристики ПЗС-матрицы было разработано программное обеспечение, которое основано на регистрации серии фотоснимков пятна рассеяния с переменным временем экспозиции на одном и тоже фотоприемнике, т.е. получении совокупности фотометрических сечений, соответствующих различным уровням равной ос-

вещности. Из каждого фотометрического сечения формируется фигура с четким контуром, которая называется изофотой. Из системы изофот можно получить карту распределения освещенности в дальнем поле. Такой метод назван методом изофотометрии с изменяющимся временем накопления [5]. Диапазон регистрации освещенности по данному методу не зависит от протяженности рабочего участка световой характеристики фотоприемника, которая обычно не превышает 10^2 , а зависит от диапазона изменения времени накопления, который не меньше 10^3 . В экспериментальной установке была использована матричная видеокамера VAC-135 с диапазоном относительного времени накопления свыше трех порядков (1-2047). При этом распределение света в дальнем поле регистрируется с отношением $\frac{I_{\max}}{I_{\min}} \approx 10^3 - 10^4$ по сравнению с

$\frac{I_{\max}}{I_{\min}} \approx 10^2$, которое дает приемник.

Результат измерения

При регистрации распределения интенсивности излучения зонда в дальнем поле, были получены разные картины распределения с особенностями, соответствующими различным зондам. Результаты измерения (рис. 4) позволяют сделать ряд выводов.

- Изгиб острия (зонд 1) оказывает влияние на распределение интенсивности таким образом, что половина картины имеет низкую интенсивность.
- Осажденное на кончике зонда зерно алюминия (зонд 2) дает в распределении яркую точку.
- Эллиптическая апертура приводит на картине распределения интенсивности двух лепестков с повышенной интенсивностью, которые направлены параллельно большому радиусу эллипса (зонд 3).
- Лучшее распределение дает зонд 4, который имеет круглую симметричную апертуру, что проявляется в круглой и симметричной картине распределения.
- Распределение излучения в дальнем поле имеют полосатую структуру. Эти полосы возникают вследствие интерференции волн, идущих из центра и края апертуры, где свет более интенсивный за счет распространения по сердцевине волокна в центре и усиления интенсивности при отражении от алюминия на краю апертуры [6, 7].

Оптический метод определения размера БОЗ по распределению излучения в дальнем поле

Для определения размера апертуры БОЗ, можно использовать электронный микроскоп, либо тестируя зонд прямо ближнепольном микроскопе по тест-объекту. Оба эти методы требуют сложной и дорогой техники. Более простым методом является метод определения размера апертуры по распределению излучения в дальнем поле [2, 3].

Излучение, проходящее через субволновую апертуру, имеет две составляющие. Первая, соответствующая высокой частоте в пространственном спектре источника, является эванесцентной волной, которая быстро затухает. Вторая, соответствующая низкой частоте в пространственном спектре источника, является излучающей волной, которая может распространяться [8]. Регистрируется излучающая волна и по ее распределению в дальнем поле, вполне возможно определить распределение этой волны в апертуре, т.е. можно определить ее размер.

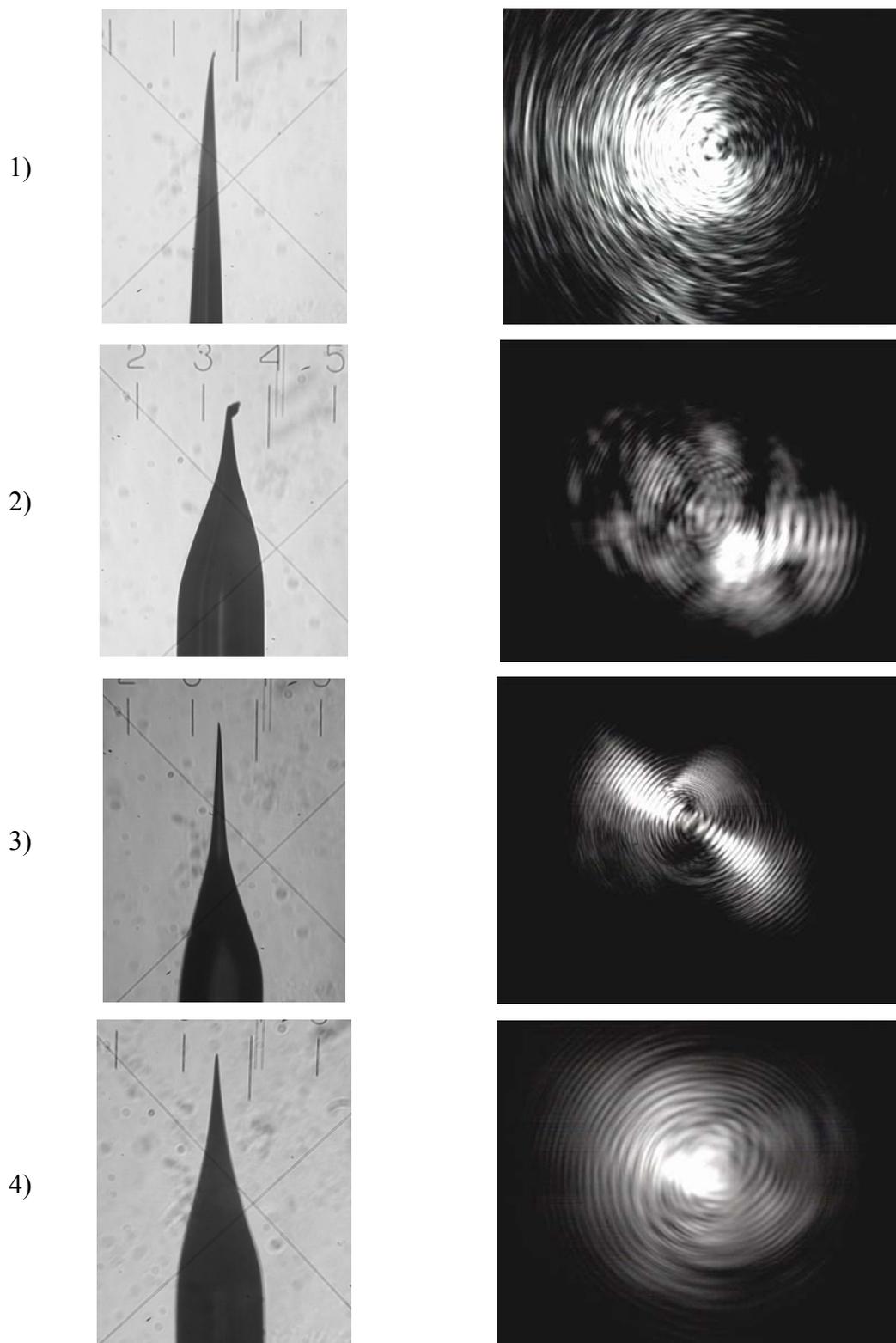


Рис. 4. БОЗ и соответственно полученные картинки пятна, регистрируемые на расстоянии 4 мм от зонда

Процедура определения размера БОЗ использует программу «ЗЕБРА» и состоит в следующем. Сначала определяется область распределения, которая будет считаться в программе интерферограммой (см. рис. 5). Диаметр этой области определен прямо на картине распределения из пропорционального сравнения с размером ПЗС-матрицы. Он составляет 4.2 мм. Программно приводится масштабирование к величине 100 мм (см. рис. 6), и в этом масштабе выполняется дальнейшая обработка. После преобразо-

вания Фурье (рис. 7) диаметр ядра структуры апертуры зонда по шкале составил 0.008 мм (по уровню 0.2). Итак, с учетом начального масштабирования исходной интерферограммы поперечник апертуры зонда (здесь – дифрагирующего отверстия) d определен как

$$d = 0.008 * \frac{4.2}{100} \text{ мм} = 336 \text{ нм}.$$

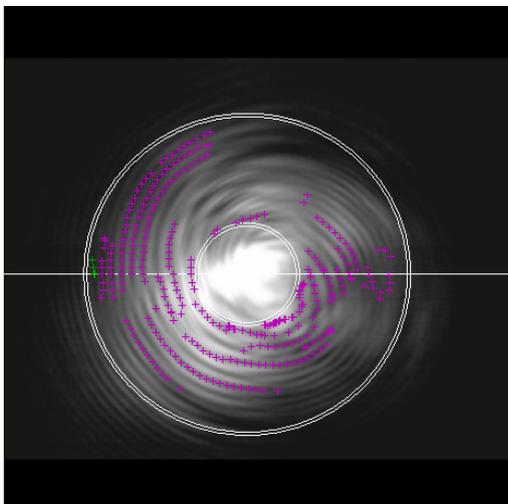


Рис. 5. Автоматическая расшифровка координат точек полос квазиинтерферограммы в программной системе “ЗЕБРА”

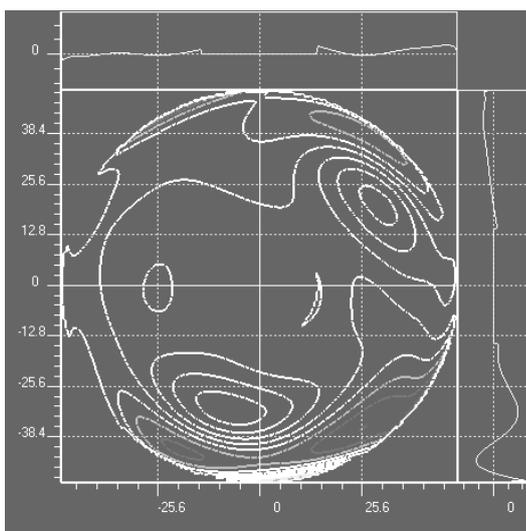
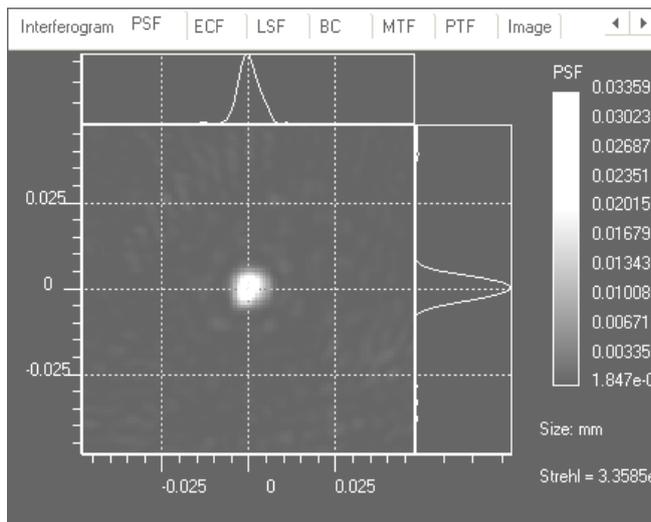
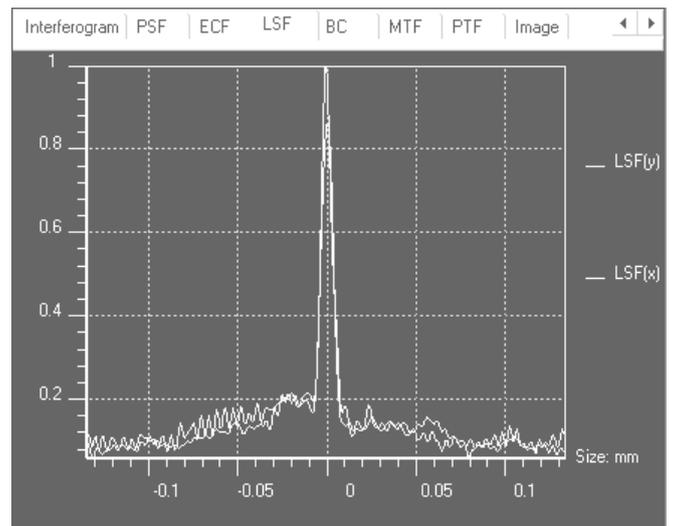


Рис. 6. Компьютерное моделирование структуры дальнепольного распределения освещенности – аппроксимация функции поверхности значений освещенности в программной системе “ЗЕБРА”



а)



б)

Рис. 7. а) – Компьютерное моделирование структуры светового поля апертуры БОЗ, б) – профиль функции

Вывод

Показано, что изучение распределения интенсивности излучения зонда в дальнем поле может быть полезным для характеристики БОЗ. С использованием этого распределения определен размер апертуры БОЗ.

Литература

1. Heinzmann D.W. Pohl. Scanning Near-field optical microscopy. // *Applied. Physics. A.* 1994. V. 59. P. 89–101.
2. Christian Obermuller, Khaled Karrai. Far field characterization of diffracting circular apertures // *Appl. Phys. Lett.* December 1995, 67 (23), p. 3408–3410.
3. Вейко В.П., Вознесенский Н.Б., Гусев А.Е., Иванова Т.В., Родионов С.А. Возможность определения параметров вторичных источников света, меньших длины волны, по характеристикам дальнего поля. // *Оптический журнал.* 1998. Т. 65. № 10. С. 49–53.
4. К.А. Atlasov, V.P. Veiko, A.I. Kalachev. Technology Optimization of the Laser – Assisted SNOM – Tips Stretching // *Proceedings of SPIE.* 2003. V. 5399. P.63-68.
5. Кирилловский В.К., Ле Зуи Туан. Фундаментальные проблемы широкодиапазонного исследования электромагнитного излучения и новый подход к разработке методов и аппаратуры// *Международный оптический конгресс "Оптика-XXI век"*. Санкт-Петербург 16–20 Октября 2006 г.
6. Вознесенский Н.Б. Математическое моделирование процессов распространения и дифракции света в наноструктурах // *Сборник материалов Всерос. совещания «Зондовая микроскопия-2000»*. Н. Новгород. 28 февраля – 2 марта 2000 г. С. 142–146.
7. D.J. Shin, A. Chavez-Pirson, S.H. Kim, S.T. Jung and Y.H. Lee. Diffraction by a subwavelength-sized aperture in a metal plane. // *J. Opt. Soc. Am. A.* July 2001. Vol. 18, No 7.
8. D. Van Labeke, D. Barchiesi and F. Baida. Optical characterization of nanosources used in scanning near-field optical microscopy // *J. Opt. Soc. Am. A.* April 1995. Vol. 12. № 4. P. 695 703.

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА РЕЗОНАНСЫ В СИСТЕМЕ НАНОСЛОЕВ

Л.В. Гортинская

Научный руководитель – д.ф.-м.н, профессор И.Ю. Попов

В статье рассматривается система нанослоев, связанных через систему отверстий. Изучается влияние поперечного электрического поля на сдвиг резонанса. Используется асимптотический метод согласования решений краевых задач.

Введение

В настоящее время одной из задач нанoeлектроники стала проблема создания элементов квантового компьютера. Существуют различные пути ее решения [1, 2]. Один из них базируется на использовании квантовых точек, волноводов и нанослоев. В этом случае становится важным описать транспорт баллистического электрона в системе и способы управления им.

Рассматривается система с чередующимися магнитными и немагнитными слоями. Решающую роль играет зависимость транспортных свойств от спина электрона. Это связано с тем, что в ферромагнитном слое уровни для электронов с различной ориентацией спинов относительно магнитных моментов данных слоев не совпадают. В результате, например, электрон в немагнитном слое со спином, параллельным (антипараллельным) намагниченности, может слабо (или, наоборот, сильно) отражаться от соответствующего магнитного слоя. Характер отражения определяется наличием в магнитном слое свободных уровней для данного электрона. С математической точки зрения тип отражения связан с видом условия для волновой функции на границе слоев (сильное отражение отвечает условию Дирихле). В свою очередь, направления намагниченностей обусловлены межслоевым взаимодействием и могут быть как ферромагнитными (у всех слоев одинаковыми), так и анти-ферромагнитными (перебегающими) [2].

Следует отметить, что малые возмущения (разрывы или примеси в магнитных слоях и т.п.) могут оказывать сильное влияние на электронный транспорт из-за наличия резонансных эффектов. Рассматривается баллистический транспорт электрона в нанослоях, связанных через малые отверстия, моделирующие возмущения. Получены характеристики резонансного рассеяния на данных малых возмущениях.

Внешнее электрическое поле позволяет контролировать резонансные параметры, т.е. электронный транспорт. Внешнее электрическое поле можно рассматривать как нулевое приближение двухэлектронной задачи (т.е. данное поле есть среднее поле, созданное вторым электроном). Подобная система с двумя электронами может быть моделью двухкубитового квантового вентиля.

Резонанс без электрического поля

Рассмотрим систему двух нанослоев слоев Ω_{\pm} шириной d_{\pm} с жесткими границами, связанных через n малых отверстий различной формы $\omega_a^q = a\omega^q$ (преобразование подобия с коэффициентом a из набора ω^q , $q = 1, \dots, n$), область ω^q радиуса 1, центры отверстий в точках x^q , $x^q \in \{(x_1, x_2, 0), x_i \in R\}$, расположенных на границе слоев. Форма отверстий определяет гармоническую емкость C_{ω^i} (коэффициент при $\frac{1}{r}$ в асимптотике на бесконечности решения уравнения Лапласа, обращающегося в 1 на площадке ω^i) [3].

Для определения квазисобственного значения необходимо решить уравнение Гельмгольца с граничными условиями Неймана в соответствующей области:

$$\Delta\psi + \left(\frac{2m}{\hbar^2}\Lambda\right)\psi = 0, \quad \left.\frac{\partial\psi}{\partial n}\right|_{\partial\Omega} = 0. \quad (1)$$

Нижняя граница непрерывного спектра оператора Лапласа $(-\Delta)$ с граничными условиями Неймана равна нулю (для условий Дирихле она больше нуля) [4]. Границами непрерывного спектра в этом случае будут значения $\Lambda_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md^2}$. Мы рассмотрим квазисобственные значения $k_a^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\Lambda_a$, близкие ко второму порогу $\frac{\pi^2}{d_+^2}$ ($\Lambda_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2}$).

Точнее, найдем коэффициенты τ_1 и τ_2 в следующем асимптотическом разложении, где a – малый параметр (то, что вид разложения выбран удачно, выясняется при проведении согласования асимптотических разложений):

$$\ln^{-1} \sqrt{\pi^2 - k_a^2 d_+^2} = \tau_1 a + \tau_2 a^2 + \dots \quad (2)$$

Функция Грина для уравнения Гельмгольца с граничным условием Неймана для слоя в трехмерном пространстве известна:

$$G^\pm((x_1, x_2, x_3), (y_1, y_2, y_3), k) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{d_\pm (\delta_{n0} + 1)} \cos \frac{x_3 \pi n}{d_\pm} \cos \frac{y_3 \pi n}{d_\pm} \cdot \frac{i}{4} H_0^{(1)} \left[i \sqrt{\frac{\pi^2 n^2}{d_\pm^2} - k^2} \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2} \right],$$

где δ_{n0} – символ Кронекера ($\delta_{n0} = 1$, при $n = 0$, в остальных случаях $\delta_{n0} = 0$), точка x задается своими декартовыми координатами x_1, x_2, x_3 . Асимптотики функций Грина в окрестности особенности для спектрального параметра, близкого к порогу, учитывая, что $d_+ > d_-$, запишем следующим образом:

$$G^+(x, 0, k) = -\frac{1}{\pi d_+} \ln \sqrt{\pi^2 - k^2 d_+^2} + \frac{1}{2\pi |x|} + g^+(x, k), \quad (3)$$

$$G^-(x, 0, k) = \frac{1}{2\pi |x|} + g^-(x, k),$$

где $g^+(x, k)$ и $g^-(x, k)$ – функции, не имеющие особенностей при $x \in \Omega^+ \cup \Omega^-$ и для k^2 из окрестности $\frac{\pi^2}{d_+^2}$.

Выберем вид асимптотического разложения для квазисобственной функции $\psi_a(x)$ следующим образом:

$$\psi_a(x) = \begin{cases} \pm b_0 \ln^{-1} \sqrt{\pi^2 - k_a^2 d_+^2} \left(\alpha_i G^\pm(x, x^i, k_a) + \sum_{q=1, q \neq i}^n \alpha_q G^\pm(x, x^q, k_a) \right) + \dots, & x \in \Omega^\pm \setminus S_{\sqrt{a}}^i, \\ u_1^i(x/a) + u_2^i(x/a) a + \dots, & x \in S_{\sqrt{a}}^i, \end{cases}$$

где S_t^i – шар радиуса t с центром в центре i -го отверстия, b_0, α_q – некоторые коэффициенты. Сделаем замену переменных $x = \xi a$, $|\xi| = \rho$, и выделим в полученных выражениях члены одинакового порядка. Процедура склеивания асимптотических разложений заключается в выборе функций $u_j^i(x/a)$, удовлетворяющих уравнению Лапласа с граничными условиями Неймана, таких, чтобы члены соответствующих порядков в асимптотических разложениях были равны. Для согласования членов старшего порядка (чтобы найти τ_1) можно взять функцию $u_1^i(\xi)$ в виде

$$u_1^i(\xi) = \begin{cases} -\frac{\tau_1}{C_{\omega^i}\pi} + \frac{1}{2\pi\rho}\tau_1, \xi > 0 \\ -\frac{\tau_1}{2\pi\rho}, \xi < 0 \end{cases}. \quad (4)$$

Здесь C_{ω^i} – емкость i -го отверстия. В результате для случая n соединяющих отверстий τ_1 дается выражением (случай $d_+ = d_- = d$ рассмотрен аналогично):

$$\tau_1 = \begin{cases} \frac{1}{d_+} \sum_{i=1}^n C_{\omega^i}, & d_+ > d_-, \\ \frac{2}{d} \sum_{i=1}^n C_{\omega^i}, & d_+ = d_- = d, \end{cases} \quad (5)$$

Для нахождения τ_2 выбирается обеспечивающая согласование коэффициентов при первой степени a функция $u_2^i(x/a)$ в окрестности каждого из отверстий:

$$u_2^i(\xi) = \begin{cases} -(C_{\omega^i}\pi)^{-1}\tau_2 + (2\pi\rho)^{-1}\tau_2 + A^i, \xi > 0 \\ -(2\pi\rho)^{-1}\tau_2 + A^i, \xi < 0 \end{cases}, \quad (6)$$

где A^i – некоторая константа, определяемая в процессе вычислений. Процедура согласования показывает, что τ_2 является собственным числом матрицы $\Gamma = \{\gamma_{i,q}\}$:

$$\begin{aligned} \gamma_{i,i} &= -\tau_1\pi C_{\omega^i}(g^+(0,k) + g^-(0,k))|_{k=\pi d_+} \\ \gamma_{i,q} &= -\tau_1\pi C_{\omega^i}(G^+(x^i, x^q, k) + (\pi d_+)^{-1} \ln \sqrt{\pi^2 - k^2 d_+^2} + G^-(x^i, x^q, k))|_{k=\pi d_+} \end{aligned}$$

В случае одинаковых волноводов данная матрица имеет вид

$$\begin{aligned} \gamma_{i,i} &= -2\tau_1\pi C_{\omega^i}g(0,k)|_{k=\pi d} \\ \gamma_{i,q} &= -\tau_1\pi C_{\omega^i}(G(x^i, x^q, k) + (\pi d_+)^{-1} \ln \sqrt{\pi^2 - k^2 d_+^2})|_{k=\pi d_+} \end{aligned}$$

Сдвиг нижней границы непрерывного спектра под влиянием электрического поля

Рассмотрим систему нанослоев, описанную выше, под действием поперечного электрического (направленного перпендикулярно плоскости слоев) поля напряженности F_z . В этом случае уравнение системы изменится (в сравнении с (1)) и будет выглядеть следующим образом:

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(\lambda + F_z)\psi = 0, \quad \frac{\partial\psi}{\partial n}\Big|_{\partial\Omega} = 0. \quad (7)$$

В уравнении (7) сделаем замену переменных: $t = \left(z + \frac{\lambda}{F}\right)p^{\frac{1}{3}}$, где $p = \frac{2mF}{\hbar^2}$. В результате мы получим уравнение Эйри $\psi''(t) + t\psi(t) = 0$, решение которого имеет вид

$$\psi(t) = c\text{Ai}(-t) + d\text{Bi}(-t), \quad (8)$$

где $\text{Ai}(-t), \text{Bi}(-t)$ – функции Эйри, c, d – некоторые константы. Будем искать константы из (8), воспользовавшись условиями Неймана, а именно, $\psi'(z=0) = \psi'(z=d) = 0$, где d – ширина нанослоя. Найдем производную функции (8):

$$\psi'_z\left(\left(z + \frac{\lambda}{F}\right)p^{\frac{1}{3}}\right) = -c\text{Ai}'\left(-\left(z + \frac{\lambda}{F}\right)p^{\frac{1}{3}}\right) - d\text{Bi}'\left(-\left(z + \frac{\lambda}{F}\right)p^{\frac{1}{3}}\right)$$

и учтем условия Неймана:

$$\psi'_z(z=0) = -c\text{Ai}'\left(-\frac{\lambda}{F}p^{\frac{1}{3}}\right) - d\text{Bi}'\left(-\frac{\lambda}{F}p^{\frac{1}{3}}\right) = 0.$$

Выразим отсюда константу d :

$$d = -\frac{c\text{Ai}'\left(-\frac{\lambda}{F}p^{\frac{1}{3}}\right)}{\text{Bi}'\left(-\frac{\lambda}{F}p^{\frac{1}{3}}\right)}. \quad (9)$$

Из второго условия Неймана и уравнения (9) получим:

$$\psi'_z(z=d) = c\text{Ai}'\left(-\frac{\lambda}{F}p^{\frac{1}{3}}\right)\text{Bi}'\left(-\left(d+\frac{\lambda}{F}\right)p^{\frac{1}{3}}\right) - c\text{Bi}'\left(-\frac{\lambda}{F}p^{\frac{1}{3}}\right)\text{Ai}'\left(-\left(d+\frac{\lambda}{F}\right)p^{\frac{1}{3}}\right) = 0$$

Пользуясь асимптотиками производных функции Эйри:

$$\begin{aligned} \text{Bi}'(-t) &= \frac{1}{4}t^{-\frac{5}{4}}\cos\left(\frac{2}{3}t^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) + t^{\frac{1}{4}}\sin\left(\frac{2}{3}t^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) \\ \text{Ai}'(-t) &= \frac{1}{4}t^{-\frac{5}{4}}\sin\left(\frac{2}{3}t^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) - t^{\frac{1}{4}}\cos\left(\frac{2}{3}t^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) \end{aligned} \quad (10)$$

и введя новые переменные $t_0 = t|_{z=0} = \frac{\lambda}{F}p^{\frac{1}{3}}$, $t_d = t|_{z=d} = \left(d + \frac{\lambda}{F}\right)p^{\frac{1}{3}}$, $\alpha = \frac{2}{3}t_0^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}$,

$\beta = \frac{2}{3}t_d^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}$, получим:

$$\begin{aligned} &\left(-\frac{1}{4}t_0^{-\frac{5}{4}}\cos\alpha - t_0^{\frac{1}{4}}\sin\alpha\right)\left(-\frac{1}{4}t_d^{-\frac{5}{4}}\sin\beta + t_d^{\frac{1}{4}}\cos\beta\right) - \\ &-\left(-\frac{1}{4}t_0^{-\frac{5}{4}}\sin\alpha + t_0^{\frac{1}{4}}\cos\alpha\right)\left(-\frac{1}{4}t_d^{-\frac{5}{4}}\cos\beta - t_d^{\frac{1}{4}}\sin\beta\right) = 0 \end{aligned} \quad (11)$$

Упростим (11):

$$\left(\frac{1}{16}t_0^{-\frac{5}{4}}t_d^{-\frac{5}{4}} + t_0^{\frac{1}{4}}t_d^{\frac{1}{4}}\right)\sin(\beta - \alpha) - \frac{1}{4}\left(t_0^{-\frac{5}{4}}t_d^{\frac{1}{4}} - t_0^{\frac{1}{4}}t_d^{-\frac{5}{4}}\right)\cos(\beta - \alpha) = 0. \quad (12)$$

Разделив (12) на $\frac{t_d^{-\frac{1}{4}}t_0^{-\frac{1}{4}}}{\cos(\beta - \alpha)}$, получим

$$\text{tg}(\beta - \alpha) = \frac{4\left(t_0^{-\frac{3}{2}} - t_d^{-\frac{3}{2}}\right)}{t_0^{-\frac{3}{2}}t_d^{-\frac{3}{2}} + 16}. \quad (13)$$

В уравнении (13) вернемся к прежним переменным:

$$\begin{aligned} \text{tg}\left(\frac{2}{3}t_d^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} - \frac{2}{3}t_0^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4}\right) &= \text{tg}\left(\frac{2}{3}\left(\left(\left(d + \frac{\lambda}{F}\right)p^{\frac{1}{3}}\right)^{\frac{3}{2}} - \left(\frac{\lambda}{F}p^{\frac{1}{3}}\right)^{\frac{3}{2}}\right)\right) = \\ &= \text{tg}\left(\frac{2}{3}p^{\frac{1}{2}}\left(\left(d + \frac{\lambda}{F}\right)^{\frac{3}{2}} - \left(\frac{\lambda}{F}\right)^{\frac{3}{2}}\right)\right) = \text{tg}\left(\frac{2}{3}p^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\lambda}{F}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{dF}{\lambda}\left(\frac{3}{2} + \frac{3}{8}\frac{dF}{\lambda}\right)\right) = \\ &= \text{tg}\left(p^{\frac{1}{2}}d\lambda^{\frac{1}{2}}\left(1 + \frac{dF}{4\lambda}\right)\right) \end{aligned}$$

Введем переменную $\gamma = p^{\frac{1}{2}} d \lambda^{\frac{1}{2}}$, тогда

$$\operatorname{tg} \left(\gamma + \gamma \frac{dF}{4\lambda} \right) = \frac{\operatorname{tg} \gamma + \operatorname{tg} \left(\gamma \frac{dF}{4\lambda} \right)}{1 - \operatorname{tg} \gamma \operatorname{tg} \left(\gamma \frac{dF}{4\lambda} \right)} = \left(\operatorname{tg} \gamma + \gamma \frac{dF}{4\lambda} \right) \left(1 + \gamma \frac{dF}{4\lambda} \operatorname{tg} \gamma \right),$$

откуда $\operatorname{tg}^2 \gamma + \frac{4\lambda}{dF\gamma} \operatorname{tg} \gamma + 1 = 0$. Решая получившееся квадратное уравнение, получим:

$$\operatorname{tg} \gamma = -\frac{2\lambda}{dF\gamma} \pm \sqrt{\left(\frac{2\lambda}{dF\gamma} \right)^2 - 1} = -\frac{2\lambda}{dF\gamma} \left(1 \mp \sqrt{1 - \left(\frac{dF\gamma}{2\lambda} \right)^2} \right)$$

Используем разложение в ряд Тейлора:

$$\operatorname{tg} \gamma = -\frac{2\lambda}{dF\gamma} \frac{1}{2} \left(\frac{dF\gamma}{2\lambda} \right)^2 = -\frac{dF\gamma}{4\lambda}. \quad (14)$$

$$-\gamma = -\frac{dF\gamma}{4\lambda}, \quad \lambda_0 = -\frac{dF}{4}.$$

Отсюда видно, что нижняя граница непрерывного спектра при наличии поперечного электрического поля смещается от 0 (без электрического поля) в отрицательную область и равна $\lambda_0 = -\frac{dF}{4}$.

Для поиска второго порога в уравнении (14) используем формулу приведения:

$$\operatorname{tg}(\pi - \gamma) = -\frac{dF\gamma}{4\lambda},$$

отсюда получим $\pi - \gamma = -\frac{dF\gamma}{4\lambda}$, $\pi = \frac{1}{1 + \frac{dF}{4\lambda}} = p^{\frac{1}{2}} d \lambda^{\frac{1}{2}}$.

Следовательно, для поиска второго порога необходимо решить квадратное уравнение

$$\lambda - \frac{\pi}{d} p^{\frac{1}{2}} \lambda^{\frac{1}{2}} + \frac{dF}{4} = 0.$$

Асимптотика резонанса в случае поперечного электрического поля

Запишем функцию Грина для уравнения (7) с граничными условиями Неймана

$$G_n^{\pm}((x_1, x_2, x_3), (y_1, y_2, y_3), k) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{d_{\pm}(\delta_{n0} + 1)} \psi_n(-t) \cdot \psi_n(-t')$$

$$4^{-1} i H_0^{(1)} \left(i \sqrt{\lambda_n - k^2} \sqrt{(x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2} \right),$$

где $\lambda_n = \pi^2 n^2 d_{\pm}^{-2}$. Запишем асимптотики функций Грина в окрестности особенности для спектрального параметра, близкого ко второму порогу λ_1 , учитывая, что $d_+ > d_-$:

$$G^+(x, 0, k) = -\pi^{-1} d_+^{-1} \psi_1 \left(-\frac{\lambda}{F} p^{\frac{1}{3}} \right) \ln \sqrt{\lambda_1 - k^2} + (2\pi |x|)^{-1} + g^+(x, k), \quad (15)$$

$$G^-(x, 0, k) = (2\pi |x|)^{-1} + g^-(x, k),$$

где $g^+(x, k)$ и $g^-(x, k)$ – функции, не имеющие особенностей при $x \in \Omega^+ \cup \Omega^-$ и для k^2 из окрестности λ_1 .

Будем искать асимптотики резонанса в виде $\ln^{-1} \sqrt{\lambda_1 - k^2} = \tau_1 a + \tau_2 a^2 + \dots$. Как и ранее, выберем вид асимптотического разложения для квазисобственной функции $\psi_a(x)$ следующим образом:

$$\psi_a(x) = \begin{cases} \pm b_0 \ln^{-1} \sqrt{\lambda_1 - k_a^2} \left(\alpha_i G^\pm(x, x^i, k_a) + \sum_{q=1, q \neq i}^n \alpha_q G^\pm(x, x^q, k_a) \right) + \dots, & x \in \Omega^\pm \setminus S_{\sqrt{a}}^i, \\ u_1^i(x/a) + u_2^i(x/a)a + \dots, & x \in S_{\sqrt{a}}^i, \end{cases}$$

Проводя процедуру склеивания решений, описанную выше, получим

$$\tau_1 = \begin{cases} \sum_{i=1}^n C_{\omega^i} \psi_1^2 \left(-\frac{\lambda_1}{F} p^{\frac{1}{3}} \right), & d_+ > d_-, \\ 2 \sum_{i=1}^n C_{\omega^i} \psi_1^2 \left(-\frac{\lambda_1}{F} p^{\frac{1}{3}} \right), & d_+ = d_- = d, \end{cases} \quad (16)$$

τ_2 является собственным числом матрицы $\Gamma = \{\gamma_{i,q}\}$:

$$\gamma_{i,i} = -\tau_1 \pi C_{\omega^i} (g^+(0, k) + g^-(0, k)) \Big|_{k=\pi d_+}$$

$$\gamma_{i,q} = -\tau_1 \pi C_{\omega^i} (G^+(x^i, x^q, k) + (\pi d_+)^{-1} \ln \sqrt{\lambda_1 - k^2} + G^-(x^i, x^q, k)) \Big|_{k=\pi d_+}$$

Теперь найдем асимптотику функции $\psi_1^2 \left(-\frac{\lambda}{F} p^{\frac{1}{3}} \right)$ при $F \rightarrow 0$, воспользовавшись формулой (8) и асимптотиками функций Эйри:

$$\begin{aligned} \psi_1 \left(-\frac{\lambda}{F} p^{\frac{1}{3}} \right) &= c_n \left(\frac{1}{4} t^{-\frac{3}{2}} \sin \left(\frac{2}{3} z^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{3} \right) \cos \left(\frac{2}{3} z^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{3} \right) - \cos^2 \left(\frac{2}{3} z^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{3} \right) \right) - \\ &- c_n \left(\frac{1}{4} t^{-\frac{3}{2}} \sin \left(\frac{2}{3} z^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{3} \right) \cos \left(\frac{2}{3} z^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{3} \right) - \sin^2 \left(\frac{2}{3} z^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{3} \right) \right) = -c_n \end{aligned}$$

Для вычисления c вычислим норму, откуда получим $c_n^2 = \frac{1}{d}$.

Перейдем к цилиндрическим функциям. Известно, что

$$J_\nu(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left[\cos \left(x - \frac{\nu\pi}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \left(1 - \frac{(4\nu^2 - 1)(4\nu^2 - 9)}{32(2x)^2} \right) - \sin \left(x - \frac{\nu\pi}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \left(\frac{(4\nu^2 - 1)}{8x} \right) \right].$$

Выразим функции Эйри через указанную функцию Бесселя:

$$\text{Bi}(-t) = \frac{1}{3} \sqrt{z} \left(J_{-\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} t^{\frac{3}{2}} \right) - J_{\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} t^{\frac{3}{2}} \right) \right)$$

$$\text{Ai}(-t) = \frac{1}{3} \sqrt{z} \left(J_{-\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} t^{\frac{3}{2}} \right) - J_{\frac{1}{3}} \left(\frac{2}{3} t^{\frac{3}{2}} \right) \right)$$

Напишем асимптотическое представление функций Эйри, используя указанные представления:

$$\begin{aligned} \text{Ai}(-t) &\square t^{-\frac{1}{4}} \left[\sin\left(\frac{2}{3}t^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) - \frac{5}{48}t^{-\frac{3}{2}} \cos\left(\frac{2}{3}t^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) \right] \\ \text{Bi}(-t) &\square t^{-\frac{1}{4}} \left[\cos\left(\frac{2}{3}t^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) + \frac{5}{48}t^{-\frac{3}{2}} \sin\left(\frac{2}{3}t^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) \right] \end{aligned} \quad (17)$$

Известно, что $\psi_1(-t_0) = c_n (\text{Bi}(-t_0)\text{Ai}'(-t_0) - \text{Ai}(-t_0)\text{Bi}'(-t_0))$. Из (17) найдем $\text{Ai}'(-z), \text{Bi}'(-z)$:

$$\begin{aligned} \text{Ai}'(-t) &\square \frac{1}{4}t^{-\frac{5}{4}} \sin\left(\frac{2}{3}t^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) - t^{\frac{1}{4}} \cos\left(\frac{2}{3}t^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) - \frac{5 \cdot 7}{4 \cdot 48}t^{-\frac{11}{4}} - \frac{5}{48}t^{-\frac{5}{4}} \sin\left(\frac{2}{3}t^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) \\ \text{Bi}'(-t) &\square \frac{1}{4}t^{-\frac{5}{4}} \cos\left(\frac{2}{3}t^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) + t^{\frac{1}{4}} \cos\left(\frac{2}{3}t^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) + \frac{5 \cdot 7}{4 \cdot 48}t^{-\frac{11}{4}} - \frac{5}{48}t^{-\frac{5}{4}} \cos\left(\frac{2}{3}t^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4}\right) \end{aligned} \quad (18)$$

Подставив (17) и (18) в $\psi_1(-t_0) = c_n (\text{Bi}(-t_0)\text{Ai}'(-t_0) - \text{Ai}(-t_0)\text{Bi}'(-t_0))$, получим:

$$\psi_1(-t_0) = \frac{1}{\sqrt{d}} \left(-1 - \frac{5 \cdot 7 \cdot 11}{48^2} t_0^{-3} \right)$$

В результате получим $\psi_1^2(-t) = \frac{1}{d} \left(1 + \frac{2 \cdot 5 \cdot 7 \cdot 11}{48^2} t^{-3} \right)$, подставив в (16), получим

$$\tau_1 = \begin{cases} \sum_{i=1}^n C_{\omega^i} \frac{1}{d_+} \left(1 + \frac{2 \cdot 5 \cdot 7 \cdot 11}{48^2} p \left(\frac{F}{\lambda_1} \right)^3 \right), & d_+ > d_-, \\ \sum_{i=1}^n C_{\omega^i} \frac{2}{d} \left(1 + \frac{2 \cdot 5 \cdot 7 \cdot 11}{48^2} p \left(\frac{F}{\lambda_1} \right)^3 \right), & d_+ = d_- = d, \end{cases}$$

Из анализа формулы видно, что при $F = 0$ получаем формулу (5), т.е. случай без электрического поля.

Заключение

В работе показана возможность управления резонансными эффектами при баллистическом электронном транспорте в слоистой наноструктуре с помощью внешнего поперечного электрического поля. Найден сдвиг нижней границы непрерывного спектра под влиянием однородного электрического поля, вычислены асимптотики резонансов, проведено сравнение со случаем отсутствия электрического поля и обоснована принципиальная возможность создания квантового вентиля для выполнения базовых операций при квантовых вычислениях.

Работа поддержана грантом РФФИ 05-03-32576.

Литература

1. Kunze Ch. 1993 Leaky and mutually coupled quantum wires, Phys. Rev. B 48, 14338–14346.
2. Meindl J.D. 1995 Low Power Microelectronics: retrospect and prospect, Proc. IEEE 83, (4), 619–635.
3. Ландкоф Н.С. Основы современной теории потенциала. Москва, Наука, 1966
4. Arsen'ev A.A. 2003 Resonance scattering in quantum waveguides. Math. sb. 194, 3–22.

ЭЛЕКТРОКИНЕТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ УПРАВЛЕНИЯ МИКРОПОТОКАМИ В КАНАЛАХ

А.Н. Тупик

Научный руководитель – к.т.н., с.н.с. А.А. Евстапов

Представлены результаты исследования влияния технологии обработки и герметизации микрофлюидных чипов на величину подвижности электроосмотического потока, что позволяет прогнозировать значение электроосмоса для последующего управления электрокинетическими потоками. При герметизации чипа методом термического связывания наблюдается большее значение подвижности, чем для чипа, герметизированного методом глубокого оптического контакта, однако химическая обработка чипа позволяет снизить величину подвижности электроосмотического потока.

Концепция микроаналитических систем μ TAS (Micro-Total Analysis Systems) предполагает объединить в микроустройстве все стадии химического или биологического анализа, позволяя создавать автоматизированные системы экспресс-анализа, которые успешно используются в аналитической химии, медицине, фармацевтике, экологическом мониторинге, криминалистике и т.д. [1]. Значительное количество статей по микрофлюидным системам опубликовано в журналах *Electrophoresis*, *Analytical Chemistry*, *Biosensors and Bioelectronics*, *Journal of Micromechanics and Microengineering*, *Clinical Chemistry*, *Lab on a Chip* и др. Они посвящены разработке, совершенствованию и применению микрофлюидных чипов в качестве аналитических систем. Основным компонентом микроаналитической системы является микрофлюидный чип (МФЧ), представляющий собой устройство из двух или нескольких пластин на стеклянной или полимерной основе объемом в несколько квадратных сантиметров с системой каналов, реакторов, микрососудов, датчиков и других вспомогательных элементов размерами до сотен микрометров [2]. Преимуществами использования приборов на основе МФЧ являются: повышение скорости анализа, малые объемы образца, снижение потребления дорогих реагентов, возможность широкомасштабных параллельных и объединенных исследований и т.п. [1, 2].

Аналитические исследования на МФЧ требуют организации точного и воспроизводимого процесса транспортировки анализируемого вещества и реагентов по микроканалам чипа. Основными способами создания управляемых транспортных потоков вещества в МФЧ являются гидравлическое и электрокинетическое воздействия на жидкость [3].

В случае гидравлического способа управления движением потоков на жидкость в микроканалах МФЧ воздействуют давлением. Этот способ распространен и достаточно прост в реализации, однако к его недостаткам можно отнести необходимость использования гидравлических интерфейсов, высокие требования к стабильности получаемого потока и формируемый параболический профиль потока (диффузионное размытие границы пробы, что снижает точность анализа) [4].

При электрокинетическом способе управления потоками в жидкости под действием приложенного внешнего электрического поля формируются электрофоретический и электроосмотический потоки, совпадающие по направлению течения или направленные противоположно в зависимости от условий электрофореза. Преимуществом электрокинетического способа по сравнению с гидравлическим является плоский профиль потока, а к недостаткам можно отнести нежелательное разделение ионов пробы под действием электрического поля.

Электроосмотический поток присутствует во всех электрофоретических методах анализа. Возникновение электроосмотического потока обусловлено явлениями на границе раздела жидкость-твердое тело (поверхность канала). В микрофлюидных аналитических системах на основе различных стекол или кварца из-за диссоциации силанольных групп в поверхностном слое образуются отрицательные заряды, а в электро-

лите вблизи границы раздела индуцируются положительные заряды. Такая система пространственно разделенных зарядов на границе раздела фаз называется двойным электрическим слоем (ДЭС) [5]. Из электролита на поверхность канала адсорбируется неподвижный слой ионов (слой Штерна). Подвижный диффузионный слой с избытком катионов удерживается силами электрического взаимодействия, однако по мере удаления от границы раздела силы притяжения уменьшаются, преобладает тепловое движение, и концентрация катионов в диффузионном слое постепенно приближается к общей концентрации электролита в объеме. ДЭС на границе раздела обуславливает особенности взаимодействия электролита с электрическим полем. Под действием электрического поля диффузионный слой с повышенной концентрацией катионов перемещается в сторону катода, увлекая за собой остальную массу жидкости в канале (вследствие молекулярного сцепления и внутреннего сопротивления), что формирует электроосмотический поток (ЭОП).

Так как никогда не удается полностью исключить возникновение поверхностных зарядов, при проведении электрофоретических методов анализа ЭОП должен контролироваться или подавляться для достижения точных и воспроизводимых результатов исследования. При рН от нейтрального до щелочного ЭОП гораздо сильнее электрофоретической миграции, и перемещение большинства частиц происходит посредством электроосмотического потока. Применение ЭОП для транспортировки нейтральных или частично заряженных проб к детектору в биоаналитических и фармацевтических исследованиях позволяет изучать биологические пробы (белки, ДНК, живые клетки), избегая травмирующих воздействий высокого напряжения электрического поля [4].

Скорость ЭОП описывается уравнением Гельмгольца-Смолуховского [4], зависит от диэлектрической проницаемости среды, вязкости электролита и прямо пропорциональна напряжению электрического поля и электрокинетическому ζ -потенциалу, зависящему от вида электролита и свойств поверхности канала.

В целях создания управляемых электрокинетических потоков необходимо определить влияние на величину и характер ЭОП технологий изготовления МФЧ и способов обработки поверхности канала. Задачей данной работы является измерение подвижности ЭОП в сепарационном канале микрочипов, полученных разными способами, с различной химической обработкой поверхности и разными защитными пластинами.

Исследованы образцы МФЧ с пластиной из стекла К8, каналы в которой были получены методом фотолитографии и кислотного травления. Ширина каналов микрочипа 60 мкм, глубина 12 мкм, общая длина канала (включая подводящие) – 42,9 мм. Герметизация МФЧ осуществлялась методом глубокого оптического контакта (ГОК) и способом термического связывания.

Чипы 1 и 2 имели защитную пластину из стекла Ф1, герметизированы способом термического связывания, подвергались предварительной обработке: химической (обработка 65 % серной кислотой) и термической (выдержка при $T = 600\text{ }^{\circ}\text{C}$), соответственно. Чип 3 с защитной пластиной из стекла К8 был герметизирован методом глубокого оптического контакта (ГОК). Дополнительной химической или термической обработки не проводилось.

В качестве электролита выбран боратный буфер рН 9,18 концентрации 0,01 моль/л, ζ -потенциал равен – 60,5 мВ.

Подвижность ЭОП определялась по методу Хуанга К. (Huang X. et. al.) [6]. Метод основан на регистрации зависимости изменения тока во времени и не требует использования специальных реагентов и детектора. Стремление системы к выравниванию разности концентрации за счет ЭОП приводит к повышению сопротивления и падению тока. После выравнивания концентрации буфера величина тока стабилизируется (рис. 1).

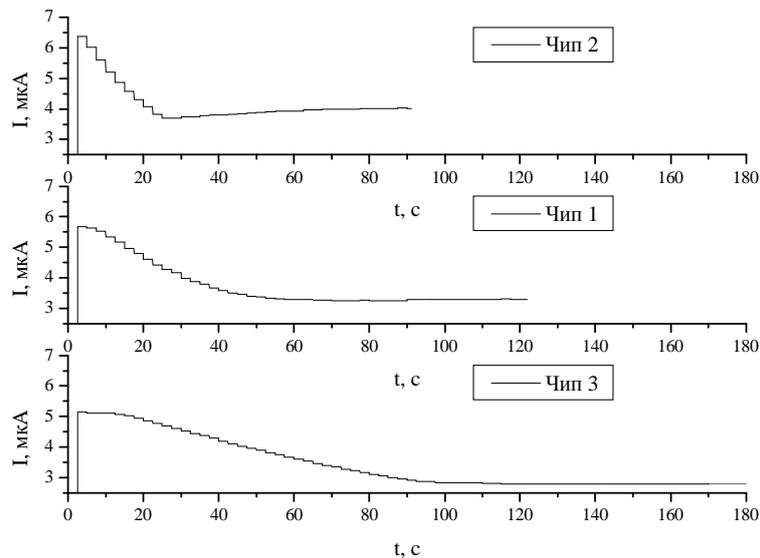


Рис. 1. Изменения тока во времени при разности концентраций 50 %

Определив по графику время t падения величины тока, можно получить скорость ЭОП: $v_{\text{эоп}} = L/t$, где L – длина канала. Подвижность ЭОП: $\mu_{\text{эоп}} = v_{\text{эоп}}/E$.

Учитывая, что напряженность электрического поля $E = U/L$, где U – напряжение, при котором проводился электрофорез, можно найти подвижность ЭОП: $\mu_{\text{эоп}} = L^2/(Ut)$. Результаты расчетов, представленные в таблице, показывают, что метод герметизации МФЧ и различия в способе предварительной обработки поверхности каналов оказывают существенное влияние на величину подвижности электроосмотического потока.

Чип №	Напряжение В	Кол-во измерений n	$\mu \cdot 10^{-4}$ $\text{см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$	СКО %	Метод герметизации	Предварительная обработка
1	1000	7	$4,4 \pm 0,1$	3	термическое связывание	химическая
2	1000	12	$9,3 \pm 0,6$	7	термическое связывание	термическая
3	1000	12	$2,4 \pm 0,1$	2	ГОК	не проводилась

Таблица. Значения подвижности электроосмотического потока в микрофлюидных чипах

Итак, наименьшая подвижность электроосмотического потока наблюдалась в МФЧ полученных методом ГОК без проведения химической обработки. Наибольшая подвижность была присуща МФЧ получаемым способом термического связывания и при термической обработке чипа. Химическая обработка позволяла снизить величину подвижности ЭОП.

Для подробного анализа рассматривалась скорость изменения величины тока от времени (рис. 2). На начальном участке зависимости характер изменения скорости dI/dt у всех чипов одинаков – наблюдается спад сигнала, осуществляемый с разной скоростью. Для чипов 1 и 3 спад сменяется выходом на плато – скорость изменения тока становится постоянной на некотором временном участке, а затем происходит уменьшение скорости изменения тока до нулевого уровня. Но для чипа 2 характерно другая зависимость изменения сигнала – наблюдается непрерывное изменение скорости dI/dt на всем интервале изменения тока.

Выход dI/dt на плато, по-видимому, свидетельствует об установившемся скоростном режиме изменения тока. Так как измеряемый ток пропорционален количеству переносимых ионов (т.е. вещества), то можно полагать, что этот режим соответствует некоторому стабильному состоянию, при котором наблюдается постоянный ЭОП. Таким

образом, наиболее корректным будет являться определение подвижности ЭОП на участке $dI/dt = \text{const}$. Зависимость, наблюдаемая для чипа 2, вероятно, свидетельствует о более сложных процессах, происходящих с участием поверхностного слоя канала (возможно, отражающих какие-либо химические процессы).

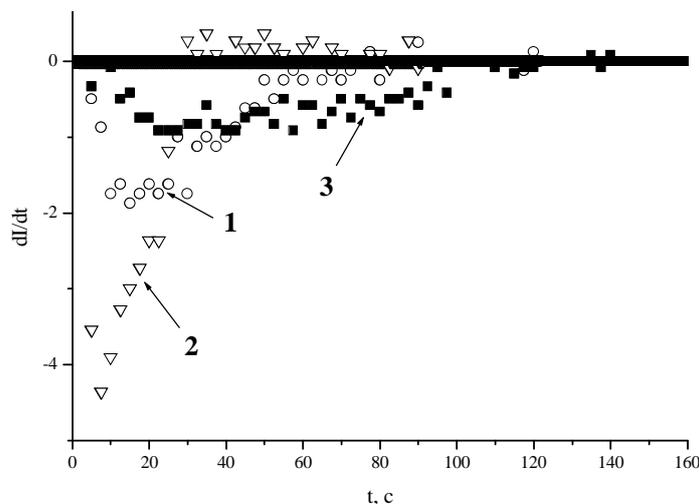


Рис. 2. Скорость изменения величины тока для образцов МФЧ: 1 – чип 1, 2 – чип 2, 3 – чип 3

На основании проведенного анализа можно сделать предварительные выводы:

1. Различие значений подвижности ЭОП для чипов, полученных разными технологиями, означает, что в процессе герметизации МФЧ происходит существенное изменение свойств поверхности канала.

2. Химическая и термическая обработка поверхности чипа перед процессом термического связывания оказывают разное влияние на структуру поверхности канала и на величину создаваемого ЭОП. Химическая обработка серной кислотой позволяет снизить величину подвижности ЭОП.

3. Изучение скорости изменения величины тока от времени позволяет определить интервал времени для более точной оценки ЭОП, а также свидетельствует о сложных процессах, происходящих в каналах чипа в случае термического связывания.

Исследование влияния технологии обработки и герметизации МФЧ на величину подвижности ЭОП в каналах чипов позволит прогнозировать значение электроосмотического потока, что дает возможность управления электрокинетическими потоками для реализации электрофоретических методов анализа на основе микрофлюидных чипов.

Литература

1. Khandurina J., Guttman A. Bioanalysis in microfluidic devices. // Journal of chromatography. 2002. 943. P. 159–183.
2. Huikko K., Kostianen R., Kotiaho T. Introduction to micro-analytical systems: bioanalytical and pharmaceutical applications // European journal of pharmaceutical sciences 2003. 20. P. 149–171.
3. Micro- and nano-scale diagnostic techniques, Ed. Breuer K.S., Springer Verlag, New York, 2003, P. 166
4. Руководство по капиллярному электрофорезу / Под ред. Волошука А.М. М., 1996. 111 с.
5. Ельцов С.В., Водолазкая Н.А. Физическая и коллоидная химия. Харьков, 2005. 240 с.
6. Huang X., Gordon M.Y., Zare R.N. Current-monitoring method for measuring the electroosmotic flow rate in capillary zone electrophoresis // Analytical chemistry. 1988. 60. P. 1837–1838.

ФОТОПРОВОДИМОСТЬ ОСТРОВКОВОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛЕНКИ НАТРИЯ

Е.В. Ващенко

Научный руководитель – в.н.с., д.ф.-м.н. В.В. Хромов

В работе проведены исследования действия света на островковую металлическую пленку, напыленную на диэлектрическую подложку и представляющую собой ансамбль наночастиц, взаимодействующих друг с другом за счет туннелирования электронов. Показано, что наибольшее воздействие на проводимость пленки производит излучение, вызывающее фотоэлектронный эффект с поверхности металлических наночастиц. Обнаружен эффект заметного влияния на проводимость пленки излучения за «красной границей» фотоэффекта.

Введение

Различные виды дисперсионных систем интересуют исследователей уже много десятилетий из-за специфических свойств, вызванных тем, что эти системы представляют собой ансамбли наночастиц. По мере того как размер частицы R уменьшается, число поверхностных атомов относительно всех атомов в объеме увеличивается (зависимость R^{-1}). Таким образом, многие аспекты поведения таких систем определяются поверхностными процессами (эффекты геометрического размера).

Интересным примером дисперсных систем являются островковые металлические пленки (ОМП), представляющие собой квазидвумерные ансамбли наночастиц. Такие пленки могут быть легко изготовлены, например, вакуумным напылением металла на диэлектрическую подложку. Так как расстояния между металлическими островками – порядка нескольких нанометров, островки могут быть соединены с помощью туннелирования электронов и таким образом представляют единую систему. Однако на свойства такой системы влияют свойства частиц, составляющих пленку. Известно, что у металлических наночастиц, линейные размеры которых порядка 1–100 нм, наблюдаются оптические резонансы в видимой области спектра. Резонансы приводят к увеличению действующего на частицу поля по сравнению с полем падающей световой волны. Кроме резонансных особенностей отдельных металлических наночастиц, привлекательные и интересные свойства обнаруживаются у ансамбля частиц. Так, сближение частиц вызывает смещение резонансов и дополнительное усиление поля в промежутке между ними. Перенос посредством электрической индукции возбуждения в ансамблях частиц открывает перспективу применения их в информационных целях и возможность производить селективное оптическое действие на распределенные системы металлических наночастиц [1]. Высокая концентрация энергии вблизи металлических наночастиц при возбуждении в них резонансных плазмонных колебаний позволяет использовать цепочку близко расположенных частиц как эффективный проводник возбуждений, способный работать на оптических частотах [2].

Важными факторами, определяющими специфические характеристики ОМП, являются: эффект размера маленьких частиц, туннельная связь между частицами, возможность существования локального сильного поля вокруг них.

Интерес к ОМП возник около 30 лет назад, когда Борзяк, Федорович и Сарбей обнаружили, что пропускание тока через ОМП вызывает электронную и световую эмиссию из маленького пятна (≤ 1 мкм), называемого эмиссионным центром [3]. Позже такой эффект наблюдали в пленках, подвергнутых облучению достаточно мощным излучением ИК лазера. Подобное явление может быть эффективно использовано для создания «холодных» катодов для вакуумных микроэлектронных устройств, тензометрических датчиков, катодов для ИК электрооптических конвертеров [3, 4].

В этой работе мы исследовали механизм действия оптического излучения на фотопроводимость ОМП, в том числе и за «красной границей» фотоэффекта.

Результаты эксперимента

Была изготовлена кювета, к сапфировому окну которой были прикреплены два плоских электрода длиной 1 см с расстоянием между ними 4 мм. Вблизи другого окна кюветы был впаян третий электрод для измерения фотоэлектронной эмиссии с пленки. Один из отростков кюветы с помощью вакуумной перегонки наполнялся металлическим натрием. Это позволяло в отпаянной кювете контролируемым образом напылять островковую металлическую пленку на поверхность сапфира между электродами. Контроль за ростом пленки осуществлялся по ее проводимости на постоянном токе. Сопротивление пленки падало по мере роста ее плотности от 10 Гом до 120 Ком. Большинство экспериментов проведено с пленками, сопротивление которых составляло 1–7 Гом, поскольку это полностью исключало возможность прямой «закоротки» электродов (сопротивление проводника из металлического натрия длиной 1 см и диаметром 10 нм составляет 10 Мом). При работе с такими пленками необходимо было подавать напряжения между электродами не более 15 В для избежания разрушения электродов. При таких напряжениях ток проводимости составлял 10^{-10} – 10^{-9} А.

В ходе эксперимента была снята вольт-амперная характеристика пленки: зависимость тока проводимости от приложенного к ОМП напряжения подчиняется закону Ома при малых напряжениях (до 10 В), но отклоняется от этого закона (сверхлинейная зависимость) при напряжениях больших 10 В.

Частотная характеристика ОМП, представленная на рис. 1 показывает, что сопротивление пленки падает с ростом частоты тока, т.е. проявляет емкостной характер.

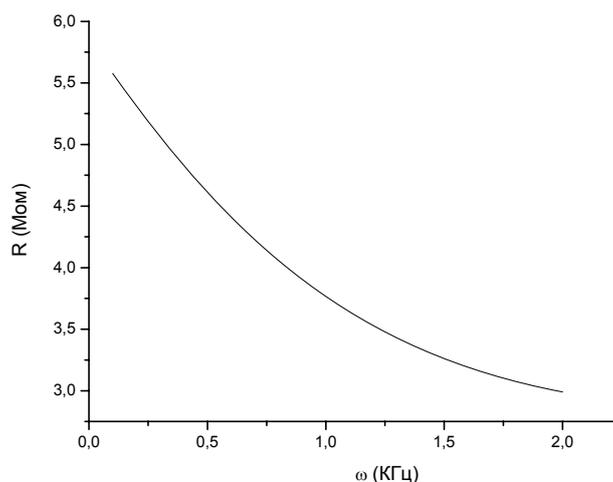


Рис. 1. График зависимости сопротивления пленки от частоты тока

При подаче на ОМП ступеньки напряжения наблюдался небольшой мгновенный рост тока и медленное его нарастание с характерным временем 10^{-3} сек до стационарного значения. Из этого следует, что имеет место запаздывание при прохождении тока в пленке.

Было замечено, что нагрев пленки приводит к падению ее сопротивления, что существенно отличает ее от обычных металлических проводников.

Обнаружено поразительно сильное влияние на сопротивление пленки ее освещения – даже дневной свет увеличивает проводимость пленки более чем на порядок. Для исследования этого эффекта были сняты зависимости проводимости пленки от длины волны падающего излучения для различных напряжений, приложенных к пленке (рис. 2).

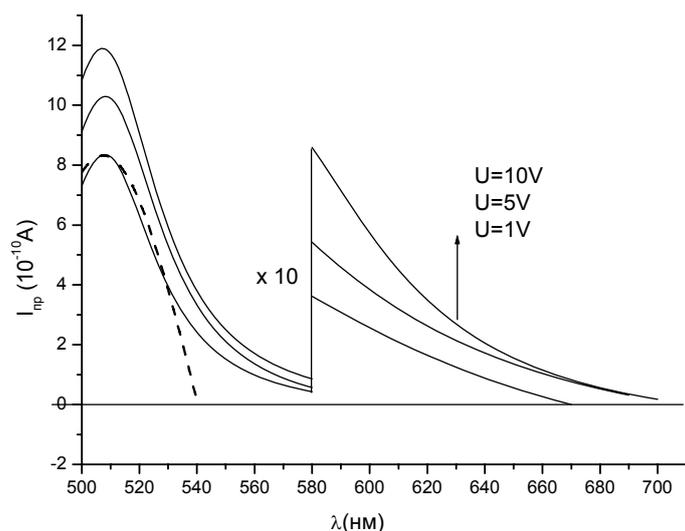


Рис. 2. Графики зависимости проводимости от длины волны падающего света для различных напряжений на пленке (--- – зависимость тока фотоэлектронной эмиссии от длины волны)

Получено, что наибольшее воздействие производит излучение, вызывающее внешний фотоэффект с поверхности металлических частиц. Спектр фотоэлектронной эмиссии металлической пленки оказался подобным спектру для сплошного металлического слоя. Полученное сходство объясняется достаточно большим (50–100 нм) размером частиц, составляющих пленку. Вместе с тем, заметное действие на проводимость пленки оказывает и излучение за «красной границей» фотоэффекта ($\lambda = 540$ нм) вплоть до $\lambda = 680$ нм, где внешнего фотоэффекта нет. При подаче большого постоянного напряжения (порядка 100 В) на третий электрод на проводимость пленки влияет только излучение, не вызывающее внешний фотоэффект.

Модель прыжковой проводимости островковой металлической пленки. Действие оптического излучения на проводимость пленки

Все полученные экспериментальные результаты качественно объясняются моделью прыжковой проводимости островковой металлической пленки, где электроны переходят с островка на островок посредством туннелирования электронов через разделяющий их вакуумный промежуток [5–7].

В полученной методом вакуумного напыления натриевой пленке размер островков составлял 50–100 нм. При этом влияние их размера на уровень Ферми незначительно. Но уровни Ферми заряженных островков могут отличаться существенно. Электроны с катода попадают на прилежащие островки, затем переходят на соседние островки с меньшей энергией Ферми. Вероятность таких туннельных переходов определяется высотой энергетического барьера, который в нашем случае равен работе выхода электрона из островка. Эта величина несколько уменьшается при нагреве ОМП, что и объясняет температурную зависимость сопротивления пленки, а также увеличению электрического напряжения между соседними островками.

При напряженностях в ОМП < 5 В/см выполняется закон Ома. При увеличении напряженности наблюдалась сверхлинейная ВАХ, обусловленная, вероятно, нагревом и вторичной электронно-ионной эмиссией в ОМП.

В предложенной модели ОМП характеризуется емкостью C (размером) островков и L – средним расстоянием между ними.

Частота переходов электронов между соседними островками $\nu = wv_F / C$ (v_F – скорость Ферми) определяется частотой ударов электрона о поверхность островка $v_F / C = 10^8 / 10^{-5} = 10^{13} \text{ с}^{-1}$ (радиус частиц 100 нм) и вероятностью $w = e^{-kL}$ подбарьерного ухода, где $k \sim 10^8 \text{ см}^{-1}$ – обратная длина де-бройлевской волны под барьером. Электроны переходят с островка с большим потенциалом (большим q_n) на свободные уровни соседнего островка с меньшим потенциалом (меньшим q_m). Возможность такого перехода имеется у $N_0 \Delta q_n / C \varepsilon_F$ электронов соседних островков, где $\Delta q_n / \varepsilon_F$ – отношение разницы зарядов соседних островков к энергии Ферми. При большом числе островков $N \sim 10^5$, находящихся на расстоянии L друг от друга, для данной модели получается уравнение переноса заряда по цепи:

$$\frac{dq}{d\tau} = \frac{d^2q}{dx^2},$$

в котором время $\tau = \Omega t$ и координата x (в единицах L/N) – безразмерные. Величина $\Omega = \nu N_0 / C \varepsilon_F = w v_F N_0 e / C^2 \varepsilon_F \approx 10^{16} w \text{ [с}^{-1}\text{]}$. Для стационарного случая из решения этого уравнения получается ток:

$$j = \Omega Q / N \approx 10^{13} w \text{ [е/с]},$$

где $QC \approx 1 \text{ В}$ – напряжение, приложенное к цепочке островков.

В эксперименте ток 10^{-10} А проходит по пленке, состоящей из $\sim 10^{11}$ островков. Если считать, что они образуют 10^6 цепочек, то ток $10^{-16} \text{ А} \approx 10^3 \text{ е/с}$ идет по одной цепочке. Из этого получается $w = 10^{-10} = e^{-23}$ и $L = 2.3 \text{ нм}$.

Эксперимент показывает, что имеется запаздывание в прохождении тока в пленке. Характерное время запаздывания $\sim 10^{-3} \text{ с}$. Естественно связать запаздывание с характерным масштабом $\tau = 1$ или частотой Ω . При $\Omega = 10^{16} w = 10^3$ получается $w = e^{-30}$ и $L = 3 \text{ нм}$. Отличие этого результата от предыдущего можно связать с сильной дисперсией в реальной пленке величин Ω , которая влияет на протекание постоянного тока слабее, чем на протекание переменного.

Освещение пленки вызывает внешний или внутренний фотоэффект в зависимости от энергии фотонов. Внешний фотоэффект дает дополнительно к туннельному току направленный перенос электронов к аноду. При внутреннем фотоэффекте происходит переходом электронов в натрии из зоны проводимости в верхнюю энергетическую зону, если энергия фотонов превышает 2.1 эв. Вероятность туннелирования возбужденных электронов в соседний островок значительно возрастает по причине уменьшения для них энергетического барьера перехода. Однако из-за быстрой релаксации возбужденных электронов их оказывается немного, и поэтому действие на сопротивление пленки излучения с энергией фотонов ниже «красной границы», хотя и проявляется, но не так сильно, как в случае внешнего фотоэффекта.

Заключение

В настоящей работе проведено систематическое исследование электрических и фотоэлектронных параметров островковой металлической пленки натрия, напыленной на поверхность сапфировой подложки.

Измерены вольт-амперные и переходные характеристики пленок.

Обнаружено сильное влияние освещения на проводимость пленки.

В результате эксперимента было выяснено, что наибольшее воздействие на проводимость пленки производит излучение, вызывающее внешний фотоэффект с поверхности металлических наночастиц.

Обнаружен эффект заметного влияния на проводимость пленки излучения за «красной границей» фотоэффекта.

Полученные результаты интерпретированы с помощью модели прыжковой проводимости, в которой электроны переходят между островками посредством туннелирования. В этой модели воздействие оптического излучения увеличивает проводимость пленки либо с помощью внешнего, либо внутреннего фотоэффекта, который резко увеличивает скорость туннелирования.

Литература

1. Гапоненко С.В., Розанов Н.Н., Ивченко Е.Л., Федоров А.В., Бонч-Бруевич А.М., Вартамян Т.А., Пржибельский С. Г. Оптика наноструктур. СПб: Недра, 2005. 326 с.
2. Harry A. Atwater. Guiding light // SPIE's OE, July, 2002. P. 42–44.
3. R.D. Fedorovich, A.G. Naumovets, P.M. Tomchuk. Electron and light emission from island metal films and generation of hot electrons in nanoparticles. // Physics Reports 328, (2000). P. 73–179.
4. Татаренко Н.И., Кравченко В.Ф. Автоэмиссионные наноструктуры и приборы на их основе. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. 192 с.
5. Драгунов В.П., Неизвестный И.Г., Гридчин В.А. Основы нанoeлектроники. М.: Логос, 2006. 496 с.
6. Борзяк П.Г., Кулюпин Ю.А. Электронные процессы в островковых металлических пленках. Киев: Наукова думка, 1980.
7. Оура К., Лифшиц В.Г., Саранин А.А., Зотов А.В., Катаяма М. Введение в физику поверхности. М: Наука, 2006. 490 с.

ЗАВИСИМОСТЬ МЕХАНИЗМА ВЛИЯНИЯ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ НА СПЕКТРЫ ГЕРМАНИЯ ОТ КОНЦЕНТРАЦИИ ЭЛЕКТРОНОВ

Е.Н. Рошак, П.С Ширшнев

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор А.К. Пржевуский

Исследовалось влияние пластической деформации на спектр поглощения германия с исходной концентрацией электронов 0,3–15 Ом·см. Механизм действия деформации зависит от двух факторов: от исходной концентрации электронов и величины деформации.

Исследования влияния пластической деформации на спектр поглощения кристаллов германия являются актуальными в практическом аспекте в связи с развитием новых технологий получения деталей методом высокотемпературного прессования [1]. Кроме того, эти вопросы практически не исследованы в фундаментальном аспекте.

Хотя германий и является одним из наиболее исследованных материалов, в подавляющем числе работ изучались только его электрические свойства. Исследования германия как оптического материала немногочисленны, хотя его оптические свойства (область пропускания ~ 2–12 мкм) уникальны. Особенность германия – в том, что его пропускание в «рабочей области» определяется, в основном, поглощением свободных носителей (электронов и дырок). Поэтому существует зависимость между коэффициентом поглощения и электрическими параметрами [2–6]. Бишоп и Гибсон предложили простую схему, описывающую эту зависимость [2]. В этой схеме произведение концентрации электронов N_e и дырок N_h являются константой, зависящий только от температуры T и ширины запрещенной зоны E_g , и не зависящей от того, собственный проводник, или допированный:

$$N_e \cdot N_h = C(T, E_g). \quad (1)$$

Это соотношение широко используется при анализе полупроводников и получило наименование «закона действующих масс» по сходству его внешнего вида с химическим законом [7].

Нами было предпринято исследование влияния пластической деформации на спектр поглощения кристаллов германия с разной исходной концентрацией электронов, соответствующее удельному сопротивлению 0,3–15 Ом·см. Оказалось, что для образцов германия с удельным сопротивлением 5–15 Ом·см деформация 4,5–6,5 % сильно меняет спектр поглощения (рис. 1). При этом *n*-тип проводимости трансформируется в *p*-тип [8–10]. Факт конверсии может быть объяснен тем, что наводимые пластической деформации дислокации обладают акцепторными свойствами. Поглощение дырок больше электронов, поэтому поглощение в германии *p*-типа больше, чем поглощение в материале *n*-типа. Величина наведенной пластической деформацией дырочного поглощения тем больше, чем больше исходная концентрация при одинаковой степени деформации 4,5 % (рис. 1). Нами было установлено, что зависимости коэффициента поглощения от электрических параметров для этих образцов полностью описываются схемой Бишоп и Гибсона, базирующейся на формуле 1.

При дальнейшем исследовании кристаллов германия с большей исходной концентрацией электронов, соответствующей удельному сопротивлению 0,37–2,06 Ом·см (*n*-тип), были установлено следующее. Пластическая деформация приводит к увеличению сопротивления, к увеличению коэффициента поглощения, и при этом тип проводимости сохраняется (рис. 2). Этот факт согласуются с литературными данными о действии деформации на электрические свойства, согласно которым образцы германия *n*-типа с различным легированием после деформации изменяют тип проводимости на дырочный (конвертируют) при различных значениях степени деформации ($\delta < 1\%$ при $N_d \sim 10^{12} \text{ см}^{-3}$ и $\delta \sim 20\%$ при $N_d = 1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ [11]).

Физически это понятно. Образцы *n*-типа с малым сопротивлением имеют большую плотность свободных электронов. Чтобы их связать на акцепторы, нужно получить очень большое число дислокаций.

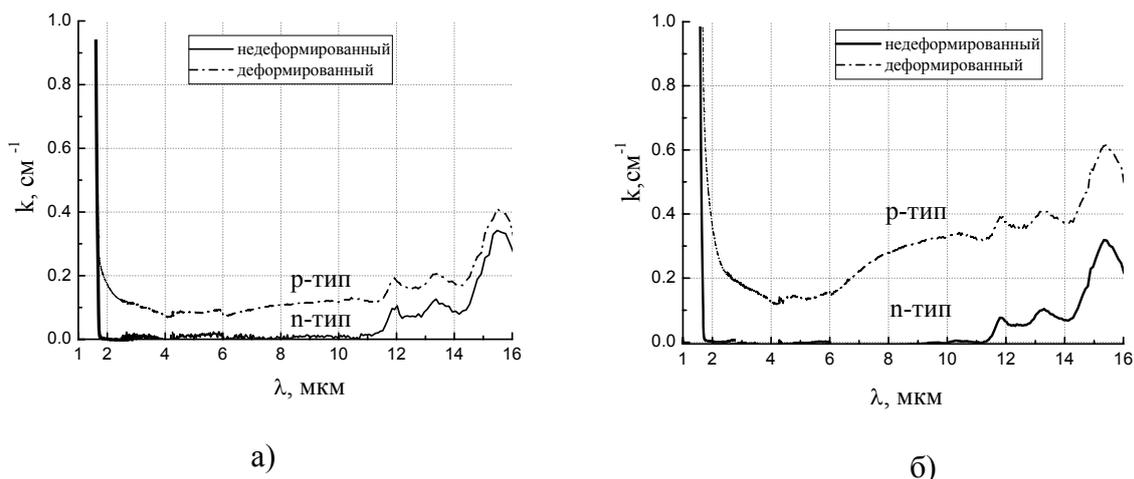


Рис. 1. Влияние пластической деформации на спектр поглощения германия. Степень деформации 4,5 %. Исходное удельное сопротивление а) 5,5 Ом·см, б) 7,5 Ом·см. Конверсия типа проводимости

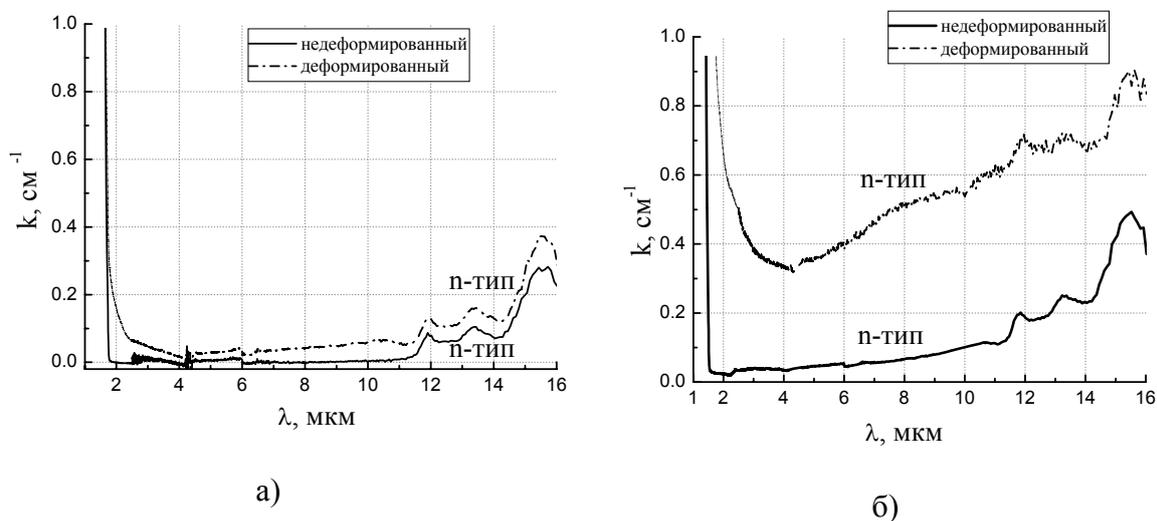


Рис. 2. Влияние пластической деформации на спектр поглощения германия. Исходное удельное сопротивление а) 2,06 Ом·см, б) 0,39 Ом·см. Степень деформации а) 4,5 %, б) 13 %. Тип проводимости не изменился

В отличие от результатов при пластической деформации слабо легированных образцов (5–15 Ом·см), данные, полученные для образцов, исходно сильно легированных, в условиях большой деформации уже не описываются схемой Бишопа и Гипсона. Таким образом, для этого диапазона легирования возможно существование образцов с одинаковыми значениями электрических параметров и сильно различающимися спектрами поглощения. Примеры данных для таких образцов приведены на рис. 2. (На рис. 2а представлен спектр поглощения недеформированного образца германия n-типа с удельным сопротивлением 2,06 Ом·см, и на рис. 2б представлен другой контур спектра поглощения сильнодеформированного германия со сходными электрическими параметрами: n-типа, удельным сопротивлением 2,0 Ом·см).

Для анализа результатов, полученных для большой величины деформации и высокой исходной концентрации электронов, необходимо обратиться к сложной электрической модели дислокации, подробно рассматриваемой в [12]. Эта модель исходит из представлений о дислокации в виде заряженной нити, заряды которой возникают в результате разрыва химических связей. Нить окружена областью пространственного заряда противоположного знака. В результате дислокация образует структуры в виде трубок, которые в литературе получили название «трубки Рида». При малых деформациях

циях носители движутся вне дислокационных трубок, при увеличении деформации процент носителей движущихся внутри трубок сильно увеличивается, и при больших деформациях движение происходит в основном в трубках. Эффект очень чувствителен к величине деформации.

В этой модели приведенные выше результаты, когда при сходстве электрических параметров существуют различные спектры, могут быть объяснены разным механизмом проводимости. В одном случае электроны распространяются в свободном пространстве, в другом значительная часть электронов распространяются по трубкам, а другой частью эти трубки мешают распространяться. Материал получается электрически неоднородным. В настоящее время подробная непротиворечивая теория, описывающая электрические свойства дислокаций, отсутствует, несмотря на то, что работ в этом направлении было очень много.

Выводы

1. Механизм действие пластической деформации на спектры свободных носителей в основном определяется двумя параметрами – исходной концентрацией носителей и величиной пластической деформации.
2. В случае деформации образцов германия с малой исходной концентрацией электронов выполняется закон действующих масс: тип проводимости и величина сопротивления полностью определяет спектр.
3. Для образцов с большой исходной концентрацией электронов при больших значениях пластической деформации материал становится существенно неоднородным: проводимость делится на проводимость вдоль дислокаций и вне дислокаций. Свойства носителей для этих двух вариантов проводимости различаются, в частности, они должны по-разному поглощать свет.

Литература

1. Афанасьев И.И., Ветров В.Н., Игнатенков Б.А. и др. Способ получения оптических линз. Патент РФ 1773956, 1993.
2. Bishop P.J., Gibson A.F. Absorption coefficient of germanium at 10,6 mkm // *Appl. Opt.* 1973. V. 12. P. 2549–2550.
3. Capron E.D., Brill O.L. Absorption coefficient as a function of resistance for optical germanium at 10,6 mkm. // *Appl. Opt.* 1973. V. 12. P. 569–572.
4. Hutchinson C.J., Lewis C., Savage J.A., Pitt A. Surface and bulk absorption in germanium at 10,6 mkm. // *Appl. Opt.* 1982. V. 21. P. 1490–1495.
5. Hass M., Bendow B. Residual absorption in infrared materials. // *Appl. Opt.* 1977. V. 16. P. 2882–2890.
6. Маколкина Е.Н., Пржеvusкий А.К. Влияние структурных дефектов на оптические свойства кристаллов германия. // *Оптический журнал.* 2003. Т. 70. №11. С. 64–67.
7. Киттель Ч. Введение в теорию твердого тела. М.: Наука, 1978.
8. Lipson H.G., Burstein E. and Smith P.L. Optical properties of plastically deformed germanium // *Phys. Rev.* 1955. V. 99. P. 444–445.
9. Маколкина Е.Н. Влияние пластической деформации на спектр поглощения кристаллов германия. / V Междунар. конф. молодых ученых и специалистов «Оптика-2005» (Санкт-Петербург, 21–24 октября 2005г.): Тез. докл. СПб, 2005, С. 198–199
10. Пржеvusкий А.К., Маколкина Е.Н. Влияние пластической деформации на спектр поглощения кристаллов германия. // *Оптический журнал.* 2007. Т. 74. №2. С. 73–77.
11. Осипьян Ю.А. Электронные свойства дислокаций в полупроводниках. М: Эдиториал УРСС, 2000, 320 с.
12. Матаре Г. Электроника дефектов в полупроводниках. М: Мир, 1974, 400 с.

ОЦЕНКА ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПО РАЗМЕРАМ ЧАСТИЦ В УГЛЕРОДНЫХ НАНОКОМПОЗИТАХ МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЙНИЯ

Е.А. Уханова

Научный руководитель – к.ф.-м.н., доцент А.В. Смирнов

На модельных кривых протестирован метод оценки функции распределения для полидисперсной системы сферических частиц, основанный на прямом интегральном преобразовании индикатрисы малоуглового рентгеновского рассеяния. Показана его эффективность, проверена устойчивость метода к статистическим шумам и проведена оценка погрешности, связанной с ограниченностью экспериментальной кривой рассеяния. С помощью рассмотренного метода получены функции распределения по размерам частиц для композитных материалов, образованных наноразмерными алмазными частицами в пироуглеродной матрице. Обнаружена корреляция функции распределения по размерам частиц с толщиной пироуглеродного слоя.

Введение

Малоугловое рентгеновское рассеяние (МУРР) широко используется для изучения надмолекулярной структуры неоднородностей вещества (частиц, микропор, инородных включений и т.д.). Теоретические основы МУРР были заложены в работах Гинье, Порода, Дебая, Кратки [1,2]. МУРР позволяет получить прямую структурную информацию в диапазоне размеров $10\text{--}10^4 \text{ \AA}$ [3]. Для системы одинаковых невзаимодействующих частиц метод позволяет определить размеры и форму этих частиц.

В случае полидисперсной системы ограничиваются обычно нахождением некоторых средних характеристик их размеров. Такие усредненные характеристики не дают достаточной информации о полидисперсной системе, так как одному и тому же среднему значению параметра может соответствовать множество распределений. Предпочтительно решение более сложной задачи – оценки функции распределения частиц по размерам. Для расчета функции распределения частиц по размерам необходимо иметь индикатрису рассеяния в достаточно широком интервале углов рассеяния, часто недоступном экспериментально. Поэтому в работе [4] был разработан метод нахождения функции распределения для системы удаленных друг от друга однородных сферических частиц, существенной частью которого является отыскание правильной асимптотики индикатрисы МУРР за границей экспериментального диапазона. В данной работе этот метод опробован для модельных функций распределения, в частности, близких к тем, которые получаются для обсуждаемых ниже композитных материалов.

В последние годы особое внимание уделяется наноматериалам, обладающим целым рядом уникальных свойств. Объектом настоящего исследования является ряд созданных в ФГУП «Центральный научно-исследовательский институт материалов» композитов, образованных остовом из спрессованных наноразмерных частиц кристаллического углерода в форме алмаза, на который из газовой фазы осаждается слой пироуглерода (NDC – nanodiamond compose) [5].

Такие материалы обладают высокой пористостью (до 72 % пустого пространства) и малым коэффициентом поглощения для рентгеновских лучей ($\lambda = 1.54 \text{ \AA}$, $\text{CuK}\alpha$), что позволяет получать интенсивные индикатрисы МУРР. В то же время разброс размеров и возможное несовершенство формы частиц приводят к созданию неупорядоченной аморфной структуры. Последнее обстоятельство позволяет надеяться на отсутствие заметного вклада межчастичной интерференции рассеянного излучения и оправдывает применение методов анализа индикатрис МУРР, разработанных для разупорядоченных систем.

Постановка задачи

В данной работе были поставлены следующие задачи:

- протестировать метод на модельных функциях распределения;
- подтвердить эффективность метода и найти ограничения, накладываемые обрывом экспериментальной кривой и погрешностью эксперимента;
- найти функции распределения частиц по размерам для образцов наноалмазного композитного материала.

Объектом исследования является ряд образцов NDC0, NDC10, NDC20, NDC30, NDC40, произведенных из приблизительно монодисперсных частиц с разной толщиной пироуглеродного слоя: 0, 2, 4, 6, 8 Å, соответственно. Кроме того, исследовался композит, обозначаемый производителем МС50. Индикатрисы МУРР для образцов были получены на линии $\text{CuK}\alpha$ с помощью камеры Кратки [6,7]. Коллимационные искажения экспериментальной индикатрисы были исправлены в соответствии с методикой, изложенной в работе [8].

Описание метода

Пусть $I(q)$ – индикатриса МУРР [7], $q = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \frac{\theta}{2} \approx \frac{2\pi}{\lambda} \theta$ – модуль вектора рассеяния, θ – угол рассеяния. Функция распределения по размерам r сферических частиц может быть найдена следующим интегральным преобразованием [1]

$$\rho(r) = \frac{1}{\pi^3 \delta^2 r^2} \int_0^\infty [q^4 I(q) - C] \alpha(qr) dq, \quad (1)$$

где δ – разность электронных плотностей частиц и их окружения, $C = \lim_{q \rightarrow \infty} [q^4 I(q)]$, а вспомогательная функция в подынтегральном выражении имеет вид

$$\alpha(qr) = \cos(qr) \left(1 - \frac{8}{q^2 r^2} \right) - \frac{4 \sin(qr)}{qr} \left(1 - \frac{2}{q^2 r^2} \right). \quad (2)$$

Для компьютерного моделирования δ в дальнейшем полагается равным единице. Формула (1) строго справедлива, если: а) образец содержит только сферические частицы, б) кривая рассеяния свободна от интерференционных эффектов, в) индикатриса МУРР при «больших» значениях модуля вектора рассеяния убывает пропорционально q^{-4} .

Экспериментальная индикатриса измеряется в диапазоне от 0 до θ_{\max} . (θ_{\max} – самое большое из доступных значений угла). Предполагается, что в области $q \geq q_{\max} = \frac{2\pi}{\lambda} \theta_{\max}$ функция $\beta(q) = [q^4 I(q) - C]$ имеет вид $Aq^{-2} + Bq^{-4}$, где коэффициенты A и B находятся из экспериментальных данных с учетом требования непрерывности характеристической функции системы и ее производной. Основной вклад в восстановленную функцию распределения $\rho_1(r)$ дает интегрирование по экспериментальной области $q \in [0, q_{\max}]$:

$$\rho_1(r) = \int_0^{q_{\max}} I(q) \alpha(q, r) dq. \quad (3)$$

Постоянные A , B , C определяются по двум точкам экспериментальной индикатрисы в области $q < q_{\max}$ рассеивающей системы. Они находятся из уравнений:

$$A = E_1(x^4 - q_{\max}^4) - E_2(x^4 + 3q_{\max}^4) + 4E_3 q_{\max}^4, \quad (4)$$

$$B = E_1(x^2 q_{\max}^4 - q_{\max}^2 x^4) + 3E_2(q_{\max}^2 x^4 + x^2 q_{\max}^4) - 6E_3 q_{\max}^6, \quad (5)$$

$$C = E_1(q_{\max}^2 - x^2) - E_2(x^2 + 3q_{\max}^2) + 2E_3 q_{\max}^2, \quad (6)$$

где введены вспомогательные параметры

$$E_0 = [2q_{\max}^2 x^4 + 4q_{\max}^4 x^2 - 6q_{\max}^6]^{-1}, \quad (7)$$

$$E_1 = -3E_0 q_{\max}^3 \int_0^{q_{\max}} q^4 I(q) dq, \quad (8)$$

$$E_2 = E_0 q_{\max}^8 I(q_{\max}), \quad (9)$$

$$E_3 = E_0 x^8 I(q), \quad (10)$$

q_{\max} и x – максимальное и близкое к максимальному значение модуля вектора рассеяния. Поправочный вклад $\rho_2(r)$ в интеграл (1) от области $q > q_{\max}$ определяется постоянными А и В:

$$\rho_2(r) = \frac{1}{\pi^3 r^3} [A \cdot r \cdot D_a(q_{\max} \cdot r) + B \cdot r^3 \cdot D_b(q_{\max} \cdot r)], \quad (11)$$

где

$$D_a(x) = 2 \frac{\sin x}{x^4} - 2 \frac{\cos x}{x^3} - \frac{\sin x}{x^2}, \quad (12)$$

$$D_b(x) = \frac{4 \sin x}{3x^6} - \frac{4 \cos x}{3x^5} - \frac{2 \sin x}{3x^4} + \frac{\cos x}{9x^3} - \frac{\sin x}{18x^2} - \frac{\cos x}{18x} - \frac{Si(x)}{18} + \frac{\pi}{36} \quad (13)$$

и

$$Si(x) = \int_0^x \frac{\sin x dx}{x}. \quad (14)$$

Полная функция распределения: $\rho(r) = \rho_1(r) + \rho_2(r)$

Тестирование метода

Проверка метода была проведена для тестовых функций распределения следующего вида:

- а) максвелловского типа $\rho_a^{(T)}(r) = A_1 r^2 \exp\left(\frac{-ra}{2}\right)$; $a = 0,08 \text{ \AA}^{-1}$; A_1 – нормировочная константа;
- б) композиции двух гауссоид $\rho_b^{(T)}(r) = A_2 \left(\exp\left(\frac{-(r-r_1)^2}{2\sigma^2}\right) + \exp\left(\frac{-(r-r_2)^2}{2\sigma^2}\right) \right)$, где $r_1 = 50 \text{ \AA}$, $r_2 = 100 \text{ \AA}$, $\sigma = 10 \text{ \AA}$, A_2 – нормировочная константа;
- в) таблично заданная функция $\rho_c^{(T)}(r)$, быстро спадающая в области относительно больших размеров.

Эти функции распределения представлены на рис. 1. Был выбран диапазон значений вектора рассеяния $q = 0.002 - 0.2 \text{ \AA}^{-1}$, соответствующий экспериментальным данным. Для значений вектора рассеяния из этого диапазона найдены модельные индикатрисы МУРР, каждая из которых является сверткой индикатрисы рассеяния $I_r(q)$ однородной сферической частицы размера r с функцией распределения частиц по размерам

$$\rho(r): I(q) = \int_0^{\infty} \rho(r) I_a(q) dr.$$

На рис. 2 представлены индикатрисы для тестовых функций распределений. С помощью рассмотренного метода для каждой индикатрисы восстанавливалась функция $\rho(r)$. Результат восстановления для функции максвелловского типа представлен на рис. 3.

Индикатриса была оборвана при $q > 0,2 \text{ \AA}^{-1}$, что соответствует брэгговским размерам $d \cong 30 \text{ \AA}$. Видно, что в диапазоне размеров $a \in [0, 40 \text{ \AA}]$ вклад поправочного слагаемого ρ_1 существенен. В области $a < 10 \text{ \AA}$ восстановленная функция заметно отличается от исходной.

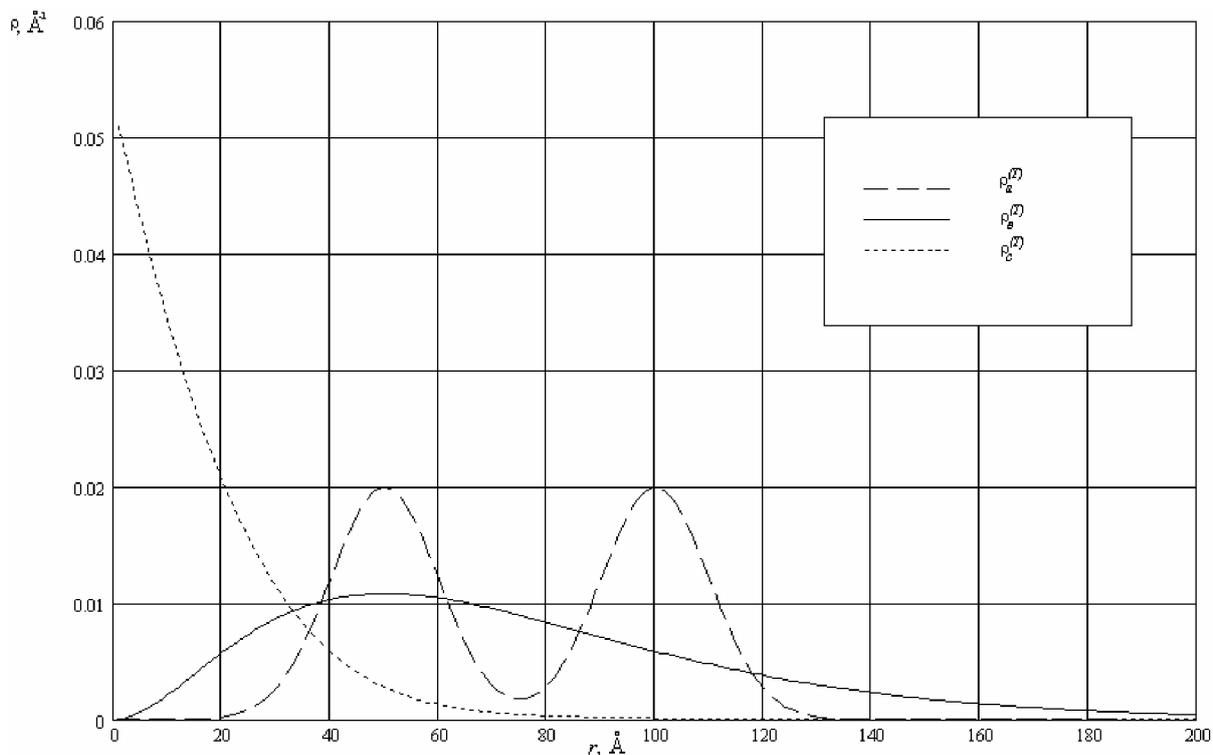


Рис. 1. Тестовые функции распределения частиц по размерам

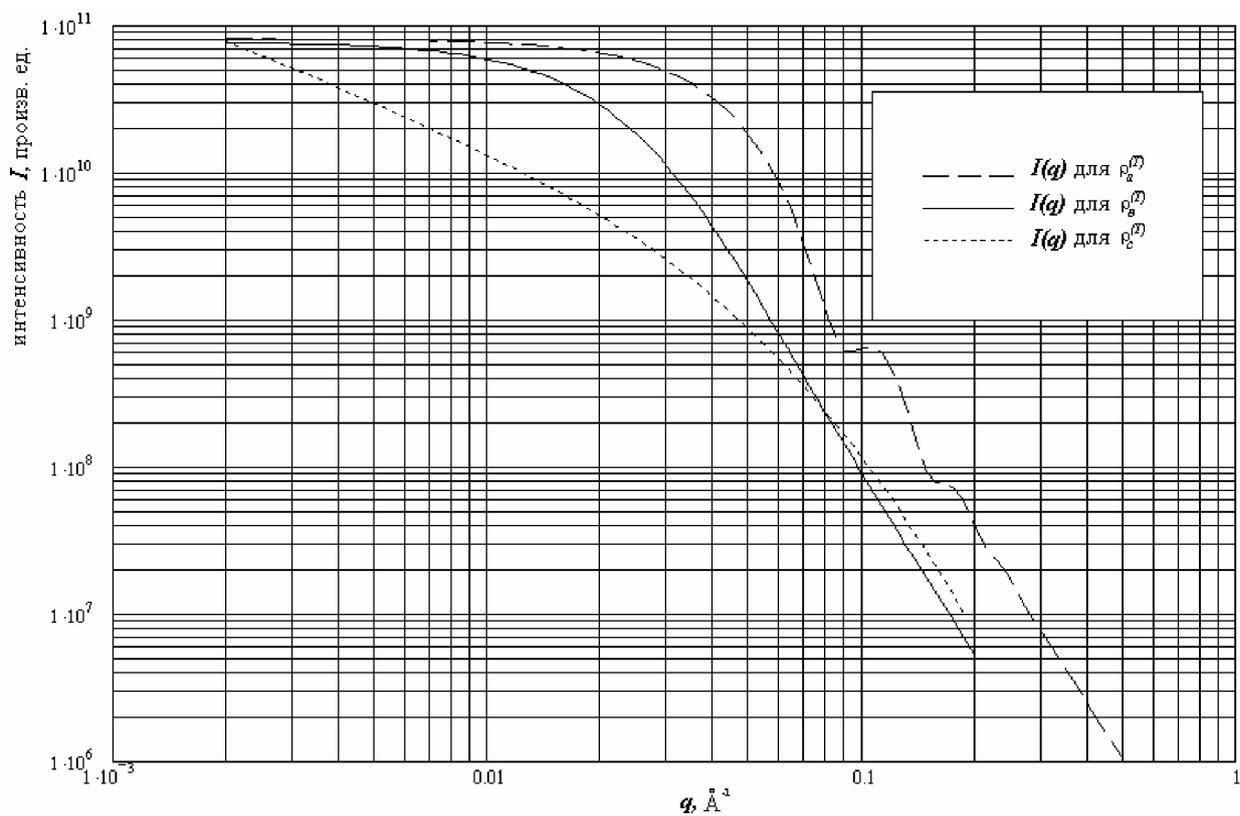


Рис. 2. Индикатрисы МУРР для тестовых распределений

Для проверки устойчивости метода к экспериментальным погрешностям в модельную индикатрису рассеяния для распределения максвелловского типа был внесен равномерно распределенный шум с дисперсией, пропорциональной \sqrt{I} . Результат восстановления приведен на рис. 4. Как видно из рисунка, небольшие видоизменения в найденной $\rho(r)$ произошли только в области 20 \AA и ниже.

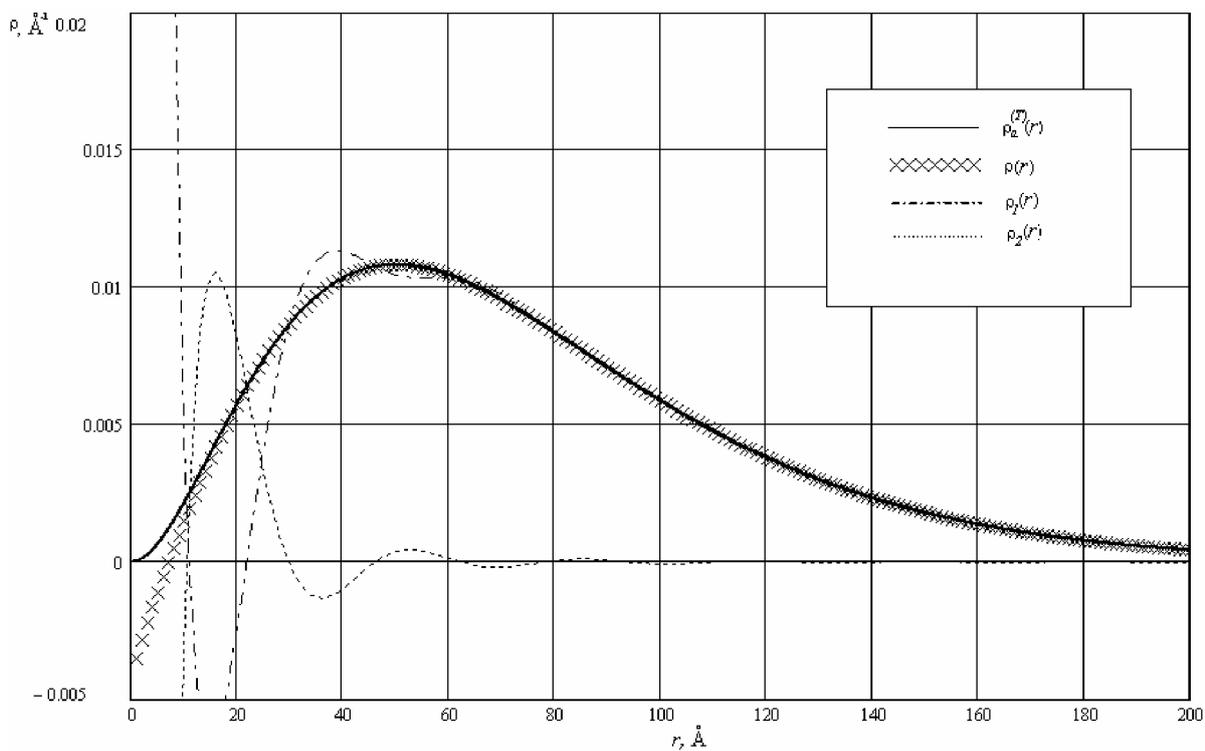


Рис. 3. Исходная тестовая функция $\rho_a^{(T)}(r)$ распределения максвелловского типа, восстановленная функция $\rho(r)$ и вклады $\rho_1(r)$ и $\rho_2(r)$

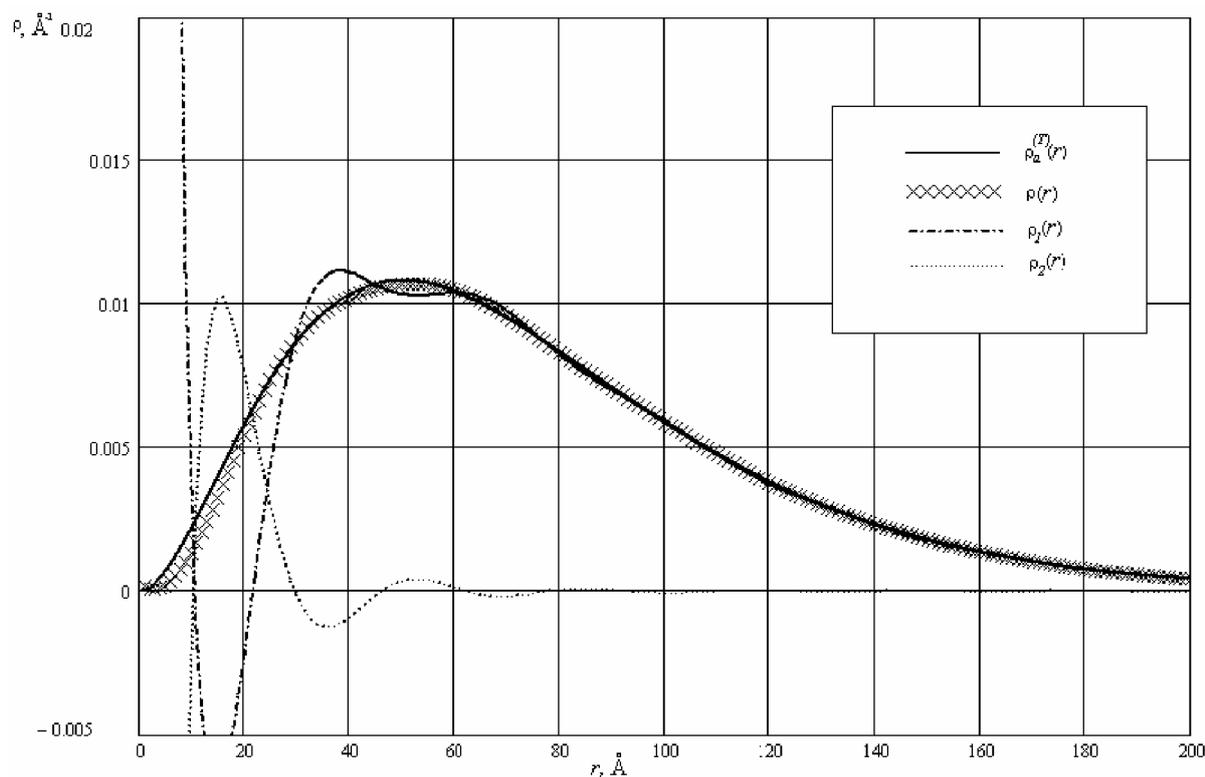


Рис. 4. Восстановление функции распределения максвелловского типа по «зашумленной» индикатрисе. Обозначения те же, что и на рис. 3

На рис. 5 вместе с функцией $\rho_b^{(T)}$ распределения, имеющей вид композиции двух гауссиан, приведены вклады $\rho_1(r)$, $\rho_2(r)$ и полная восстановленная функция $\rho(r)$.

Аналогичные результаты для третьей тестовой функции представлены в полулוגарифмическом масштабе на рис. 6. В случае двух гауссиан индикатриса асимптотиче-

ски приближается к закону $1/q^4$ при q , больших по сравнению с индикатрисой для распределения максвелловского типа. Поэтому использовалась $I(q)$, рассчитанная до $q_{\max} = 0,5 \text{ \AA}^{-1}$ (брэгговский размер $d_{\text{Бр}} = 12 \text{ \AA}$). Видно, что результат восстановления вполне удовлетворителен во всем диапазоне q , причем для $q \geq 20 \text{ \AA}^{-1}$ поправочный вклад $\rho_2(r)$ мал, и восстановленная функция практически совпадает с основным вкладом $\rho_c(r)$.

Индикатриса для третьей тестовой функции $\rho_c^{(T)}$ была оборвана при $q_{\max} = 0,2 \text{ \AA}^{-1}$ ($d_{\text{Бр}} \approx 30 \text{ \AA}$). Заметим, что для этой функции основная доля частиц имеет радиус меньше 30 \AA . При этом восстановленная функция $\rho_0(r)$ во всем рассмотренном диапазоне размеров $0 \leq r \leq 400 \text{ \AA}$ также удовлетворительно совпадает с исходной $\rho_c^{(T)}$. Отличительной особенностью работы метода в данном случае является то, что поправочный вклад $\rho_2(r)$ имеет одинаковую величину с основным вкладом $\rho_1(r)$ в диапазоне $0 \leq r \leq 20 \text{ \AA}$ и $r \geq 120 \text{ \AA}$.

Рассмотренный метод был использован для изучения частиц углеродных нанокomпозитов. Индикатрисы для образцов NDC00-NDC40, MC50 (рис. 7) были измерены в диапазоне $q = 0,002 \dots 0,2 \text{ \AA}^{-1}$ ($d_{\text{Бр}} = 30 \text{ \AA} \dots 3000 \text{ \AA}$). Все индикатрисы имеют приблизительно совпадающий начальный участок, но по-разному спадают в области больших значений q . Существенно, что характер спада систематически изменяется с номером образца NDC, отвечающим за процентное содержание слоя пироуглерода, и имеет существенно другой вид для образца MC50.

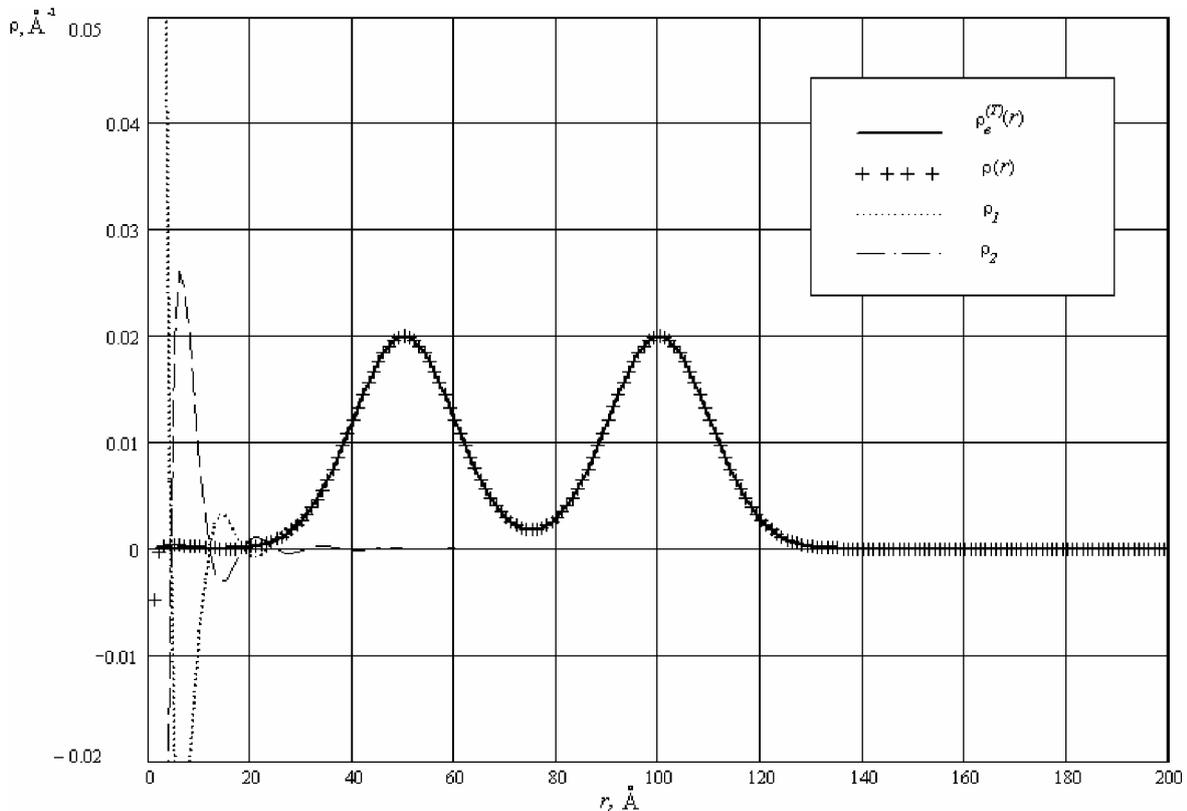


Рис. 5. Восстановленная функция для распределения в виде композиции двух гауссиан

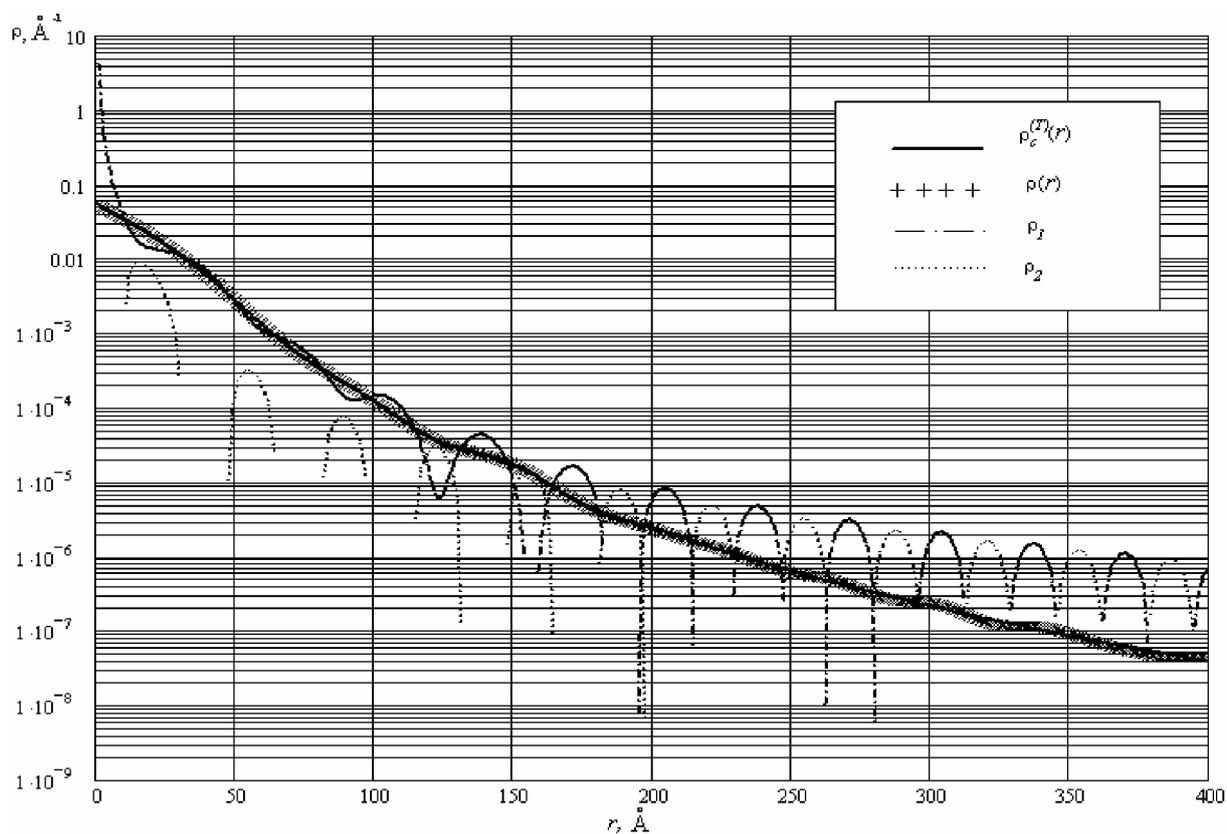


Рис. 6. Восстановленная функция для тестового распределения $\rho_c^{(T)}(r)$

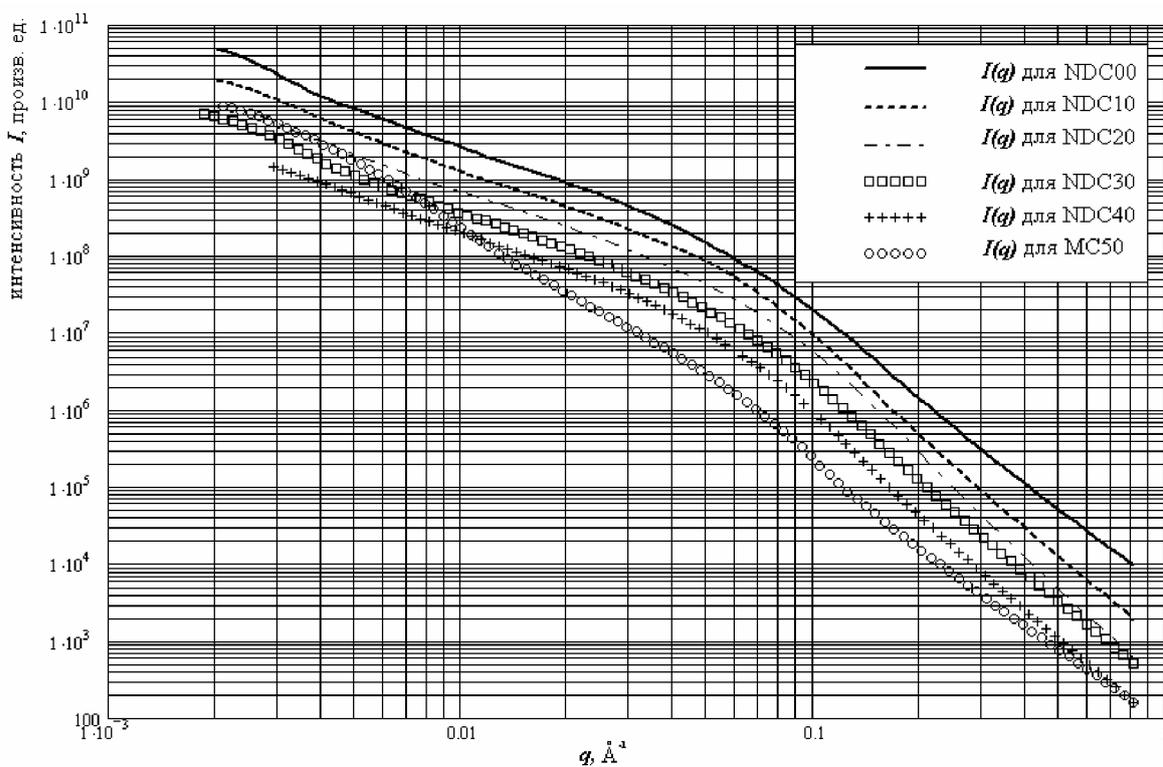


Рис. 7. Индикатрисы МУРР для образцов NDC00-NDC40, MC50

При приближении к q_{\max} каждая из индикатрис выходит на степенную зависимость близкую к $q^{-\alpha}$; $\alpha = 3,3-3,7$, при этом в двойном логарифмическом масштабе графики превращаются в линейные. Для уменьшения искажений, возникающих при внесе-

нии коллимационных поправок вблизи q_{\max} , каждая индикатриса дополнялась отрезком, являющимся в двойном логарифмическом масштабе прямолинейным продолжением экспериментальной индикатрисы в области $q = q_{\max} \dots 4q_{\max}$. После внесения коллимационных поправок в экспериментальную кривую рассеяния точки с $q \geq q_{\max}$ отбрасывались. Пересчитанные таким образом кривые рассеяния (точечные индикатрисы) для каждого экспериментального образца могли содержать постоянное слагаемое C_0 , обусловленное неоднородностью образца на молекулярном уровне [8]. Для дальнейшей обработки это слагаемое должно было быть исключено из $I(q)$. Постоянная C_0 была найдена на основе графика $q^4 I(q)$ в зависимости от q^4 по наклону прямолинейного участка вблизи q_{\max} . Точечная индикатриса после вычитания C_0 использовалась в процедуре (3)–(14) для отыскания функции распределения $\rho(r)$. При этом величина x и q_{\max} в формулах (4)–(10) подбирались вблизи правой границы экспериментального диапазона так, чтобы с одной стороны x находилось «достаточно» далеко от q_{\max} с другой стороны, чтобы график функции $\beta(q)$ совпадал в диапазоне $q = x - q_{\max}$ с предписываемым ей видом: $Aq^{-2} + Bq^{-4}$. При удачном выборе q_{\max} результирующая функция $\rho(r)$ не сильно изменялась при варьировании x в довольно широких пределах, и поправочный вклад $\rho_2(r)$ был относительно мал в области $r \geq 20 \text{ \AA}$.

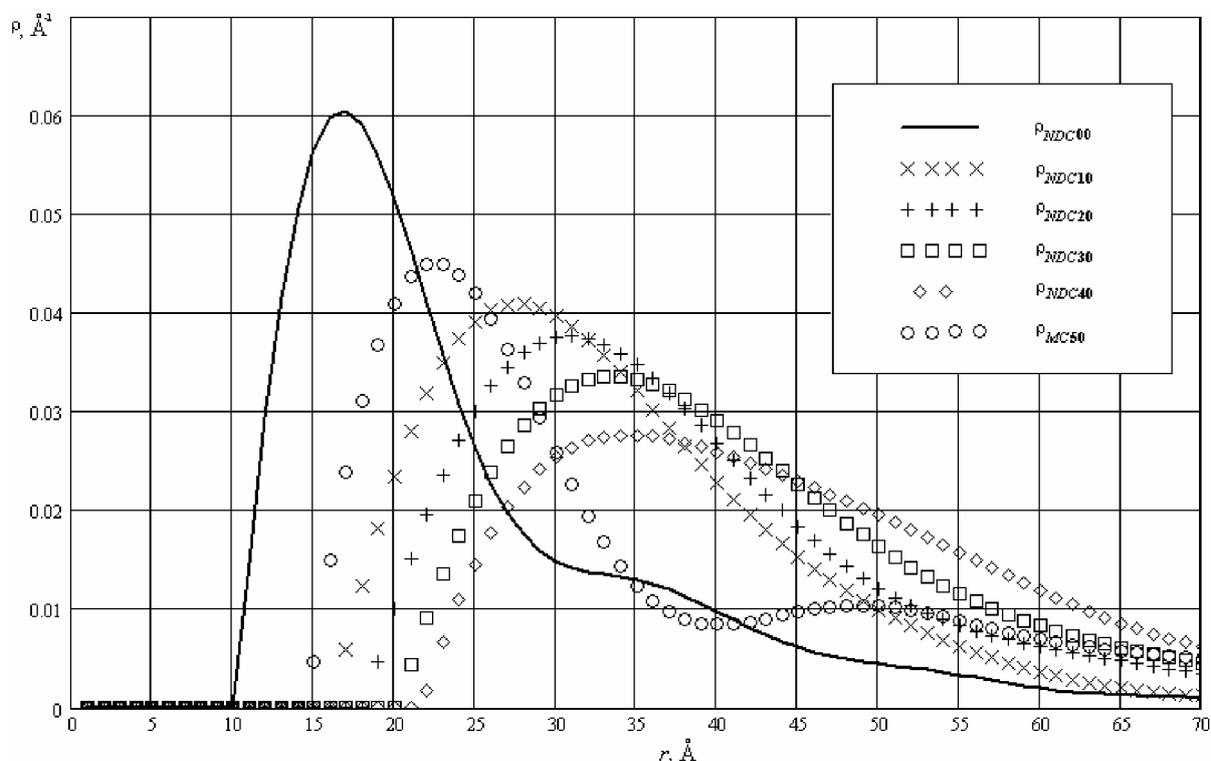


Рис. 8. Восстановленные нормированные функции распределения по размерам сферических частиц для образцов углеродных нанокompозитов

Полученные на основе описанного формулами (3)–(14) метода нормированные функции $\rho(r)$ приведены на рис. 8. У всех функций имеется начальный участок с отрицательными значениями, которые были заменены на нулевые при нормировке. В табл. 1 представлены значения диаметра r_{\max} , при котором $\rho(r)$ максимально, значения диаметров r_1, r_2 , в интервале между которыми $\rho(r) \geq 1/2\rho(r_{\max})$, а также ширина этого интервала Δr . В последнем столбце приведены средние толщины $d_{\text{пу}}$ пироуглеродного слоя по данным производителя. Для всех образцов NDC положение максимума и основной интервал r систематически расширяется и смещается в область больших r с увеличением номера образца. Распределение для образца MC50 имеет второй макси-

мум. Параметры первого максимума для этого образца имеют значения, промежуточные между аналогичными значениями для образцов NDC00-NDC10.

Образец	$r_{\max}, \text{Å}$	$r_1, \text{Å}$	$r_2, \text{Å}$	$\Delta r, \text{Å}$	$d_{\text{пу}}, \text{Å}$
NDC00	16,8	12,0	24,1	12,1	0
NDC10	27,8	19,4	41,4	22,0	2
NDC20	30,8	21,8	44,7	22,9	4
NDC30	33,5	23,8	49,6	25,8	6
NDC40	34,6	24,8	57,5	32,7	8
MC50	22,5 (49,0)	16,8*	31,1	14,3	4

Таблица 1. Полученные из данных МУРР параметры распределения по размерам частиц

Выводы

1. Для существенно разных тестовых функций распределения показана эффективность рассмотренного прямого метода нахождения $\rho(r)$.
2. На примере одной из модельных кривых показано, что метод достаточно устойчив к статистическим шумам.
3. Рассчитаны с помощью рассмотренного метода функции распределения по размерам частиц для образцов углеродного нанокompозита, определены их основные параметры (положение максимума и ширина).
4. Найденные функции распределения для образцов NDC с разным содержанием пироуглерода систематически изменяют свои параметры с увеличением толщины пироуглеродного слоя. Распределение «расплывается», одновременно смещаясь в область больших r .
5. Распределение для образца MC50 существенно отличается от всех NDC наличием максимума в области относительно больших r .

Литература

1. Guinier A., Fournet G. Small-Angle Scattering of X-rays. N.Y.: Willey, 1955.
2. Свергун Д.И., Фейгин Л.А. Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние, М: Наука, 1986.
3. Мельничук А.П., Волков С.А., Смирнов А.В. и др. Современные возможности компьютеризации малоуглового рентгеновского рефрактометра. // Известия вузов. Приборостроение. 1998. Т.41. №6. С. 50–53.
4. J.H. Letcher, P.W. Schmidt. Small-Angle X-Ray Scattering Determination of Particle-Diameter Distributions in Polydisperse suspensions of Spherical Particles. J.Appl. Phys., 1966, v.37, p. 649–655.
5. Гордеев С.К. Углеродные нанокompозиционные материалы из наноалмаза: получение и свойства. // Сверхтвердые материалы. 2002. №6.
6. Мельничук А.П., Прищепенок О.Б., Смирнов А.В., Федоров Б.А. Прецизионная юстировка камеры Краткого и программа первичной обработки данных рентгеновского малоуглового рассеяния. // Известия вузов. Приборостроение. Т.45. №7. С. 48–54.
7. Смирнов А.В., Сизиков В.С., Федоров Б.А. Решение обратной коллимационной задачи для рентгеновского малоуглового изотропного рассеяния с помощью сплайновых функций. // Известия вузов. Приборостроение. 2006. Т. 49. №1.
8. Vonk C.G. Investigation of non-ideal two-phase polymer. Structures by small-angle X-ray scattering. J. Appl. Cryst. 1973. V.6. №1. P. 81–86.

СЕЛЕКТИВНОЕ ИЗМЕНЕНИЕ РАЗМЕРОВ И ФОРМ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ С ПОМОЩЬЮ ПРОЦЕССА ФОТОАТОМНОЙ ЭМИССИИ И ФОТОДИФФУЗИИ АТОМОВ ПО ИХ ПОВЕРХНОСТИ

А.Е. Логунов

Научный руководитель – д.ф.-м.н., с.н.с. Т.А. Варгянн

Коллективные плазменные колебания в ансамблях металлических наночастиц на прозрачных диэлектрических подложках исследованы с помощью метода выжигания спектральных провалов. Размер и форма частиц изменялись под действием излучения, вызывающего фотоиспарение атомов и их диффузию по поверхности частиц. Определены времена релаксации индивидуальных мод плазменных колебаний в металлических наночастицах, моделируемых трехосными эллипсоидами. Дано теоретическое обоснование некоторых особенностей методики выжигания провалов вблизи красной границы фотоатомной эмиссии.

Введение

Физика низкоразмерных структур – актуальнейшая и наиболее динамично развивающаяся область современной физики твердого тела. Интерес к этой области связан как с принципиально новыми фундаментальными научными проблемами и физическими явлениями, так и с перспективами создания на основе уже открытых явлений совершенно новых квантовых устройств и систем с широкими функциональными возможностями для опто- и наноэлектроники, измерительной техники, информационных технологий нового поколения, средств связи и пр. [1].

Особое место среди наноразмерных структур простых веществ занимают металлические наночастицы, а также ансамбли металлических наночастиц – островковые металлические пленки. Пристальное внимание к ним объясняется особенностями их электронной структуры, с одной стороны, а с другой – относительной простотой их получения для экспериментальных исследований.

В наночастицах металла, имеющих конечные и достаточно малые размеры, обобществленные электроны находятся в ограниченном пространстве, определяемом областью расположения положительно заряженных ионов. Последние создают потенциальную яму с достаточно сложным профилем, в которой, следуя квантовой механике, образуется новая система дискретных уровней. Энергетический спектр обобществленных электронов определяется размерами и формой островка металла и взаимным расположением атомов в нем.

Делокализованные электроны в металлической наночастице определяют ее характер поведения в процессах взаимодействия с внешними полями. В этих процессах наиболее интересной особенностью, вызывающей в последнее время повышенный интерес экспериментаторов и теоретиков, оказались сильные коллективные эффекты в электронной системе, определяющие реакцию наночастицы на внешнее возмущение.

Оптические спектры металлических наночастиц, состоящих из золота, серебра или атомов щелочных металлов, изучены уже достаточно широко и определяются главным образом плазмонами, т.е. коллективными колебаниями свободных (проводящих) электронов, неразрывно связанных с покоящейся ионной решеткой. Коллективные электронные возбуждения в металлических частицах, имеющих нанометровые размеры, существенно отличаются от объемных коллективных возбуждений. Дело не только в том, что частота поверхностного плазмона, локализованного в такой частице, заметно отличается от частоты объемного плазмона. Металлический островок представляет собой систему из многих взаимодействующих частиц. Несмотря на то, что известны как частицы, образующие островок, так и силы взаимодействия между ними, теоретически предсказать электронные свойства островков очень сложно. Это связано с

тем, что в островке доля атомов, находящихся непосредственно на его поверхности, при уменьшении размеров островка становится очень большой. Откуда ясно, что свойства поверхности могут стать определяющими при исследовании многих физических явлений. Влияние [2] границ между металлом и внешней средой может приводить к смещению резонансной частоты, а также сказывается на динамике коллективных электронных возбуждений. Это приводит к зависимости времен дефазировки (а, значит, и добротности) коллективных колебаний электронов от формы и размеров частиц, а также от химического состава окружающей частицу среды. Кроме того, именно в малых частицах, размеры которых меньше длины волны воздействующего излучения, становится возможным непосредственное взаимодействие коллективной моды со свободными электромагнитными полями, приводящее к значительному (резонансному) локальному увеличению электрического поля в области, размеры которой сравнимы с размерами частицы. С одной стороны, это позволяет использовать оптические методы для изучения коллективных возбуждений в малых металлических частицах, а с другой – открывает обширные возможности для приложений. Так, например, резонансное усиление поля вблизи поверхности наночастиц металла находит применение в различных оптических приборах, таких как быстродействующие (гигагерцовые) фотоприемники, оптические переключатели [3], биофизические сенсоры [4], оптический пинцет [5].

Исследование релаксационных характеристик с помощью эффекта фотоатомной эмиссии

Известно, что спектральное положение плазмонных резонансов, а также их добротность, т.е. величина усиления поля вблизи частиц, зависят от размера и формы металлических частиц [6, 7]. Обычно напыляемые в условиях вакуума островковые пленки представляют набор частиц, размеры и форма которых изменяется в широком диапазоне. В результате спектр поглощения всего ансамбля частиц оказывается неоднородно уширенным, а его ширина значительно превышает однородную ширину плазмонных резонансов. Поскольку именно последняя величина определяет «качество» получаемых наноструктур, то встает задача разработки методов измерения этой величины. Общим подходом к решению данной проблемы в спектроскопии (атомов, молекул, оптических сред) является использование методов нелинейной оптики. К ним, в частности, относятся измерение спектра резонансной флуоресценции, метод фотонного эха, а также прожигание спектральных провалов [8].

До наших работ в этом направлении применялся только метод выжигания спектральных провалов с использованием резонансного термического испарения пленок [9, 10], который требует больших мощностей воздействующего на металлические частицы лазерного излучения и не свободен от недостатков. Во-первых, большие мощности излучения могут приводить к полевому уширению измеренных провалов. Во-вторых, экспоненциальная зависимость скорости термического испарения от интенсивности излучения может приводить к большим систематическим ошибкам измеряемых ширин. Кроме того, для заметного испарения частицы может потребоваться нагрев, превышающий температуру плавления материала, что приведет к изменению ее формы, а нежелательный перенос тепла по подложке может привести к испарению расположенных рядом с резонансными нерезонансных наночастиц.

Идея реализованного в настоящей работе метода модификации ансамбля металлических наночастиц, позволяющая избежать указанных недостатков и более надежно измерять однородную ширину плазменного резонанса, состоит в селективном уменьшении объема и изменении формы резонансных наночастиц за счет эффекта фотоатомной эмиссии [11].

Процесс фотоатомной эмиссии состоит в нетепловом испарении атомов металла под действием оптического излучения, возбуждающего частично локализованные электроны его поверхностных дефектов. Эффективность этого процесса определяется как интенсивностью оптического излучения, так и скоростью образования поверхностных дефектов. Для щелочных металлов при комнатной температуре последняя скорость достаточно велика, так что при используемых мощностях возбуждения концентрация дефектов практически не меняется.

Спектр действия фотоатомной эмиссии охватывает широкую спектральную полосу и распространяется на всю видимую, ИК- и УФ- области. Эффективность этого процесса существенно возрастает при резонансе воздействующего оптического излучения с плазменными колебаниями металлической наночастицы из-за усиления поля световой волны на ее поверхности. Поэтому излучение эффективно испаряет только малую долю частиц, а именно те частицы, плазменные возбуждения которых резонансны падающему излучению. В спектре экстинкции ансамбля частиц это проявлялось как появление провала (уменьшение поглощения) на частоте воздействия с шириной, определяемой временем релаксации плазменных колебаний, локализованных в наночастице.

Результаты эксперимента их обсуждение

В настоящей работе экспериментально исследовались спектральные характеристики островковых пленок натрия на поверхности сапфира, стекла и кварца, а также воздействие на них резонансного излучения. Островковые пленки создавались в запаянных вакуумированных кюветах посредством конденсации на холодном окне кюветы паров натрия, полученных нагреванием капли металла на стенке кюветы. Спектры экстинкции пленки снимались на спектрофотометре СФ-56.

Было обнаружено, что после напыления спектральные свойства пленок менялись в течение суток. «Старение» пленки объясняется переходом ее частиц из начального неравновесного в более стабильное состояние. При старении пленок их спектры экстинкции менялись заметно, а интегральная по спектру экстинкция почти не менялась, что указывает на неизменность количества металла в них. Для ускорения старения и стабилизации характеристик пленок перед измерениями они отжигались 6 минут при 60 °С, что ниже температуры плавления металлического натрия.

Структурные характеристики пленок, получаемых указанным образом, определялись ранее методом флукуационной спектроскопии [12]. В пленках с коэффициентом экстинкции < 0.3 получались поверхностные концентрации наночастиц $\sim 10^{10} - 10^{12} \text{ см}^{-2}$ со средними размерами 60–80 нм.

В работе использовалось излучение непрерывного полупроводникового ($\lambda=810 \text{ нм}$, 975 нм) и гелий-кадмиевого ($\lambda=441.6 \text{ нм}$) лазеров. Время облучения составляло порядка 20 минут при мощностях лазерного излучения 20–60 мВт/см². Спектральное положение полосы плазмонного резонанса зависело от материала прозрачной в исследуемой области диэлектрической подложки (кварц, стекло, сапфир). На рис. 1 сплошной линией представлен спектр оптической плотности ансамбля наночастиц натрия на сапфире. Он состоит из двух полос. Максимум длинноволновой полосы приходится на длину волны 850 нм (энергия фотона 1,46 эВ), а ее полная ширина на половине высоты составляет 0,74 эВ. Коротковолновая полоса находится в области 370 нм (3,35 эВ), ее полная ширина на половине высоты равна 0,38 эВ.

Такой вид полос экстинкции связан со специфической формой наночастиц щелочных металлов, напыленных на используемые нами подложки. Они могут быть представлены сплюснутыми по отношению к поверхности эллипсоидами с существенно различными поперечными полуосями. Каждая такая частица имеет два резонанса в

спектрах рассеяния и поглощения на разных частотах, соответствующих возбуждению колебаний электронов вдоль каждой из полуосей эллипсоида.

Видно, что на частоте возбуждения образуется провал (уменьшение поглощения островковой пленки), существенно более узкий, чем ширина спектров экстинкции. Наряду с этим было обнаружено, что воздействие лазерного излучения в области длинноволнового (коротковолнового) плазменного резонанса приводит к появлению провала и в области коротковолнового (длинноволнового) резонанса (и наоборот). Глубина смежного провала в соседней плазменной полосе была несколько меньше, но сравнима с глубиной выжигаемого провала на возбуждающей частоте, а ширина в 1.5–2 раза больше.

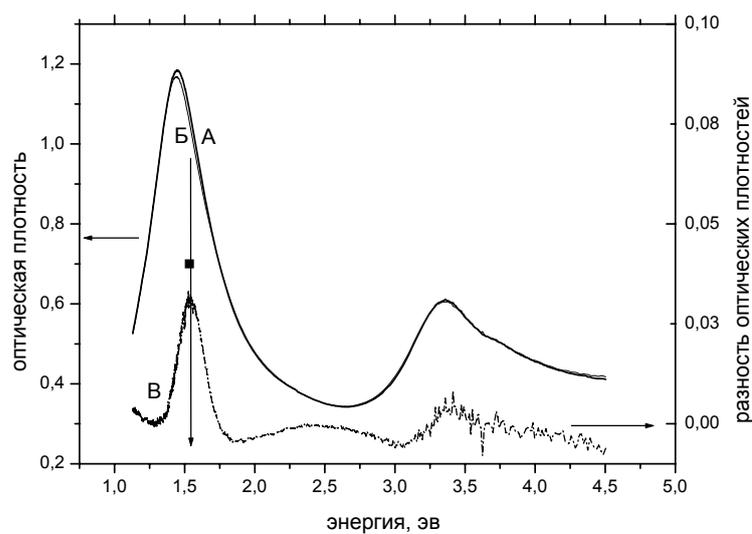


Рис. 1. Прожигание спектральных провалов в ансамблях наночастиц натрия на кварце. Линией (А) представлен спектр экстинкции пленки до облучения, линией (Б) – после облучения лазерным излучением на длине волны 810 нм. Штрих-пунктирная линия (В), правая ось ординат) представляет разность спектров экстинкции (А) и (Б). Вертикальная стрелка указывает длину волны лазерного излучения $\lambda=810$ нм

Наименьшие ширины провалов в области частот облучения получаются у пленок Na на сапфире. Их полуширины (на полувысоте) составляют для разных пленок от 100 до 130 мэВ. Для кварца и стекла эти величины равны и составляют 140–160 мэВ. Вместе с обнаруженными провалами отчетливо проявляются выступы – обратные им по знаку изменения в спектре экстинкции. Выступы означают увеличение поглощения пленки при прожигании провалов.

Теория теплового прожигания провалов в широкополосных неоднородно уширенных спектрах экстинкции островковых пленок изложена в статье [10]. Согласно этой теории, провалы должны быть вдвое шире, чем однородная ширина резонанса плазменной моды, если скорость испарения наночастиц определяется поглощаемой в их объеме мощностью облучения. В нашем случае скорость фотоиспарения наночастиц определяется энергией поля на их поверхности. Хотя оба фактора испарения различаются (в одном случае это тепловое испарение, в другом – испарение за счет фотоатомной эмиссии), можно считать, что их резонансные свойства одинаковы, так как напряженность поля на поверхности определяется плотностью поверхностных зарядов, которая тем больше, чем сильнее в резонансных условиях поле внутри наночастицы.

Таким образом, из наших измерений получается однородная ширина резонансов плазменных мод наночастиц на сапфире 50–65 мэВ и соответствующее время релаксации ~ 10 –13 фс. Для кварца и стекла эти величины равны 70–80 мэВ и ~ 8 –9 фс. Это в

несколько раз меньше теоретического времени (~ 25 фс) релаксации основных (дипольных) мод наночастиц эллипсоидальной формы с диэлектрической проницаемостью металлического натрия. Полученная из измерений большая по сравнению с теоретической скорость релаксации плазменных колебаний может объясняться «сплюснутостью» наночастиц на подложках.

Известно [13], что в релаксацию дает вклад поверхностный эффект, обусловленный рассеянием электронов наночастиц на их поверхности. Скорость релаксации на поверхности оценивается частотой столкновений $\sim v_F/D$, где v_F – скорость Ферми, а D – размер наночастицы.

В нашем случае объем частиц оценивался величиной $\sim (80 \text{ нм})^3$. Выяснив соотношение полуосей для частиц натрия, моделируемых трехосными эллипсоидами [14], удалось получить значение наименьшей из полуосей $a_3 \approx 10$ нм, в нормальном к поверхности подложки направлении. Форма частиц натрия на всех наших подложках оказалась вытянутой и плоской, иными словами, напоминающая сплюснутый эллипсоид. Рассеяние электронов происходит, в основном, на тех поверхностях частицы, время пролета между которыми $\tau \sim 2a_3/v_F \approx 20$ фс. Эта величина – порядка полученных времен релаксации в наших условиях.

Образование смежных провалов в соседней плазменной полосе является прямым доказательством правильности предложенной модели связи спектров экстинкции островковых пленок с морфологическими характеристиками металлических наночастиц на поверхности исследованных нами диэлектриков. Действие, резонансное одной из мод, вызывает уменьшение поглощения как на своей частоте, так и на частоте смежной моды. Так как полосы неоднородного спектра сравнительно узкие, то с каждой модой в одной из них коррелировано несколько смежных мод. Поэтому резонансное действие в одной из полос экстинкции вызывает почти резонансное изменение спектра в смежной полосе.

Некоторые особенности метода прожигания провалов с использованием эффекта фотоатомной эмиссии

Наряду с провалами в спектрах, «выжигаемыми» на частоте облучения, которые объясняются уменьшением резонансных частиц без изменения их формы, мы наблюдали провалы, сдвинутые относительно частоты облучения, а также спектральные выступы, соответствующие увеличению экстинкции (рис. 2). Как правило, такие «нештатные» явления наблюдались при облучении пленок светом с частотами, лежащими вдали от центра полос экстинкции, и особенно вблизи «красной границы» [11] эффекта фотоатомной эмиссии (рис. 3). На этих рисунках отображено исследование воздействия на пленку излучения с $\lambda = 975$ нм, где эффективность фотоатомной эмиссии резко падает. По разностным спектрам видно, что в этом случае практически все действие излучения сводится лишь к изменению формы частиц, поскольку интеграл по спектру изменился весьма незначительно. Кроме того (и это кажется удивительным), форма частиц на рис. 3 после воздействия стала более вытянутой, о чем свидетельствует знакопеременный провал в спектре поглощения пленки.

Подобные явления (появление знакопеременных провалов) наблюдались и в работе [10], где использовался нагрев облучением резонансных частиц в ансамбле металлических кластеров. Эти явления связывались с деформацией частиц, вызванной силами поверхностного натяжения и диффузией атомов при сильном их нагреве мощным импульсным излучением. Утверждалось, что при этом частицы становятся более сферическими, и их резонансная частота смещается в синюю сторону. Это приводит к соответствующему увеличению экстинкции, что и проявляется в разностном спектре.

В нашем случае при фотоиспарении не происходит нагрева частиц, и поэтому возможное изменение их формы требует отдельного рассмотрения. Можно указать на два механизма стимулированной облучением деформации наночастиц.

Первый порождается неоднородностью электрического поля на поверхности частиц. Даже на сфере это поле неоднородно. На поверхности сплюснутого эллипсоида поле существенно усилено вблизи его острых краев, что обеспечивает там эффективное фотоиспарение, уменьшающее длину больших полуосей. Это может обеспечить появление соответствующего выступа, смещенного в область более высоких частот, в спектре экстинкции пленки. Именно такой случай изображен на рис. 2, где, наряду с обычным провалом на частоте возбуждения, появляется провал отрицательного знака, смещенный в сторону высоких частот, а, значит, свидетельствующий о появлении частиц эллипсоидальной формы с уменьшенной большей полуосью.

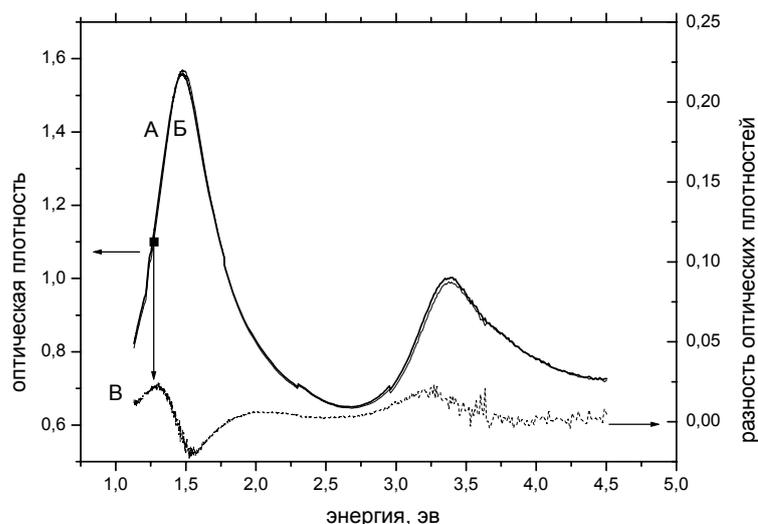


Рис. 2. Те же обозначения, что и на рис. 1 для пленки на сапфире. Видно, что в разностном спектре, наряду с выжженным провалом, образуется выступ в области больших энергий, что соответствует образованию частиц с более сферической формой

Второй связан непосредственно с механизмом воздействия света на атомы металлической поверхности. Ранее [11] было установлено, что квантовый выход процесса фотоатомной эмиссии очень мал и составляет в зависимости от структуры поверхности 10^{-6} – 10^{-10} от поглощенных фотонов. Это значит, что малая доля поверхностных атомов, поглотивших фотон, фотодесорбируется, поскольку происходит быстрое тушение их электронного возбуждения. Вместе с тем атомы после релаксации их электронного возбуждения могут приобрести энергию, достаточную для перемещения по поверхности. Таким образом, воздействующее на наночастицу излучение приводит не только к фотоиспарению ее поверхностных атомов, но и к перемещению их по поверхности. Так как на удаление атома с поверхности требуется заметно больше энергии, чем на его перемещение по поверхности, квантовый выход стимулированного светом перемещения атома может быть значительно больше, чем указанный квантовый выход фотоатомной эмиссии.

Стимулированное светом перемещение атомов металла по своей поверхности может вызвать изменение формы наночастиц без изменения их объема. Такие изменения формы могут проявляться в исследуемых нами явлениях. Появление провала отрицательного знака, смещенного в область более низких частот по отношению к частоте возбуждения, представлено на рис. 3, такое смещение может быть связано лишь с изменением формы частиц из-за диффузии атомов по поверхности

менением формы частиц из-за диффузии атомов по поверхности наночастицы. Это выглядит как появление более вытянутых частиц, что может быть объяснено либо действительным сползанием атомов с вытянутых концов частиц на поверхность подложки, либо с «уплощением» его вершины из-за поверхностной диффузии атомов по частице, что приводит к уменьшению обеих его резонансных частот.

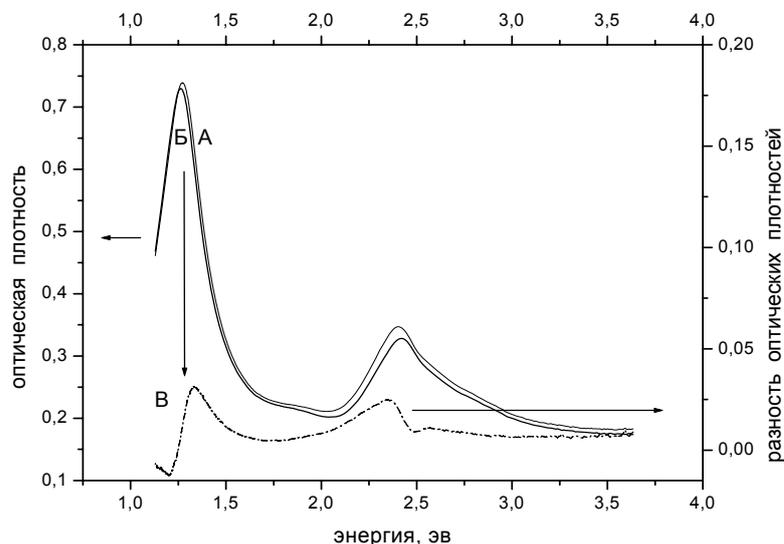


Рис. 3. То же, что и на рис. 2 для пленки на кварце. В разностном спектре виден выступ в области меньших энергий, в результате воздействия образуются частицы с более вытянутой формой

Выводы

Разработан новый экспериментальный метод, который позволяет измерять время, соответствующее обратной сумме скоростей радиационной и фазовой релаксации поверхностных плазмонов в металлических наночастицах в условиях сильного неоднородного уширения, характерного для большинства способов приготовления островковых пленок.

Измерены однородные ширины двух плазмонных резонансов в ИК и видимой области спектра. Они оказались равными 50–65 мэВ на сапфире и 70–80 мэВ для кварца и стекла, что несколько превышает те оценки однородной ширины плазмонного резонанса, которые были сделаны, исходя лишь из объемных характеристик частичек металлического натрия, расположенных на поверхности диэлектриков. Различие объясняется вкладом в релаксацию поверхностного эффекта. Соответствующее однородной ширине время релаксации оценивается величиной ~10–13 фс для сапфира и ~8–9 фс для кварца и стекла.

Образование смежных провалов в соседней плазменной полосе является прямым доказательством правильности модели связи спектров экстинкции островковых пленок с морфологическими характеристиками металлических наночастиц на поверхности используемых диэлектриков. Обнаружен новый механизм изменения размеров и форм островков в ансамблях металлических наночастиц, всегда сопровождающий фотоатомную эмиссию – фотодиффузия атомов металла по поверхности островков. Предполагается его дальнейшее изучение.

Литература

1. Гапоненко С.В., Розанов Н.Н., Ивченко Е.Л., Федоров А.В., Бонч-Бруевич А.М., Вартанян Т.А., Пржибельский С.Г. Оптика наноструктур. СПб: Недра, 2005.
2. Traci R. Jensen, Michelle L. Duval, K. Lance Kelly, Anne A. Lazarides, George C. Schatz and Richard P. Van Duyne. Nanosphere Lithography: Effect of the External Dielectric Medium on the Surface Plasmon Resonance Spectrum of a Periodic Array of Silver Nanoparticles // *J. Phys. Chem. B*; 1999; 103(45) pp. 9846 – 9853.
3. Haglund R., Jr.L.Yang, R. Magruder III, J. Witting, K. Becker, R.A. Zuhr. Picosecond nonlinear optical response of a Cu:silica nanocluster composite *Opt.Lett.* 18, 373 (1993).
4. Григорьев В.И., Вороцов П.С., Завьялов С.А., Чвалун С.Н. Химические сенсоры на основе полипараксилилена, содержащего наночастицы металла (полупроводника). / Междунар. семинар «Российские технологии для индустрии»: Тез. докл. СПб.: СПбГТУ, 2000. Ч. 98.
5. Novotny L., Bian R., Xie X.: Theory of Nanometric Optical Tweezers // *Phys.Rev.Lett.* 1997. V. 79, 645.
6. C. Sönnichsen, T. Franzl, T. Wilk, G. von Plessen und J. Feldmann. Plasmon resonances in large noble-metal clusters // *New Journal of Physics* 2002. V. 4, S. 93.
7. J.H. Parks, S.A. McDonald. Evolution of the collective-mode resonance in small adsorbed sodium clusters // *Phys. Rev. Lett.* 1989. V. 62, 2301.
8. Апанасевич П.А. Основы теории взаимодействия света с веществом. Минск: Наука и техника, 1977.
9. Stietz F., Bosbach J., Wenzel T., Vartanyan T., Goldmann A., Träger F. Decay times of surface plasmon excitation in metal nanoparticles determined by persistent spectral hole burning // *Phys. Rev. Lett.* 2000. V. 84. P. 5644.
10. Vartanyan T., Bosbach J., Stietz F., Träger F. Theory of spectral hole burning for the study of ultrafast electron dynamics in metal nanoparticles // *Appl. Phys. B.* 2001. V. 73. P. 391.
11. Бонч-Бруевич А.М., Максимов Ю.Н., Пржибельский С.Г., Хромов В.В. Фотоэмиссия нейтральных атомов с поверхности металла // *ЖЭТФ.* 1987. Т.92, вып. 1. С. 285.
12. Бонч-Бруевич А.М., Вартанян Т.А., Леонов Н.Б., Пржибельский С.Г., Хромов В.В. Оптический метод измерения структурных параметров островковых пленок // *Опт. спектр.* 2000. Т. 89. 438.
13. Kreibig U., Vollmer M. *Optical Properties of Metal Clusters.* Springer, Berlin, 1995.
14. Вартанян Т.А., Леонов Н.Б., Логунов А.Е., Пржибельский С.Г., Хромов В.В. Связь спектров экстинкции наночастиц металлического натрия с их морфологическими характеристиками. Модификация этих характеристик с помощью процесса фотоатомной эмиссии // *Опт. спектр.* 2007. Т. 102. №5. С. 819–824.

ОСОБЕННОСТИ ЛАЗЕРНОЙ ФАЗОВО-СТРУКТУРНОЙ МОДИФИКАЦИИ СТЕКЛОКЕРАМИК СТ-50-1 И ФС-1

Б.Ю. Новиков

Научный руководитель – д.т.н., профессор В.П. Вейко

В работе описаны оптимальные режимы лазерной модификации структуры стеклокерамик СТ-50-1 и ФС-1 при использовании излучений CO_2 - и YAG:Nd-лазеров. Приведены зависимости параметров областей модификации от условий обработки. Дан обзор возможных применений технологии фазово-структурных модификаций стеклокерамики и представлены практические примеры их использования.

Введение

В середине 50-х гг. XX в. был создан новый класс материалов – стеклокерамики (в СССР – ситалл, в Англии – поликерам и т.д.). Получают стеклокерамики в результате поэтапной многочасовой тепловой обработки, когда в исходной стекломассе образуются микрокристаллы размером в несколько мкм. Благодаря сильному рассеянию на границах микрокристаллов стеклокерамики чаще всего непрозрачны. Благодаря тем же микрокристаллам материал приобретает высокие износостойкие и механические свойства, сочетание которых с жаропрочными и диэлектрическими характеристиками, свойственными всем стеклоподобным материалам, делает перспективным применение стеклокерамик во многих областях от военно-промышленного комплекса до строительства и медицины [1].

Другим интересным материалом являются фоточувствительные стеклокерамики – прозрачные стеклоподобные материалы, наличие в составе которых фоточувствительных центров позволяет за счет фотохимической и термической обработок получить в исходном объеме кристаллизованные участки.

Эти классы материалов являются родственными друг другу. Вещества обоих классов имеют два фазовых состояния – поликристаллическое и аморфное, причем эти состояния могут быть неоднократно обратимы при термической обработке. Фазово-структурная модификация данных материалов может быть осуществлена при воздействии лазерного излучения. Задание определенных характеристик лазерного излучения позволяет легко управлять параметрами формируемых областей модификации.

В различных источниках встречаются сведения об использовании для модификации стеклокерамик лазеров разных типов: непрерывных УФ-лазеров (He-Cd-лазер), импульсных нано- (N_2 -лазер) [2] и даже фемтосекундных лазеров [3] и непрерывных ИК лазеров дальнего (CO_2 -лазер [4]) и ближнего (YAG:Nd-лазер [5]) диапазона. Чаще всего исследуется фазово-структурная модификация таких стеклокерамик как ситалл СТ-50-1 (ST-50-1) и фоточувствительное стекло ФС-1 (аналогичное западному стеклу Foturan), которые являются наиболее распространенными материалами своих классов. Однако в литературе не приводится многих второстепенных, но важных сведений, которые могли бы способствовать воспроизведению результатов как в другой лаборатории, так и на производстве.

В данной статье будут приведены взятые из разных источников и дополненные нашими экспериментальными данными сведения о фазово-структурной модификации стеклокерамик СТ-50-1 и ФС-1 при использовании излучений CO_2 - и YAG:Nd-лазеров. Излучения этих лазеров наиболее часто используются для модификации стеклокерамик, а кроме того данные лазеры являются наиболее распространенными.

Условия протекания процесса лазерной модификации

Стеклокерамики обладают низким коэффициентом термического расширения, но высокой хрупкостью (термостойкость ситалла СТ-50-1 513 К). Так как при лазерной

модификации ситалла СТ-50-1 возникают высокие температурные градиенты, то во избежание образования трещин и разрушения образца (рис. 1) необходим дополнительный подогрев [1]. Использование для подогрева газопламенной горелки может привести к загрязнению ванны расплава продуктами горения.

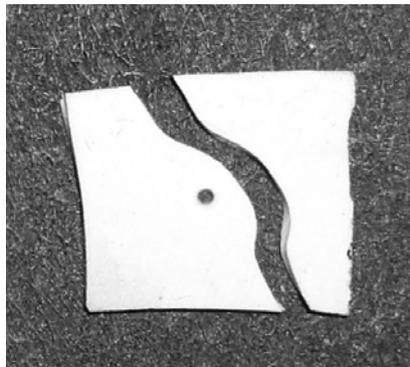


Рис. 1. Характерное растрескивание образца ситалла СТ-50-1 при локальной фазово-структурной модификации из-за недостаточного дополнительного подогрева

Чтобы избежать разрушения стеклокерамических образцов при воздействии лазерного излучения, должны выполняться два условия:

1) скорость изменения температуры (при нагревании $V_{нагр}$ и охлаждении $V_{охл}$) должны быть меньше критической (критической скоростью изменения температуры образца при лазерном нагревании и последующем охлаждении будем называть ту скорость, при которой трещины уже образуются, т.е. возникающие термонапряжения превышают разрушающие для материала образца значения [6]);

2) температура образца не должна превышать температуру испарения.

Если скорость изменения температуры выше критического значения, то образование трещин является неизбежным (режим растрескивания). При обработке в этом режиме $V_{нагр} \sim 200\text{--}50$ К/с и $V_{охл} \sim 400\text{--}100$ К/с, и образования трещин из-за остаточных напряжений особенно трудно избежать [4].

Как показывают наши эксперименты, температура дополнительного подогрева может лежать в диапазоне от 600 до 1000 К. Чем выше температура подогрева, тем меньшая энергия должна быть сообщена материалу для достижения температуры плавления, следовательно, тем меньше может быть плотность мощности лазерного излучения. Желательно, чтобы нагрев распределялся равномерно по всему образцу. При наличии нагревательного элемента важно минимизировать соприкосновение с ним образца во избежание теплоотвода.

Применение дополнительного подогрева при модификации фоточувствительного стекла ФС-1 затруднено тем, что уже просто при нагреве (без дополнительного УФ-облучения) до 600 К образцы окрашиваются в слабый желтый цвет без существенного поглощения света (в литературе данное явление объясняется возникновением субмикронных коллоидно-дисперсных кластеров атомов серебра, которое, согласно источникам [7, 8], должно происходить после фотохимической обработки УФ-излучением). Можно рекомендовать при лазерном воздействии плавно увеличивать мощность источника излучения или решить задачу, как в [7], за счет создания второго канала лазерного излучения, который будет играть роль подогрева при лазерной обратной аморфизации. Однако при этом вероятность образования трещин все равно будет велика.

Вообще, можно рекомендовать выбирать образцы небольшого размера, 5–10 мм, которые легко равномерно подогреть. Но расположение области модификации вблизи края образца может привести к вытеканию ванны расплава за границы заготовки.

Выбор режима обработки

Сравним характер воздействия на СТ-50-1 излучений CO₂-лазера (10,6 мкм) и YAG:Nd-лазера (1,06 мкм). Всем материалам на основе SiO₂ свойственно фундаментальное поглощение в дальней ИК области, поэтому излучение CO₂-лазера эффективно поглощается в ситалле СТ-50-1 (и в фоточувствительном стекле ФС-1). При его воздействии на материал плавление поликристаллической фазы ситалла СТ-50-1 происходит при движении вглубь изотермы плавления. Излучение YAG:Nd-лазера на границах микрокристаллов поликристаллической фазы ситалла СТ-50-1 подвергается многократному рассеянию и также приводит к плавлению материала, но аморфной фазой ситалла СТ-50-1 данное излучение пропускается, что обуславливает поэтапный характер просветления [5, 9]. Воздействие излучения YAG:Nd-лазера на ситалл СТ-50-1 имеет следующие особенности:

- 1) использование излучения YAG:Nd-лазера позволяет получать области аморфизации ситалла СТ-50-1 с параметрами, недоступными при использовании излучения CO₂-лазера;
- 2) прецизионное формирование областей обратной кристаллизации ситалла СТ-50-1 при использовании излучения YAG:Nd-лазера затруднительно.

При выборе правильного режима обработки решающую роль играют скорости нагревания и охлаждения материала. Приведем для ситалла СТ-50-1 формулы для оценки скорости изменения температуры нагревания в центре лазерного пятна на поверхности V_n^{\max} :

$$V_n^{\max} = \frac{\partial T_n^{\max}}{\partial t} = \frac{A}{\sqrt{\pi} \rho c} \frac{P}{S} \frac{1}{\sqrt{a\tau}}$$

и температуры нагревания в центре лазерного пятна на поверхности T_n^{\max} :

$$T_n^{\max} = \frac{2AP}{\sqrt{\pi k S}} \sqrt{a\tau} + T_0,$$

где P – мощность лазерного излучения, A – коэффициент поглощения ($A(\text{CO}_2) = 0,9$; $A(\text{YAG:Nd}) = 0,5$), S – площадь лазерного пятна, τ – время облучения, $a = 6,5 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$ – коэффициент температуропроводности, $k = 1,45 \text{ Вт/м}\cdot\text{К}$ – теплопроводность, T_0 – начальная температура. Правильное задание P , S , τ и T_0 позволит определенно сформировать выбранный тип фазово-структурной модификации стеклокерамики.

При темпах изменений температуры $V_{\text{нагр}} \sim 30\text{--}80 \text{ К/с}$ и $V_{\text{охл}} \sim 50\text{--}100 \text{ К/с}$ можно осуществить лазерную аморфизацию образцов ситалла СТ-50-1. В этом случае температура поверхности образцов достигает температуры плавления (1473 К), и темп охлаждения достаточно высок для затвердевания расплава в аморфной фазе [4].

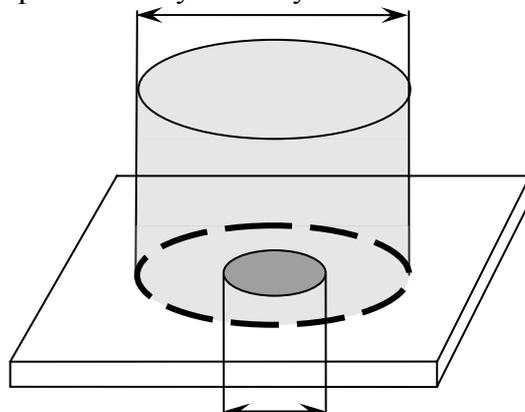
В работах разных исследователей используются образцы стеклокерамики главным образом в виде тонких пластин. Приведем некоторые данные для тонких (толщина 0,6 мм) пластин ситалла СТ-50-1. Для сквозной аморфизации образцов в зависимости от температуры дополнительного подогрева (600–1000 °С) необходима плотность мощности излучения в диапазоне: CO₂-лазер – от $5 \cdot 10^5$ до 10^7 Вт/м^2 ; YAG:Nd-лазер – от $0,8 \cdot 10^7$ до $16 \cdot 10^7 \text{ Вт/м}^2$.

Обратная кристаллизация ситалла СТ-50-1 при помощи излучения CO₂-лазера осуществлялась методом простого воздействия (или сканирования) на поверхность образца при больших температурах предварительного подогрева (800–1 000 К) и меньших плотностях мощности лазерного излучения ($\leq 10^5 \text{ Вт/м}^2$), чем аморфизация [4, 5, 9].

Обратная кристаллизация ситалла СТ-50-1 при помощи излучения YAG:Nd-лазера также осуществима, но размер области воздействия должен быть больше области предполагаемой кристаллизации (рис. 2). Данный прием обеспечивает плавление

просветленной области за счет теплоотвода из окружающих участков. Важнейшим условием кристаллизации расплава ситалла является $V_{охл} < 50$ К/с (в наших экспериментах $V_{охл} \approx 5-7$ К/с). Мы облучали материал в течение 15–20 с при плотности мощности излучения $\approx 10^5$ Вт/м², а затем создавали режим плавного охлаждения за счет постепенного уменьшения мощности YAG:Nd-лазера [5, 9].

размер сечения пучка излучения YAG:Nd-лазера



размер области аморфизации,
предназначенной для обратной кристаллизации

Рис. 2. Схематичное обозначение зоны воздействия излучения YAG:Nd-лазера на ситалл СТ-50-1 при обратной кристаллизации

В литературе [7, 8] описываются следующие условия фазово-структурной модификации фоточувствительного стекла ФС-1 при помощи излучения непрерывного CO₂-лазера при воздействии на материал по двух канальной схеме:

- кристаллизация – предварительный подогрев при 500 °С в течение 20 с, плотность мощности излучения $\approx 3 \cdot 10^4$ Вт/см², продолжительность облучения 60–90 с (измеренная температура поверхности ≈ 1150 °С);
- аморфизация – предварительный подогрев при 800 К в течение 5 с, плотность мощности излучения $2 \cdot 10^5$ Вт/см², продолжительность облучения 30 с (измеренная температура поверхности ≈ 1300 °С).

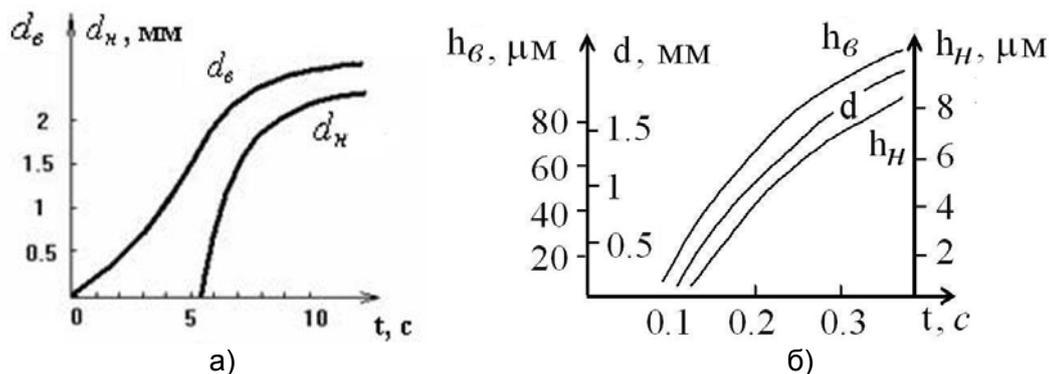


Рис. 3. а) Зависимости верхнего ($d_{\text{верх}}$) и нижнего ($d_{\text{ниж}}$) диаметра линзы от времени воздействия излучения CO₂-лазера на ситалл СТ-50-1. Режим обработки: плотность мощности излучения CO₂-лазера $0,5 \cdot 10^6$ Вт/м², размер сечения пучка излучения в плоскости обработки 2 мм, температура дополнительного подогрева 800 К. Толщина пластин ситалла СТ-50-1 0,5 мм; б) Кинетика формирования волновода (начальная стадия аморфизации) от времени воздействия излучения CO₂-лазера на ситалл СТ-50-1: зависимости высоты ($h_{\text{в}}$), глубины ($h_{\text{н}}$) и ширины (d) области модификации. Режим обработки: плотность мощности излучения CO₂-лазера $0,5 \cdot 10^6$ Вт/м², размер сечения пучка излучения в плоскости обработки 1,5 мм, температура дополнительного подогрева 800 К [4]

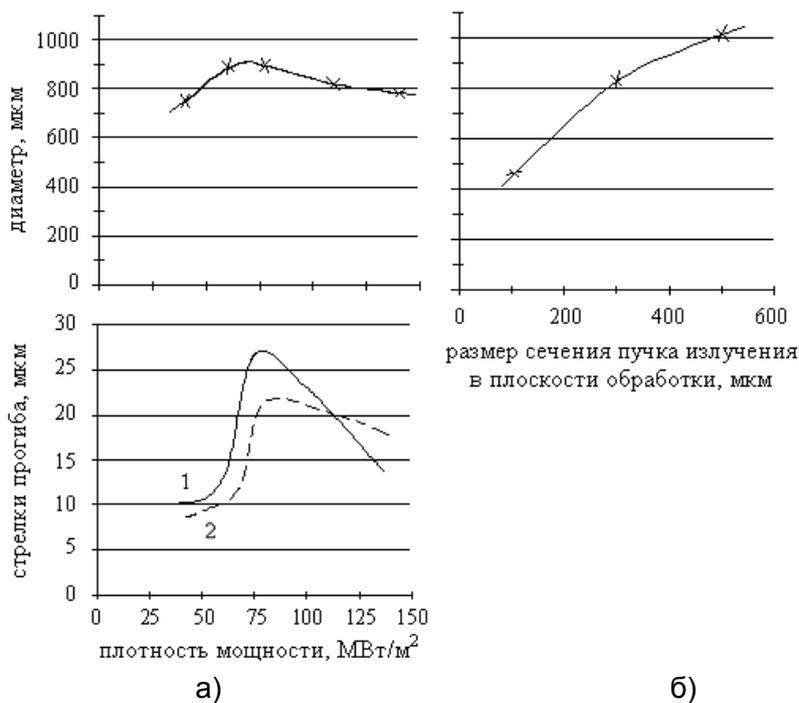


Рис. 4. Зависимость параметров областей аморфизации ситалла СТ-50-1 от условий обработки излучением YAG:Nd-лазера. 1 – сторона пластины, с которой происходит воздействие излучения; 2 – сторона пластины, противоположная воздействию излучения. Режимы обработки: а) – размер сечения пучка излучения в плоскости обработки 300 мкм, температура дополнительного подогрева 450 С; б) – плотность мощности излучения YAG:Nd-лазера $\approx 5 \cdot 10^7$ Вт/м²; температура дополнительного подогрева 450 С. Области просветления формируются на пластинах ситалла СТ-50-1 толщиной 0,6 мм [10]

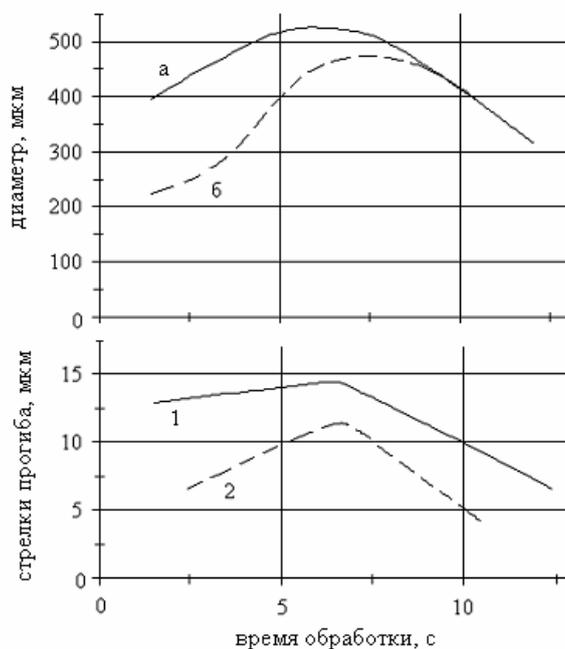


Рис. 5. Зависимость диаметра (плотность мощности излучения: а – $15 \cdot 10^7$ Вт/м², б – $9,5 \cdot 10^7$ Вт/м²) и стрелок прогиба (плотность мощности излучения $9,5 \cdot 10^7$ Вт/м²; 1 – сторона, с которой воздействует лазер; 2 – сторона, противоположная воздействию лазера) областей аморфизации ситалла СТ-50-1 от времени воздействия излучения YAG:Nd-лазера. Режим обработки: размер сечения пучка излучения в плоскости обработки 100 мкм; температура дополнительного подогрева 650 С. Области аморфизации формируются на пластинах ситалла СТ-50-1 толщиной 0,6 мм [5]

Формирование областей кристаллизации фоточувствительного стекла ФС-1 происходит при тепловой обработке на участках, облученных УФ-излучением, есть сообщения о формировании кристаллических структур без УФ-облучения. Исследованиями зависимостей параметров областей как кристаллизации, так и обратной аморфизации фоточувствительной стеклокерамики ФС-1 от условий обработки не проводилось. Влияние условий обработки на геометрические параметры областей аморфизации ситалла СТ-50-1 исследовано более подробно, что, вероятно, связано с популярностью данной технологии для формирования оптических микроэлементов. Некоторые из таких зависимостей приведены на рис. 3–5.

Некоторые применения технологии фазово-структурной модификации стеклокерамики

Особые характеристики стеклокерамических материалов, возможность индуцированного локального изменения их механических, объемных и оптических свойств, короткое (1–100 с) время протекания лазерной модификации этих материалов открывают широкие возможности использования технологии их фазово-структурной перестройки.

Непрозрачность и меньший удельный объем (благодаря четкой структуре атомов) поликристаллической фазы стеклокерамики, прозрачность и больший удельный объем аморфной фазы открывают широкие перспективы для формирования оптических микроэлементов на ситалле СТ-50-1 [7, 9, 11].

Способность фоточувствительного стекла ФС-1 кристаллизоваться лишь в местах УФ-облучения и существенные отличия аморфной и кристаллической структур по скоростям травления позволяют использовать технологию фазово-структурной модификации данного материала при формировании периодических структур, в том числе дифракционных решеток на поверхности [12] и трехмерных изображений в объеме [2].

Технология фазово-структурной модификации фоточувствительного стекла ФС-1 также используется при создании фотонных и оптоэлектронных устройства [1], при построении наноспутников, для формирования микро-электро-механических систем [2, 13]. На ее основании разрабатываются микроаналитические системы [3].

Изменение удельных объемов фаз приводит при процессах модификации к появлению выпуклостей и впадин на поверхности заготовки. Это явление может быть использовано для формирования рельефа и морфологии поверхности.

Ионно-молекулярный обмен возможен только для аморфной фазы стеклокерамики. Кристаллическая фаза может при этом играть роль маски.

Использование стеклокерамик с особыми параметрами, например, таких как ферроэлектрические керамики, приведет при фазово-структурной модификации к изменению их электромагнитных характеристик.

Биосовместимость стеклокерамики обуславливает ее применение в медицине и биологии, стойкость к агрессивным веществам – в химии, термо- и износостойкость – в промышленности и производстве приборов специального назначения. На базе технологии фазово-структурной модификации стеклокерамик планируется разработка оптических систем записи и хранения информации, фотонных кристаллов и т.д.

Заключение

Обзор литературы и проведенные эксперименты по фазово-структурной модификации стеклокерамик СТ-50-1 и ФС-1 показали, что:

- поликристаллическая и аморфная фазы стеклокерамики могут быть неоднократно обратимы при использовании лазера любого типа (CO₂ и YAG:Nd);

- при выборе правильного режима фазово-структурной модификации решающую роль играют скорости нагревания и охлаждения материала и температура нагревания;
- параметры областей фазово-структурной модификации можно контролировать режимом обработки;
- технология фазово-структурной модификации стеклокерамики перспективна для формирования механических и оптических микроустройств, микроструктур, элементов аналитических систем.

Благодарности

Работа проведена при поддержке Гранта на ведущую научную школу Российской Федерации (НШ.5967.2006.8), Гранта РФФИ (07-02-00887-а), Госконтракта РНП 2.1.1.784 и, частично, проекта INTAS № 04-78-7124.

Литература

1. Бережной А.И. Ситаллы и фотоситаллы. М.: Машиностроение, 1966. 319 с.
2. Livingston F.E., Adams P.M., Helvajian H. Active photo-physical processes in the pulsed UV nanosecond laser exposure of photostructurable glass ceramic materials // Proceedings of SPIE, 2004. V. 5662. P. 44–50.
3. Cheng Y., Sugioka K., Midorikawa K. 3D integration of microoptics and microfluidics in glass using femtosecond laser direct writing. // Proceedings of SPIE. 2004. V. 5662. P. 209–214.
4. Kieu Q.K., Veiko V.P. Phase-structure transformations of glass–ceramics under laser heating as a way to create new micro-optical components and materials. // Proceedings of SPIE. 2004. V. 5399. P. 11–20.
5. Новиков Б.Ю. Формирование микролинз методом аморфизации стеклокерамики при использовании YAG:Nd-лазера // Известия РАН. Серия физическая, 2006. Т. 70. № 9. С. 1323–1326.
6. Veiko V.P., Yakovlev E.B. Physical fundamentals of laser forming of microoptical components // Optical Engineering. 1994. V. 33. №11. P. 3567–3571.
7. Вейко В.П., Костюк Г.К., Никоноров Н.В., Рачинская А.Н. Лазерная модификация структуры фоточувствительной стеклокерамики. // Известия вузов. Приборостроение, 2006. Т. 49. №9. С. 5–9.
8. Kostyuk G.K., Nikonorov N.V., Orlov D.V., Rachinskaya A.N., Veiko V.P., Yakovlev E.B. Fast and reversible phase-structure modifications of glass-ceramic materials under CO₂-laser action. – В печати.
9. Вейко В.П., Новиков Б.Ю. Лазерное формирование оптических элементов на ситалле СТ-50-1 // Beam Technologies and Laser Applications: Proceeding of the fifth international scientific and technical conference. SPb. 2006. P.90–95.
10. Вейко В.П., Шахно Е.А., Яковлев Е.Б., Новиков Б.Ю. Нелинейное просветление ситалла СТ-50-1 под действием излучения YAG:Nd-лазера. – В печати.
11. Kieu Q.K., N.V. Nikonorov, Veiko V.P. Laser modification of glass–ceramics structure and properties: a new view to traditional materials // Proceedings of SPIE, 2004. V. 5662. P. 119–128.
12. Nikonorov N.V. Influence of ion-exchange treatment on the physicochemical properties of glass and waveguide surfaces // Glass Physics and Chemistry, 1999. V. 25. №3. P.207–232.
13. Fuqua P., Janson S.W., Hansen W.W., Helvajian H. Fabrication of true 3D microstructures in glass/ceramic materials by pulsed UV laser volumetric exposure techniques // Proceedings of SPIE, 1999. V. 3618. P.213–220.

**КРОСС-КОРРЕЛЯЦИИ В ЖИВЫХ СИСТЕМАХ:
АНАЛИЗ НЕЙРОМАГНИТНЫХ СИГНАЛОВ КОРЫ ГОЛОВНОГО
МОЗГА ЧЕЛОВЕКА**

**С.А. Дёмин, Р.Р. Зарипов, О.Ю. Панищев (Татарский государственный гуманитарно-педагогический университет, Казанский государственный университет)
Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор Р.М. Юльметьев (Татарский государственный гуманитарно-педагогический университет, Казанский государственный университет)**

В данной работе мы представляем новый метод анализа кросс-корреляций в сложных системах живой природы, основанный на статистической теории дискретных немарковских случайных процессов. Были изучены кросс-корреляции в нейромагнитных сигналах коры головного мозга здорового человека и пациента с фоточувствительной эпилепсией (ФЧЭ). Полученные результаты (i) указывают на сильную коррелированность между сигналами коры головного мозга здоровых людей, (ii) позволяют выявить механизм возникновения ФЧЭ и (iii) идентифицировать области, взаимодействие между которыми нарушается при данном заболевании.

1. Введение. Кросс-корреляции

Изучение свойств и особенностей динамической эволюции сложных систем разной природы является одной из наиболее важных и актуальных задач современной статистической физики. Как известно, любая сложная система состоит из большого числа взаимодействующих компонент и имеет огромное (порой бесконечное) число степеней свободы. Кроме того, все природные объекты являются открытыми диссипативными системами, которые взаимодействуют с окружающей средой, обмениваются веществом, энергией и информацией. В связи с этим процессы, происходящие в реальных объектах, часто характеризуются нелинейностью, нестационарностью и неравновесностью.

Исследование динамических особенностей поведения сложных систем, как правило, базируется на анализе временной эволюции какого-либо параметра, представляющего собой сигнал, продуцируемый сложной системой. Среди огромного многообразия методов анализа временных серий можно выделить следующие: 1) анализ корреляционной зависимости между случайными величинами, измерение тесноты и направления связи между этими величинами или признаками – корреляционный и регрессивный анализы [1, 2]; 2) оценка влияния одной или нескольких независимых переменных на одну исследуемую переменную (одномерный анализ) или на несколько зависимых переменных (многомерный анализ), поиск фиксированных или переменных ковариантов – дисперсионный факторный и ковариационный анализы [3, 4]; 3) поиск эффективного метода описания сложных систем на основе их фрактальной природы (самоподобия) – фрактальный и мультифрактальный анализы [5, 6]; 4) анализ структуры и динамики сложных систем в рамках теории детерминированного хаоса и нелинейной динамики [7, 8]; 6) представление временного сигнала в виде совокупности периодических (базисных) функций и спектральный анализ локальных возмущений – классический Фурье-анализ и вейвлет-анализ [9, 10].

В последние годы также осуществляется поиск и разработка альтернативных и дополнительных методов извлечения информации о закономерностях и динамических особенностях взаимодействия между отдельными составными частями и элементами сложных систем. Необходимость такого анализа часто связана с тем, что поведение системы определяется коллективными явлениями и процессами. Другим примером яв-

ляется случай, когда динамическая эволюция отдельной части сложной системы зависит от большого числа внешних или внутренних факторов. В этом случае в статистической физике применяют методы выявления и анализа кросс- и мульти-корреляций: кросс-спектральный анализ [11, 12], метод случайных матриц [13] и т.д.

В данной работе мы представляем новый метод анализа и кинетического описания кросс-корреляций, базирующийся на статистической теории дискретных немарковских случайных процессов. Данная теория оказалась весьма полезной при анализе свойств и динамических особенностей сложных систем в биологии [14, 15], физике [16, 17], сейсмологии [18, 19] и медицине [20–23]. Полученные в рамках данной теории численные параметры и качественные характеристики предоставляют детальную информацию о перекрестных корреляциях, возникающих в хаотических сигналах, продуцируемых отдельными частями или компонентами сложных систем. В качестве примера в работе представлен анализ кросс-корреляций, возникающих в нейромагнитных откликах, продуцируемых различными областями коры головного мозга здорового человека и пациента с ФЧЭ [24, 25].

2. Статистическая теория дискретных немарковских случайных процессов. Основные положения и понятия

Представим стохастическую динамику исследуемых процессов в виде дискретных временных серий x_j, y_j некоторых случайных величин X, Y :

$$\begin{aligned} X &= \{x(T), x(T + \tau), x(T + 2\tau), \dots, x(T + (N - 1)\tau)\} \\ Y &= \{y(T), y(T + \tau), y(T + 2\tau), \dots, y(T + (N - 1)\tau)\} \end{aligned} \quad (1)$$

где T – начальный момент времени, $(N - 1)\tau$ – общее время регистрации сигнала, τ – временной шаг дискретизации.

Средние значения, флуктуации, абсолютные и относительные дисперсии для случайных величин X, Y определяются в следующем виде:

$$\begin{aligned} \langle X \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} x(T + j\tau), \quad x_j = x(T + j\tau), \quad \delta x_j = x_j - \langle X \rangle, \quad \sigma_x^2 = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \delta x_j^2; \\ \langle Y \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} y(T + j\tau), \quad y_j = y(T + j\tau), \quad \delta y_j = y_j - \langle Y \rangle, \quad \sigma_y^2 = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \delta y_j^2. \end{aligned}$$

Нормированную кросс-корреляционную функцию (ККФ), описывающую вероятностную связь между двумя случайными величинами X и Y , можно записать в следующем виде:

$$c(t) = \frac{1}{(N - m)\sigma_x\sigma_y} \sum_{j=0}^{N-m-1} \delta x(T + j\tau)\delta y(T + (j + m)\tau), \quad (2)$$

$$t = m\tau, \quad 1 \leq m \leq N - 1.$$

Функция $c(t)$ удовлетворяет условиям нормировки и ослабления корреляций:

$$\lim_{t \rightarrow 0} c(t) = 1, \quad \lim_{t \rightarrow \infty} c(t) = 0.$$

Представим набор флуктуаций $\delta x_j = \delta x(T + j\tau), \quad \delta y_j = \delta y(T + j\tau)$, где $j = 0, 1, \dots, N - 1$, в виде k -компонентных векторов начального состояния в фазовом пространстве векторов состояния:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_k^0 &= \mathbf{A}_k^0(0) = \{\delta x_0, \delta x_1, \dots, \delta x_{k-1}\} = \{\delta x(T), \delta x(T + \tau), \dots, \delta x(T + (k - 1)\tau)\} \\ \mathbf{B}_k^0 &= \mathbf{B}_k^0(0) = \{\delta y_0, \delta y_1, \dots, \delta y_{k-1}\} = \{\delta y(T), \delta y(T + \tau), \dots, \delta y(T + (k - 1)\tau)\} \end{aligned} \quad (3a)$$

где $k = N - 1 - m$. k -компонентные векторы состояния в момент времени t — $\mathbf{A}_{m+k}^m = \mathbf{A}_{m+k}^m(t)$, $\mathbf{B}_{m+k}^m = \mathbf{B}_{m+k}^m(t)$ образуются путем сдвига на интервал $t = m\tau$ по дискретной временной шкале:

$$\mathbf{A}_{m+k}^m = \mathbf{A}_{m+k}^m(t) = \{\delta x_m, \delta x_{m+1}, \delta x_{m+2}, \dots, \delta x_{m+k-1}\} \quad (3b)$$

$$\mathbf{B}_{m+k}^m = \mathbf{B}_{m+k}^m(t) = \{\delta y_m, \delta y_{m+1}, \delta y_{m+2}, \dots, \delta y_{m+k-1}\}.$$

Эти векторы состояния также могут быть получены путем многократного действия эволюционных операторов $U_X(t + \tau, t)$ и $U_Y(t + \tau, t)$ на векторы начального состояния:

$$\mathbf{A}_{m+k}^m(t) = U_X(T + m\tau, T) \mathbf{A}_k^0(0) \quad (3c)$$

$$\mathbf{B}_{m+k}^m(t) = U_Y(T + m\tau, T) \mathbf{B}_k^0(0).$$

Воспользуемся выражением для скалярного произведения векторов:

$$\langle \mathbf{A}_k^0 | \mathbf{B}_{m+k}^m \rangle = \sum_{i=0}^{k-1} \mathbf{A}_i^0 | \mathbf{B}_{m+i}^m \rangle.$$

Используя соотношения (2), (3a)–(3c), получаем нормированную ККФ $c(t)$ как скалярное произведение векторов начального $\mathbf{A}_k^0(0)$ и некоторого текущего $\mathbf{B}_{m+k}^m(t)$ состояний:

$$c(t) = \frac{\langle \mathbf{A}_k^0 | \mathbf{B}_{m+k}^m \rangle}{\langle \mathbf{A}_k^0 | \mathbf{B}_k^0 \rangle} = \frac{\langle \mathbf{A}_k^0 U_Y(T + m\tau, T) \mathbf{B}_k^0 \rangle}{\langle \mathbf{A}_k^0 | \mathbf{B}_k^0 \rangle} = \frac{\langle \mathbf{A}_k^0(0) | \mathbf{B}_{m+k}^m(t) \rangle}{\langle \mathbf{A}_k^0(0) | \mathbf{B}_k^0(0) \rangle}. \quad (4)$$

Запишем конечно-разностное уравнение Лиувилля для векторов состояния (см. (3b)):

$$\frac{\Delta}{\Delta t} \mathbf{B}_{m+k}^m(t) = i \mathcal{L}(t, \tau) \mathbf{B}_{m+k}^m(t). \quad (5)$$

Введем операторы проектирования Π и P для евклидова пространства векторов состояния:

$$\Pi = \frac{|\mathbf{B}_k^0(0)\rangle \langle \mathbf{A}_k^0(0)|}{\langle \mathbf{A}_k^0(0) | \mathbf{B}_k^0(0) \rangle}, \quad \Pi^2 = \Pi, \quad P = 1 - \Pi, \quad P^2 = P, \quad \Pi P = P \Pi = 0. \quad (6)$$

Исходная ККФ (см. (4)) может быть получена путем проектирования вектора конечного состояния $\mathbf{B}_{m+k}^m(t)$ на вектор начального состояния $\mathbf{B}_k^0(0)$:

$$\langle P \mathbf{B}_{m+k}^m(t) \rangle = \mathbf{B}_k^0(0) \rangle \frac{\langle \mathbf{A}_k^0(0) | \mathbf{B}_{m+k}^m(t) \rangle}{\langle \mathbf{A}_k^0(0) | \mathbf{B}_k^0(0) \rangle} = \mathbf{B}_k^0(0) \rangle c(t). \quad (7)$$

Проекционные операторы Π и P расщепляют Евклидово пространство векторов состояния размерностью k на два взаимно ортогональных подпространства:

$$\mathbf{B}(k) = \mathbf{B}'(k) + \mathbf{B}''(k), \quad \mathbf{B}'(k) = \Pi \mathbf{B}(k), \quad \mathbf{B}''(k) = P \mathbf{B}(k), \quad \mathbf{B}_{m+k}^m(t) \in \mathbf{B}(k).$$

В результате уравнение Лиувилля (6) расщепляется на два уравнения в соответствующих ортогональных подпространствах:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\Delta \mathbf{B}'(t)}{\Delta t} = i \mathcal{L}_{11} \mathbf{B}'(t) + i \mathcal{L}_{12} \mathbf{B}''(t), \end{array} \right. \quad (8a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\Delta \mathbf{B}''(t)}{\Delta t} = i \mathcal{L}_{21} \mathbf{B}'(t) + i \mathcal{L}_{22} \mathbf{B}''(t). \end{array} \right. \quad (8b)$$

Здесь $\mathcal{L}_{ij} = \Pi_i \mathcal{L} \Pi_j$, $i, j = 1, 2$, $\Pi_1 = \Pi$, $\Pi_2 = P$ представляют собой матричные элементы квазиоператора Лиувилля:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{11} + \mathcal{L}_{12} + \mathcal{L}_{21} + \mathcal{L}_{22}.$$

Операторы \mathcal{E}_{ij} действуют следующим образом: \mathcal{E}_{11} – из \mathbf{V}' в \mathbf{V}' , \mathcal{E}_{12} – из \mathbf{V}'' в \mathbf{V}' , \mathcal{E}_{21} – из \mathbf{V}' в \mathbf{V}'' , \mathcal{E}_{22} – из \mathbf{V}'' в \mathbf{V}'' .

Решая уравнение (8b) и подставляя полученное решение в правую часть (8a), получаем замкнутое конечно-разностное уравнение для исходной ККФ:

$$\frac{\Delta c(t)}{\Delta t} = \lambda_1^{XY} c(t) - \tau \Lambda_1^{XY} \sum_{j=0}^{m-1} M_1^{XY}(j\tau) c(t - j\tau). \quad (9)$$

Здесь λ_1^{XY} – собственное значение квазиоператора Лиувилля \mathcal{E} , Λ_1^{XY} – релаксационный параметр размерности квадрата частоты, $M_1^{XY}(j\tau)$ – нормированная кросс-корреляционная функция памяти первого порядка:

$$\lambda_1^{XY} = i \frac{\langle \mathbf{A}_k^0(0) \mathcal{E} \mathbf{B}_k^0(0) \rangle}{\langle \mathbf{A}_k^0(0) \mathbf{B}_k^0(0) \rangle}, \quad \Lambda_1^{XY} = i \frac{\langle \mathbf{A}_k^0(0) \mathcal{E} \mathbf{B}_k^0(0) \rangle}{\langle \mathbf{A}_k^0(0) \mathbf{B}_k^0(0) \rangle},$$

$$M_1^{XY}(j\tau) = \frac{\langle \mathbf{A}_k^0(0) \mathcal{E}_{12} \{1 + i\tau \mathcal{E}_{22}\}^j \mathcal{E}_{21} \mathbf{B}_k^0(0) \rangle}{\langle \mathbf{A}_k^0(0) \mathbf{B}_k^0(0) \rangle}, \quad M_1^{XY}(0) = 1. \quad (10)$$

Пользуясь представленным выше алгоритмом, мы можем ввести последовательность проекционных операторов Π_n и P_n . Используя технику проекционных операторов для новых ортогональных векторов состояния, получаем цепочку связанных немарковских конечно-разностных кинетических уравнений для нормированных кросс-корреляционных функций $n-1$ -го порядка:

$$\frac{\Delta M_{n-1}^{XY}(t)}{\Delta t} = \lambda_n^{XY} M_{n-1}^{XY}(t) - \tau \Lambda_n^{XY} \sum_{j=0}^{m-1} M_n^{XY}(j\tau) M_{n-1}^{XY}(t - j\tau). \quad (11)$$

Воспользуемся процедурой ортогонализации Грамма-Шмидта: $\langle \mathbf{W}_n^X, \mathbf{W}_m^Y \rangle = \delta_{n,m} \langle \mathbf{W}_n^X \mathbf{W}_n^Y \rangle$ (где $\delta_{n,m}$ – символ Кронекера) для более компактной записи полученных соотношений:

$$\mathbf{W}_0^X = \mathbf{A}_k^0(0), \quad \mathbf{W}_1^X = (i\mathcal{E} - \lambda_1^{XY}) \mathbf{W}_0^X, \quad \mathbf{W}_2^X = (i\mathcal{E} - \lambda_2^{XY}) \mathbf{W}_1^X - \Lambda_1^{XY} \mathbf{W}_0^X, \dots,$$

$$\mathbf{W}_n^X = (i\mathcal{E} - \lambda_n^{XY}) \mathbf{W}_{n-1}^X - \Lambda_{n-1}^{XY} \mathbf{W}_{n-2}^X - \dots;$$

$$\mathbf{W}_0^Y = \mathbf{B}_k^0(0), \quad \mathbf{W}_1^Y = (i\mathcal{E} - \lambda_1^{XY}) \mathbf{W}_0^Y, \quad \mathbf{W}_2^Y = (i\mathcal{E} - \lambda_2^{XY}) \mathbf{W}_1^Y - \Lambda_1^{XY} \mathbf{W}_0^Y, \dots,$$

$$\mathbf{W}_n^Y = (i\mathcal{E} - \lambda_n^{XY}) \mathbf{W}_{n-1}^Y - \Lambda_{n-1}^{XY} \mathbf{W}_{n-2}^Y - \dots,$$

тогда собственные значения λ_n^{XY} квазиоператора Лиувилля и релаксационные параметры Λ_n^{XY} в (11) принимают вид:

$$\lambda_n^{XY} = i \frac{\langle \mathbf{W}_{n-1}^X \mathcal{E} \mathbf{W}_{n-1}^Y \rangle}{\langle \mathbf{W}_{n-1}^X \mathbf{W}_{n-1}^Y \rangle}, \quad \Lambda_n^{XY} = i \frac{\langle \mathbf{W}_{n-1}^X \mathcal{E} \mathbf{W}_{n-1}^Y \rangle}{\langle \mathbf{W}_{n-1}^X \mathbf{W}_{n-1}^Y \rangle}.$$

Нормированные кросс-корреляционные функции памяти в (11) в новых ортогональных динамических переменных могут быть представлены в следующем виде:

$$M_n^{XY}(t) = \frac{\langle \mathbf{W}_n^X \{1 + i\tau \mathcal{E}_{22}\}^m \mathbf{W}_n^Y \rangle}{\langle \mathbf{W}_n^X \mathbf{W}_n^Y \rangle}.$$

Время релаксации исходной ККФ и функций памяти n -го порядка определяются следующим образом:

$$\tau_c = \Delta t \sum_{j=0}^{N-1} c(t_j), \quad \dots, \quad \tau_{M_n^{XY}} = \Delta t \sum_{j=0}^{N-1} M_n^{XY}(t_j). \quad (12)$$

Множество безразмерных чисел определяет статистический спектр параметра немарковости:

$$\{\varepsilon_i^{XY}\} = \{\varepsilon_1^{XY}, \varepsilon_2^{XY}, \dots, \varepsilon_{n-1}^{XY}\}, \quad \varepsilon_1^{XY} = \frac{\tau_c}{\tau_{M_1^{XY}}}, \quad \varepsilon_2^{XY} = \frac{\tau_{M_1^{XY}}}{\tau_{M_2^{XY}}}, \quad \dots, \quad \varepsilon_{n-1}^{XY} = \frac{\tau_{M_{n-1}^{XY}}}{\tau_{M_n^{XY}}}. \quad (13)$$

Таким образом, величина ε_{n-1}^{XY} характеризует отношение времен релаксации для функций памяти M_{n-1}^{XY} и M_n^{XY} . С помощью параметра немарковости можно разделить все стохастические процессы на марковские, немарковские и квазимарковские. Спектр параметра немарковости определяет стохастические особенности ККФ.

В данной работе будет использоваться частотно-зависящий случай параметра немарковости:

$$\varepsilon_i^{XY} = \left\{ \frac{\mu_{i-1}^{XY}(\nu)}{\mu_i^{XY}(\nu)} \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (14)$$

Здесь $\mu_i^{XY}(\nu)$ – Фурье-образ i -й функции памяти:

$$\mu_0^{XY}(\nu) = \left| \Delta t \sum_{j=0}^{N-1} c(t_j) \cos 2\pi \nu t_j \right|^2, \quad \mu_1^{XY}(\nu) = \left| \Delta t \sum_{j=0}^{N-1} M_1^{XY}(t_j) \cos 2\pi \nu t_j \right|^2, \quad \dots,$$

$$\mu_i^{XY}(\nu) = \left| \Delta t \sum_{j=0}^{N-1} M_i^{XY}(t_j) \cos 2\pi \nu t_j \right|^2, \quad \dots$$

Значение первой точки параметра немарковости на нулевой частоте определяется следующим образом:

$$\varepsilon_1^{XY}(\nu=0) = \varepsilon_1^{XY}(0) = \left\{ \frac{\mu_0^{XY}(0)}{\mu_1^{XY}(0)} \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (15)$$

Используя первую точку параметра немарковости $\varepsilon_1^{XY}(\nu)$, можно детально рассмотреть поведение исходной ККФ и функции памяти первого порядка.

Представленная выше цепочка немарковских конечно-разностных кинетических уравнений (11) представляет обобщение известной в статистической физике кинетической теории Цванцига-Мори на случай кросс-корреляций в дискретных негамильтоновых сложных системах. Статистическая теория дискретных немарковских случайных процессов позволяет выявить в исходных временных сериях эффекты марковости и немарковости, эффекты долго- и кратковременной статистической памяти, эффекты случайности и периодичности, эффекты динамической перемежаемости релаксационных режимов.

3. Коэффициент корреляции

Для оценки степени коррелированности двух случайных величин в математической статистике используется понятие коэффициента корреляции. Коэффициентом корреляции $k(X, Y)$ двух случайных величин X и Y , дисперсии которых существуют и отличны от нуля, называется число:

$$k(X, Y) = \frac{\text{cov}(X, Y)}{\sigma_X \sigma_Y},$$

где $\text{cov}(X, Y)$ есть ковариация случайных величин X и Y ; σ_X , σ_Y – их среднеквадратические отклонения [26]. Коэффициент корреляции обладает следующими основными свойствами:

1. Если случайные величины X и Y независимы, то $k(X, Y) = 0$. Обратное утверждение в общем случае не верно.

2. $|k(X, Y)| \leq 1$.

3. Говорят, что X и Y являются положительно коррелированными, если $k(X, Y) > 0$; отрицательно коррелированными, если $k(X, Y) < 0$; некоррелированными, если $k(X, Y) = 0$.

Смысл знака коэффициента корреляции состоит в том, что при $k(X, Y) > 0$ возрастанию значений случайной величины X соответствует увеличение значений Y ; при $k(X, Y) < 0$ увеличению одной случайной величины соответствует уменьшение другой. Если $|k(X, Y)| < 0.5$, то говорят, что X и Y слабокоррелированы; случай $|k(X, Y)| \geq 0.5$ соответствует сильной корреляции между двумя случайными величинами.

4. Экспериментальные данные.

Нейромагнитные отклики коры головного мозга человека

В данной работе мы представляем анализ перекрестных корреляций, проявляющихся в динамике визуально вызванных нейромагнитных откликов затылочной и височной областей коры головного мозга здоровых людей (группа из 9 человек) и пациента с ФЧЭ. Фоточувствительная эпилепсия представляет собой разновидность эпилепсии, при которой эпилептические приступы провоцируются ритмическими световыми вспышками. Медицинские исследования показывают, что наиболее опасным стимулом, вызывающим эпилептический приступ, является комбинация мерцающих всплесков голубого и красного цветов с частотой 10–30 Гц.

Исходный сигнал представляет собой изменение во времени тангенциальной составляющей переменного магнитного поля, генерируемого различными участками коры головного мозга человека. Регистрация экспериментальных данных осуществлялась при помощи 61 SQUID-датчиков (SQUID, Superconducting QUantum Interference Device – сверхпроводящий квантовый интерференционный детектор), расположенных на поверхности головы. Разрешающая способность датчиков очень высока. SQUID-сенсоры способны регистрировать магнитные поля с точностью до 10^{-15} Тл [24, 25]. Во время эксперимента перед волонтером устанавливался экран, на который с помощью двух видеопроекторов проецировался мерцающий красно-голубой стимул (частота 30 Гц). Экран расположен таким образом, что восприятие стимула сопровождалось минимальными движениями глаз [24, 25].

Затылочная и височная области головного мозга человека выбраны согласно их физиологическим функциям. В затылочной области коры головного мозга расположен зрительный центр (сенсоры с номерами 51, 52, 53). Нервные пути, передающие визуальную информацию в зрительный центр, проходят вблизи височных долей мозга (30-й, 34-й – датчики расположены в лево-височной области, 56-й, 57-й – в правовисочной).

5. Анализ и обсуждение полученных результатов

На рис. 1 представлены исходные временные серии, зарегистрированные SQUID-детекторами, расположенными в височной (56-й сенсор, правый висок) и затылочной (51-й сенсор) областях коры головного мозга здорового человека (рис. 1а) и пациента с ФЧЭ (рис. 1б). Динамика сигналов, продуцируемых корой головного мозга здорового человека, характеризуется более крупномасштабными флуктуациями. Квазипериодический характер динамики сигнала, представленного на рис. 1а, непосредственно связан с

нормальными физиологическими ритмами, проявляющимися в биоэлектрической активности мозга. Первые 200 мс регистрируется «контрольный» сигнал, т.е. в это время на экран не подается мерцающий стимул. На исходных сериях этот период характеризуется меньшей амплитудой колебаний величины магнитного поля. У здорового человека, при включении мерцающего стимула, отмечается резкое увеличение среднего значения регистрируемого параметра, у пациента – появление более значительных флуктуаций в исходном сигнале.

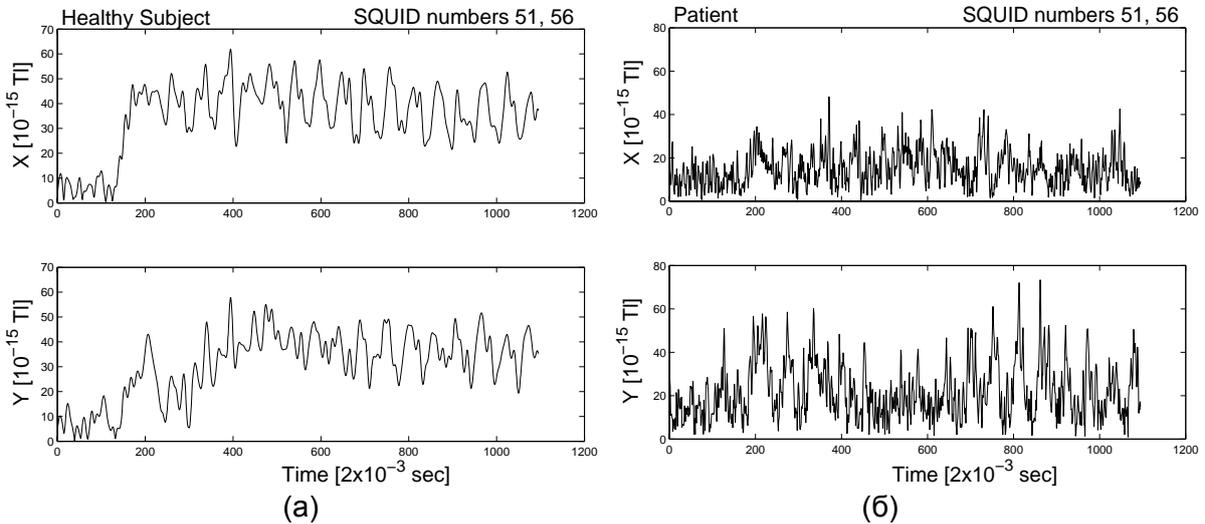


Рис. 1. Исходные временные серии величины магнитного поля, генерируемого затылочной (51-й датчик) и височной (56-й датчик) областями коры головного мозга, (а) – здорового человека (6-й испытуемый) и (б) – пациента с ФЧЭ

На рис. 2 представлены четыре плоские проекции фазовых портретов для различных комбинаций ортогональных динамических переменных. Из большого числа возможных проекций фазовых облаков (всего шестнадцать) мы представили лишь некоторые. Фазовые портреты, построенные для сигналов, продуцируемых височной и затылочной областями коры головного мозга здорового человека и пациента с ФЧЭ, имеют заметные структурные различия.

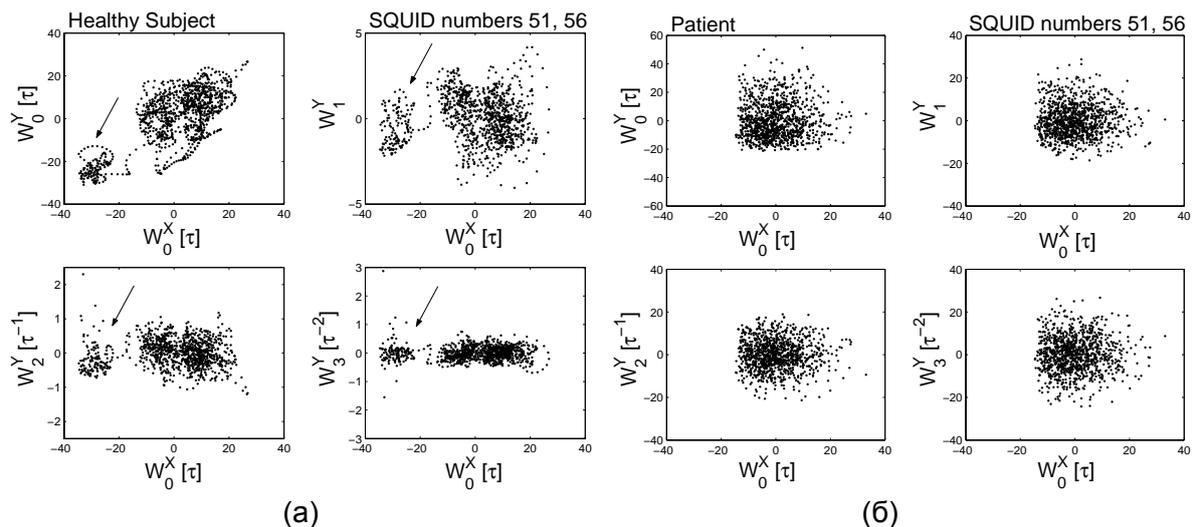


Рис. 2. Четыре плоские проекции фазовых облаков для различных комбинаций ортогональных динамических переменных для нейромагнитных откликов коры головного мозга (а) – здорового человека и (б) – пациента с ФЧЭ

Фазовые портреты для сигналов мозга здорового человека (рис. 2а) разделены на две сходные по структуре неравные части, меньшая из которых (показана стрелкой) соответствует динамике величины магнитного поля до мерцающего стимула. В момент

ответствует динамике величины магнитного поля до мерцающего стимула. В момент включения стимула можно обнаружить «фазовый переход», отчетливо различимый в изменениях величины магнитного поля (рис. 1а).

Совершенно другая картина наблюдается в фазовых портретах для больного человека (рис. 2б). Фазовые облака отличаются стратификацией (обратите внимание на масштаб). Однородность концентрации фазовых точек свидетельствует о том, что при включении стимула не происходит «фазовых изменений» в динамике величины магнитного поля.

Таким образом, можно предположить, что в функционировании головного мозга здорового человека обнаруживается некий защитный механизм, активизирующийся при неблагоприятных внешних воздействиях и блокирующий развитие высокого коллективного возбуждения нейронов в коре и подкорковых областях (эпилептический приступ). При ФЧЭ действие этого механизма нарушается или угнетается.

На рис. 3 представлены спектры мощности исходной ККФ и трех функций памяти более высокого порядка, вычисленных для динамики сигналов мозга здорового человека (рис. 3а) и пациента с ФЧЭ (рис. 3б). Спектр мощности исходной ККФ для сигналов мозга здорового человека имеет ярко выраженную фрактальную структуру. На спектре заметен всплеск на частоте 10 Гц, который можно отождествить с α -ритмом (затылочная область) и τ -ритмом (право-височная область).

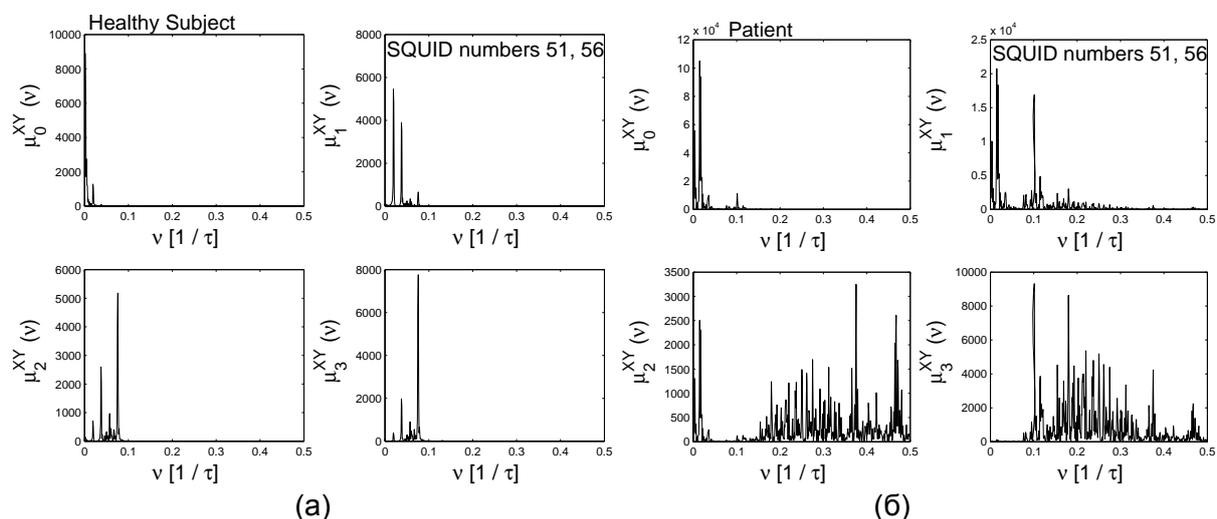


Рис. 3. Спектры мощности исходной ККФ и функций памяти старшего порядка, вычисленные для нейромагнитных откликов затылочной и височной областей коры головного мозга: (а) – здорового человека и (б) – пациента с ФЧЭ

Спектры мощности функций памяти старшего порядка характеризуются наличием нескольких значительных пиков в области низких частот (до 50 Гц) и сильной фрактальностью в других областях.

При ФЧЭ поведение спектров мощности исходной ККФ и функций памяти кардинально меняется. Заметно нарушение фрактальной структуры спектра мощности исходной ККФ, увеличение в 100 раз (!) пика, связанного с $\alpha(\tau)$ -ритмами, возникновение группы всплесков на частоте 50 Гц. На спектрах мощности кросс-корреляционных функций памяти появляются значительные всплески, перекрывающие область средних и высоких частот. Амплитуда некоторых пиков сравнима с высотой всплеска, связанного с $\alpha(\tau)$ -ритмами. Таким образом, при ФЧЭ в биоэлектрической активности головного мозга человека появляются дополнительные квазипериодические процессы.

Частотные спектры первых трех точек статистического параметра немарковости, построенные для динамики магнитоэлектрической активности затылочной (зрительной) и височной областей коры головного мозга здорового человека и больного с ФЧЭ,

представлены на рис. 4. Осциллирующая низкоамплитудная структура в частотной зависимости первой точки параметра немарковости, вычисленной для сигналов мозга здорового человека, при ФЧЭ сменяется значительными амплитудными всплесками. Полностью изменяется частотное поведение второй точки параметра немарковости: значительный амплитудный всплеск из области низких частот смещается в область более высоких частот. В частотном спектре третьей точки параметра немарковости сильные всплески в области средних и высоких частот при ФЧЭ пропадают.

Значение первой точки параметра немарковости на нулевой частоте (далее – «параметр немарковости») позволяет количественно оценить проявление эффектов долго- и кратковременной памяти в исследуемой стохастической динамике. Большое значение данного параметра соответствует случаю кратковременной памяти (марковский процесс), значение порядка единицы свидетельствует о наличии в изучаемой стохастической динамике сильных немарковских эффектов. Для сигналов мозга здорового человека (6-й испытуемый) и больного с ФЧЭ, зарегистрированных с 51-го и 56-го сенсоров, значения данного параметра различаются в 4.5 раза. Отношение среднего значения параметра немарковости для группы здоровых людей к величине данного параметра, вычисленного для нейромагнитных откликов коры головного мозга больного человека, составляет 23.25 (!) (сенсоры 51-й – 56-й).

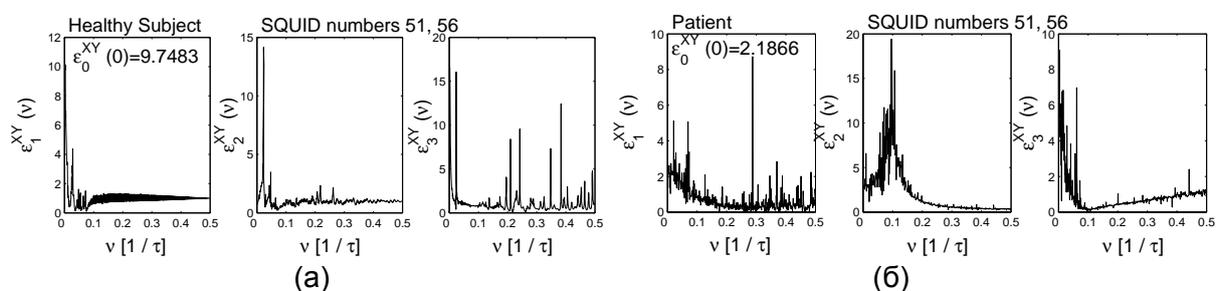


Рис. 4. Частотные зависимости первых трех точек статистического параметра немарковости для динамики магнитного поля, продуцируемого затылочной и височной областями коры головного мозга (а) – здорового человека и (б) – пациента с ФЧЭ

Анализ значений параметра немарковости для группы здоровых людей (среднее значение) и пациента с ФЧЭ позволяет разделить все комбинации сенсоров на 3 группы:

1) пары сенсоров (51–57), (52–57), (53–57), (53–30), (53–34) – значения параметра немарковости для сигналов, продуцируемых этими участками, для здоровых людей и пациента с ФЧЭ сопоставимы. Таким образом, взаимодействие между перечисленными участками коры головного мозга человека при возникновении ФЧЭ сильно не изменяется;

2) комбинации сенсоров (51–56), (51–34), (52–56), (53–56) – в коллективной активности данных участков эффекты долговременной статистической памяти у пациента с ФЧЭ проявляются значительно сильнее (~ 10 раз) чем у здоровых людей. Взаимодействие между сигналами, генерируемыми этими участками, при ФЧЭ критическим образом нарушается. Полученные результаты позволяют определить направление распространения аномального коллективного возбуждения нейронов коры головного мозга человека;

3) комбинации сенсоров (51–30), (52–30), (52–34) – в данном случае наблюдается обратная, по сравнению с предыдущим случаем, картина – небольшие значения параметра немарковости для группы здоровых людей. Коллективная динамика сигналов в этом случае у больного человека характеризуется снижением эффектов долговременной памяти, что указывает на ослабление синхронизации в деятельности этих участков при ФЧЭ.

Сопоставление значений коэффициентов корреляции показывает, что для всех комбинаций сенсоров у здоровых людей проявляется более сильная коррелированность между сигналами коры головного мозга ($k \sim 0.4-0.5$), чем у пациента с ФЧЭ ($k \sim 0.1-0.3$). Таким образом, при ФЧЭ наблюдается снижение коллективной синхронизации между сигналами затылочной и височной областями коры головного мозга.

5. Заключение

В работе представлен новый метод анализа и кинетического описания кросс-корреляций между сигналами, генерируемыми отдельными частями или компонентами сложных составных систем. Данный метод основан на теории дискретных немарковских случайных процессов. С помощью техники проекционных операторов Цванцига-Мори определен широкий спектр динамических и статистических параметров и характеристик, предоставляющих детальную информацию о перекрестных корреляциях.

В работе выполнен анализ временных серий магнитной составляющей визуально вызванной биоэлектрической активности затылочной и височной областей коры головного мозга здоровых людей и пациента с ФЧЭ. Регистрация сигналов осуществлялась при помощи SQUID-сенсоров.

Сопоставительный анализ исходных временных серий был проведен на основе фазовых портретов различных комбинаций ортогональных динамических переменных, спектров мощности исходной кросс-корреляционной функции и функций памяти, частотной зависимости первых трех точек параметра немарковости, а также значений коэффициента корреляции.

Полученные результаты свидетельствуют: (i) о более сильной коррелированности между сигналами нейромагнитных откликов, продуцируемых различными участками коры головного мозга здоровых людей, (ii) о наличии в деятельности головного мозга здорового человека защитного механизма, предотвращающего коллективное возбуждение нейронов, свойственное для ФЧЭ, (iii) о возможности идентификации областей, взаимодействие между которыми заметно нарушается при ФЧЭ.

Полученные результаты позволяют существенно расширить представления о кросс- и мульти-корреляциях, проявляющихся в сложных временных сериях.

Настоящая работа поддержана фондами: *грант Федерального агентства по образованию Министерства образования и науки РФ № РНП.2.1.1.741, грант РФФИ № 05-02-16639-а. Авторы выражают благодарность Dr. S. Shimojo (CalTech, USA), Dr. J. Bhattacharya (Austrian Academy of Sciences, Austria; University of London, UK) за предоставленные экспериментальные данные и плодотворную научную дискуссию, Хуснутдинову Р.М. (ТГПУ, Россия) за помощь в проведении численных расчетов.*

Литература

1. Altmann E.D., Kantz H. Recurrence time analysis, long-term correlations, and extreme events. // Phys. Rev. E. 2005. Vol. 71. P. 056106-1-9.
2. Rigozo N.R., Echer E., Nordemann D.J.R et al. Comparative study between four classical spectral analysis methods. // Appl. Math. Comput. 2005. Vol. 168. No. 1. P. 411-430.
3. Bickel D.R., Verklan M.T., Moon J. Detection of anomalous diffusion using confidence intervals of the scaling exponent with application to preterm neonatal heart rate variability. // Phys. Rev. E. 1998. Vol. 58. No. 5. P. 6440-6448.
4. Javors'kyj I., Isayev I., Zakrzewski Z., Brooks S.P. Coherent covariance analysis of periodically correlated random processes. // Signal Process. 2007. Vol. 87. No. 1. P. 13-32.
5. Liebovitch L.S., Yang W. Transition from persistent to antipersistent correlation in biological systems. // Phys. Rev. E, 1997. Vol. 56. No. 4. P. 4557-4566.

6. Stanley H.E., Meakin P. Multifractal phenomena in physics and chemistry. // *Nature*. 1988. Vol. 335. P. 405–409.
7. Wolf A., Swift J.B., Swinney H.L., Vastano J.A. Determining Lyapunov exponents from a time series. // *Physica D*. 1985. Vol. 16. P. 285–317.
8. Schreiber T., Schmitz A., Classification of time series data with nonlinear similarity measures. // *Phys. Rev. Lett.* 1997. Vol. 79. P. 1475–1478.
9. Timmer J., Lauk M., Deuschl G. Quantitative analysis of tremor time series. // *Electroencephalogr. Clin. Neuro.* 1996. Vol. 101. No. 5. P. 461–468.
10. Ivanov P.Ch., Rosenblum M.G., Peng C.K. et al. Scaling behaviour of heartbeat intervals obtained by wavelet-based time-series analysis. // *Nature*. 1996. Vol. 383. P. 323–327.
11. Timmer J., Lauk M., Pflieger W., Deuschl G. Cross-spectral analysis of physiological tremor and muscle activity. I Theory and application to unsynchronized electromyogram. // *Biol. Cybern.* 1998. Vol. 78. P. 349–357.
12. Timmer J., Lauk M., Pflieger W., and Deuschl G. Cross-spectral analysis of physiological tremor and muscle activity. II Application to synchronized electromyogram. // *Biol. Cybern.* 1998. Vol. 78. P. 359–368.
13. Wigner E.P. On a class of analytic functions from the quantum theory of collisions. // *Ann. Math.* 1951. Vol. 53. P. 36–67.
14. Goychuk I., Hänggi P. Stochastic resonance in ion channels characterized by information theory. // *Phys. Rev. E*. 2000. Vol. 61. No. 4. P. 4272–4280.
15. Goychuk I., Hänggi P. Non-Markovian stochastic resonance. // *Phys. Rev. Lett.* 2003. Vol 91. P. 070601-1–4.
16. Yulmetyev R., Mokshin A., Hänggi P. Diffusion time-scale invariance, randomization processes, and memory effects in Lennard-Jones liquids. // *Phys. Rev. E*. 2003. Vol. 68. P. 051201-1–5.
17. Yulmetyev R., Mokshin A., Scopigno M., Hänggi P. New evidence for the idea of time-scale invariance of relaxation processes in simple liquids: the case of molten sodium. // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2003. Vol. 15. P. 2235–2257.
18. Yulmetyev R., Gafarov F., Hänggi P., Nigmatullin R., Kayumov S. Possibility between earthquake and explosion seismogram differentiation by discrete stochastic non-Markov processes and local Hurst exponent analysis. // *Phys. Rev. E*. 2001. Vol. 64. P. 066132-1–14.
19. Yulmetyev R.M., Mokshin A.V., Hänggi P. Universal approach to overcoming nonstationarity, unsteadiness and non-Markovity of stochastic processes in complex systems. // *Physica A*. 2005. Vol. 345. P. 303–325.
20. Yulmetyev R., Hänggi P., Gafarov F. Stochastic dynamics of time correlation in complex systems with discrete current time // *Phys. Rev. E*, 2000. Vol. 62. P. 6178–6194.
21. Yulmetyev R., Hänggi P., Gafarov F. Quantification of heart rate variability by discrete nonstationary non-Markov stochastic processes. // *Phys. Rev. E*. 2002. Vol. 65. P. 046107-1–15.
22. Yulmetyev R.M., Demin S.A., Panishev O.Yu., Hänggi P. Age-related alterations of relaxation processes and non-Markov effects in stochastic dynamics of R-R intervals variability from human ECGs. // *Physica A*. 2005. Vol. 353. P. 336–352.
23. Yulmetyev R.M., Demin S.A., Panishev O.Yu., Hänggi P., Timashev S.F., Vstovsky G.V. Regular and stochastic behavior of Parkinsonian pathological tremor signals. // *Physica A*. 2006. Vol. 369. P. 655–678.
24. Watanabe K., Imada T., Nihei K., Shimojo S. Neuromagnetic responses to chromatic flicker: Implications for photosensitivity. // *Neuroreport*. 2002. Vol. 13. P. 2161–2165.
25. Bhattacharya J., watanabe K., Shimojo Sh. Nonlinear dynamics of evoked neuromagnetic responses signifies potential defensive mechanisms against photosensitivity. // *Int. J. Bif. Chaos*. 2004. Vol. 14. P. 2701–2720.
26. <http://ru.wikipedia.org>

БИОИНФОРМАЦИОННЫЙ ПОДХОД В РАЗВИТИИ СИЛОВОЙ ВЫНОСЛИВОСТИ У ЧЕЛОВЕКА

Е.А. Серобабина

**(Санкт-Петербургская государственная академия физической культуры
им. П.Ф. Лесгафта)**

Научный руководитель – д.м.н., профессор А.А. Потапчук

**(Санкт-Петербургская государственная академия физической культуры
им. П.Ф. Лесгафта)**

Проведены исследования биохимических и биофизических процессов, протекающих в клетках мышц человека. Выявлена закономерность изменения интенсивности лимфотока при физической нагрузке и электромагнитном воздействии. Предложена методика ускоренного развития силовой выносливости.

Чтобы понять все процессы, которые протекают в организме человека, необходимо его рассматривать как взаимосвязанный биофизический и биохимический объект. Известно, что при работе в мышечных тканях идет ускоренный распад глюкозы, что приводит к активизации мышечных тканей и накоплению продуктов распада непосредственно в мышцах, одним из главных компонентов является молочная кислота [1, 2]. Молочная кислота создает кислотную среду в мышечных тканях, а это, в свою очередь, приводит к замедлению реакции распада глюкозы, и мышцы начинают уставать. Производительность мышц падает, и наступает момент, когда сокращение мышц прекращается. Поэтому разработка методов ускоренного развития силовой выносливости является актуальной задачей как для спортсменов, так и для людей, занимающихся физической зарядкой.

Основной целью работы является разработка метода компенсации влияния молочной кислоты и быстрого вывода продуктов распада из мышц при физической нагрузке.

Для достижения поставленной цели проводились исследования биохимических процессов, протекающих в клетках мышц, и их взаимосвязи с биофизическими процессами.

Характер протекания биохимических процессов и взаимосвязь с биофизическими процессами в клетках мышечных тканей при работе рассмотрим на примере модели клетки и межклеточного пространства. Обозначим эту пару, соответственно, сосуд I и сосуд II. В соответствии со структурой построения клеток между клетками существует полупроницаемая клеточная перегородка. Через эту перегородку могут диффундировать ионы. Положим, что в начале опыта концентрация ионов в обоих сосудах одинакова, и разность потенциалов между сосудами отсутствует. Тогда, если температура в клетках одинакова, то и гидростатическое давление в обоих сосудах одно и то же.

Поддадим теперь на клетки небольшой мощности сигнал внешнего источника, создаваемая разность потенциалов меньше, чем необходимо для нарушения равновесия ионов и образования новых химических соединений. Концентрация нейтральных молекул в первом сосуде будет возрастать, а во втором сосуде понижаться, так как эти молекулы не могут пройти через полупроницаемую перегородку, появляется разность давлений между частями I и II, так называемое осмотическое давление. Под действием осмотического давления появляется обратный ток ионов через перегородку, который скомпенсирует поток этих ионов, вызванный электромагнитным полем, и установит новое термодинамическое равновесие. Чем выше амплитуда внешнего электромагнитного поля, тем выше уравнивающее осмотическое давление. Таким образом, получаем преобразование электрической разности потенциалов в изменение давления или в акустические колебания, возникающие на разделе двух клеток.

Установим теперь основные соотношения для электрокинетического преобразователя. При разности потенциалов ($\varphi_1 - \varphi_2$) между сторонами I и II равновесие в преобразователе установится, если химические потенциалы ионов по обе стороны перего-

родки будут одинаковы. Химический потенциал Q , т.е. термодинамический потенциал, отнесенный к одной молекуле клеточной жидкости, является функцией давления (при постоянной температуре), заряда иона и электрического потенциала, под которым он находится в растворе: $Q^{\pm} = Q \pm ve\phi c$. Здесь v – валентность иона; e – заряд электрона; ϕ – потенциал клеточной жидкости; c – относительная концентрация ионов в жидкости; $Q = Q(T, P)$ – химический потенциал незаряженной частицы; Q^{\pm} – то же для заряженно-го «+» или «-» иона.

На стороне I, на которой давление повысилось на величину ΔP по сравнению со стороной II, химический потенциал незаряженной частицы, в линейном приближении, $Q = Q(T, P_0) + dQ/dP \cdot \Delta P$, где P_0 – давление на стороне II. Тогда для заряженной частицы на стороне I: $Q_1 = Q(T, P_0) + dQ/dP \cdot \Delta P - ve\phi_1 c$ и на стороне II: $Q_2 = Q(T, P_0) - ve\phi_2 c$.

При наступлении равновесия после подачи разности потенциалов $U = \phi_1 - \phi_2$ химические потенциалы сравниваются ($Q_1 = Q_2$), и $dQ/dP \cdot \Delta P = ve(\phi_1 - \phi_2) c = vec U$. Производная термодинамического потенциала по давлению дает объем вещества при данной температуре. Так как потенциал отнесен к одной молекуле клеточной жидкости, то $dQ/dP = v$ – объем одной молекулы жидкости, так что после наступления равновесия, когда скорость движения электролита через перегородку $x = 0$, получим

$$\Delta P|_{x=0} = vec U/v = (vec F/V)U, \quad (1)$$

где $F = eN$ – число Фарадея, N – число Авогадро, $V = vN$ – объем граммoleкулы, $c = n/N$, n – число ионов на граммoleкулу.

Если число ионов на граммoleкулу составляет n и заряд одного иона ve , то плотность тока, текущего через перегородку (т.е. обратного по знаку в электролите), составит:

$$J = -xnve/V = -xcvF/V. \quad (2)$$

Таким образом, в линейном приближении из (1) и (2) соотношение взаимности получается в виде:

$$\Delta P/U|_{x=0} = -j/x|_{U=0} = M = cvF/V. \quad (3)$$

Если площадь пор перегородки, через которую течет ток, составляет A_0 , а рабочая площадь подвижных стенок-поршней A , то полная сила давления $\Psi = A_0 \Delta P$, скорость движения поршней $x_n = xA_0/A$ и полный ток через перегородку $I = jA_0$. Тогда формально можно записать уравнения данного преобразователя:

$$\begin{aligned} \Psi &= \gamma_{U=0} x_n + AMU, \\ I &= -AMx_n + U|_{z_{x=0}}. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь $\gamma_{U=0}$ – механическое сопротивление преобразователя при отсутствии напряжения, $z_{x=0}$ – электрическое сопротивление преобразователя. Эти уравнения можно привести к виду

$$\begin{aligned} \Psi &= \gamma_{i=0} x_n + M_i I, \\ I &= M_i x_n + z_{x=0} I, \end{aligned} \quad (5)$$

где $M_i = z_{x=0} MA$, $\gamma_{i=0} = \gamma_{U=0}$.

На ионы заряженного двойного слоя в тангенциальном поле напряженности E_i действует сила $F_i = -qE_i$, если поверхностная плотность зарядов ионов составляет q , эта сила уравновешивается вязкими силами около поверхности пор:

$$\mu d^2 v/d^2 y = -qE_i, \quad (6)$$

где μ – коэффициент вязкости; v – скорость жидкости у поверхности; y – координата, нормальная к поверхности поры. С другой стороны, для потенциала ϕ электрического поля, создаваемого ионами, можно написать:

$$d^2 \phi / d^2 y = -4\pi q/\epsilon, \quad (7)$$

где ϵ – диэлектрическая проницаемость жидкости. Комбинируя (6) и (7), получим

$$\mu d^2 v/d^2 y = (\epsilon qE_i/4\pi) d^2 \phi / d^2 y. \quad (8)$$

Это уравнение интегрируется:

$$v = (\varepsilon E_i / 4\pi\mu) + A y + B. \quad (9)$$

Так как скорость при бесконечном удалении от поверхности пор не может возрастать до бесконечности, то $A = 0$. В непосредственной близости от поверхности пор, где пограничный слой жидкости покоится ($v = 0$), потенциал принимает некоторое значение φ_x , тогда $B = -\varepsilon E_i \varphi_x / (4\pi\mu)$, и на большом удалении, где φ_x перестает нарастать (за пределами внешнего слоя ионов двойного слоя), скорость жидкости будет:

$$V_0 = \varepsilon E_i (\varphi_0 - \varphi_s) / (4\pi\mu) = \varepsilon E_i \xi / (4\pi\mu), \quad (10)$$

где $(\varphi_0 - \varphi_s) = \xi$ – падение потенциала в подвижной части двойного слоя. Если ввести эквивалентную толщину двойного слоя d , то (10) можно записать в виде:

$$V_0 = [\varepsilon / (4\pi d)] d E_i \xi / \mu = dq E_i / \mu, \quad (11)$$

где $\varepsilon / (4\pi d)$ имеет смысл эквивалентной емкости на толщине двойного слоя на единицу поверхности.

Подсчитаем величину плотности тока, переносимого жидкостью через поры под действием разности давления по обе стороны перегородки. Можно считать, что на толщине подвижной части двойного слоя d скорость жидкости линейно нарастает до величины V_0 . Тогда сила вязкого сопротивления на единицу поверхности пор $F = \mu v_0 / d$. Переносимый со скоростью v_0 на границе слоя заряд q создает плотность тока на единицу длины контура поры $j = q v_0$. Таким образом, в отсутствии тангенциального электрического поля $F = \mu j / (dq)$, так что вместе с (11) это дает

$$F/j|_{E=0} = U/v_0|_{F=0} = \mu / (dq) = 4\pi \mu / (\varepsilon \xi). \quad (12)$$

$4\pi \mu / (\varepsilon \xi) = M$ – коэффициент взаимности в линейном приближении. Если полная площадь пор S , а длина их l , то полная сила при проталкивании жидкости $\Psi = SF$, полный ток

$i = jS/l$, полное напряжение $U = E_i l$, так что

$$\Psi/i|_{U=0} = 4\pi \mu l / (\varepsilon \xi). \quad (13)$$

Теперь, подставляя значение тока, протекающего в клетках, с учетом выражения (5) и условий гармонического сигнала с частотой ω и внутреннего колебательного процесса клетки с частотой Ω можно получить уравнения преобразования электрического сигнала в акустические колебания в форме

$$\Psi = (4\pi \mu l / (\varepsilon \xi)) \cos[(\omega - \Omega)t]. \quad (14)$$

Таким образом, получено уравнение преобразования электрического сигнала в акустические колебания, которое характеризует низкочастотную вибрацию клеток при физических нагрузках. Наличие акустического сигнала, возникающего в процессе взаимодействия внутреннего электромагнитного поля, позволяет разработать новый подход в развитии силы и физической выносливости у человека. Здоровые клетки в организме человека являются также генераторами электромагнитных волн и не только в инфракрасном диапазоне, но и в более низкой области частот. В основе излучения электромагнитных волн (ЭМВ) лежат внутренние замкнутые токи, протекающие в клетке. Такие токи создают ЭМВ и магнитное излучение. Знание характеристик этих полей позволило разработать метод электромагнитной стимуляции клеток для компенсации молочной кислоты и ускоренного вывода продуктов распада из клеточной и межклеточной структуры мышц, что в свою очередь увеличивает производительность мышц и время непрерывной работы, то есть выносливость мышц.

Проведенные исследования акустических свойств мышц бицепса до нагрузки, после нагрузки и после стимуляции электромагнитным полем приведены в виде спектров акустических сигналов и представлены на рис. 1–3. Энергетическая составляющая, соответствующая частоте 0,5 Гц, характеризует центральную составляющую лимфатической системы человека, а центральная частота 1,1 Гц характеризует колебательный процесс кровяной системы человека (сердечные сокращения человека). Частотный спектр, который находится выше 1,1 Гц, характеризует индивидуальные особенности человека [3].

Анализ спектров показывает, что при физической нагрузке увеличивается интенсивность спектральных составляющих лимфатической системы человека, а при обработке электромагнитным полем она возрастает в несколько раз. Интенсивность кровотока при физической нагрузке практически не меняется, а частота максимальной составляющей кровотока увеличивается. При электромагнитной обработке мышц частота и интенсивность составляющих кровотока не изменяется. Увеличение интенсивности составляющих лимфатической системы будет благоприятно сказываться на компенсации молочной кислоты в мышцах и способствовать быстрому выводу продуктов распада.

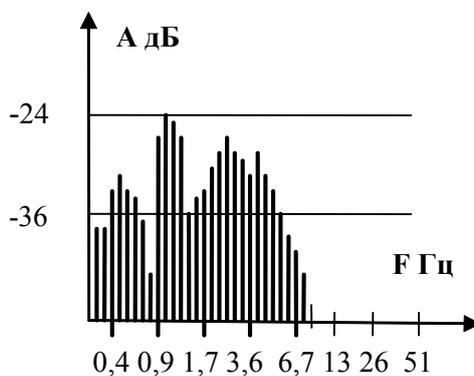


Рис. 1. Спектр акустического сигнала с бицепса до нагрузки

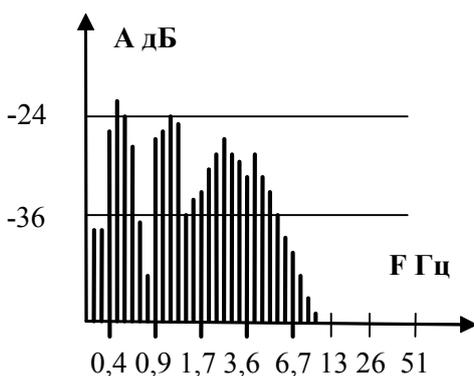


Рис. 2. Спектр акустического сигнала с бицепса после нагрузки

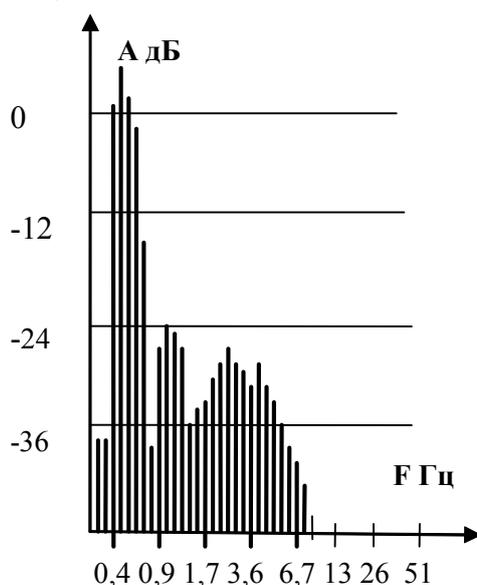


Рис. 3. Спектр акустического сигнала с бицепса после обработки мышц электромагнитным полем

Таким образом, зная основные биофизические характеристики лимфатической системы и воздействуя внешним источником на параметры лимфатической системы человека, можно добиться существенного увеличения амплитуды лимфотока в мышцах человека (внешний источник входит в резонанс с лимфатической системой).

Для подтверждения теоретических положений был проведен эксперимент. В качестве внешнего источника электромагнитных волн использовалась модифицированная лампа Д'Арсонваля с модуляционными параметрами лимфатической системы человека. К испытаниям привлекались физически здоровые люди в возрасте 19–25 лет, в количестве 10 человек. Контингент испытуемых делился на две группы: контрольную – 5 человек и испытуемую – 5 человек. Всем предлагалось выполнить одно упражнение – поднимать гантели, весом 6 кг, путем сгибания локтевого сустава до полного утомления. Контрольная группа не подвергалась обработке электромагнитным полем, а у испытуемой группы мышцы рук обрабатывались лампой Д'Арсонваля до и после нагрузки.

Эксперимент продолжался в течение десяти дней. Результаты эксперимента, усредненные по количеству испытуемых, представлены в виде графика (рис. 4). На графике изображены: 1 – результат выполнения упражнения испытуемой группой; 2 – результат выполнения упражнения контрольной группой.

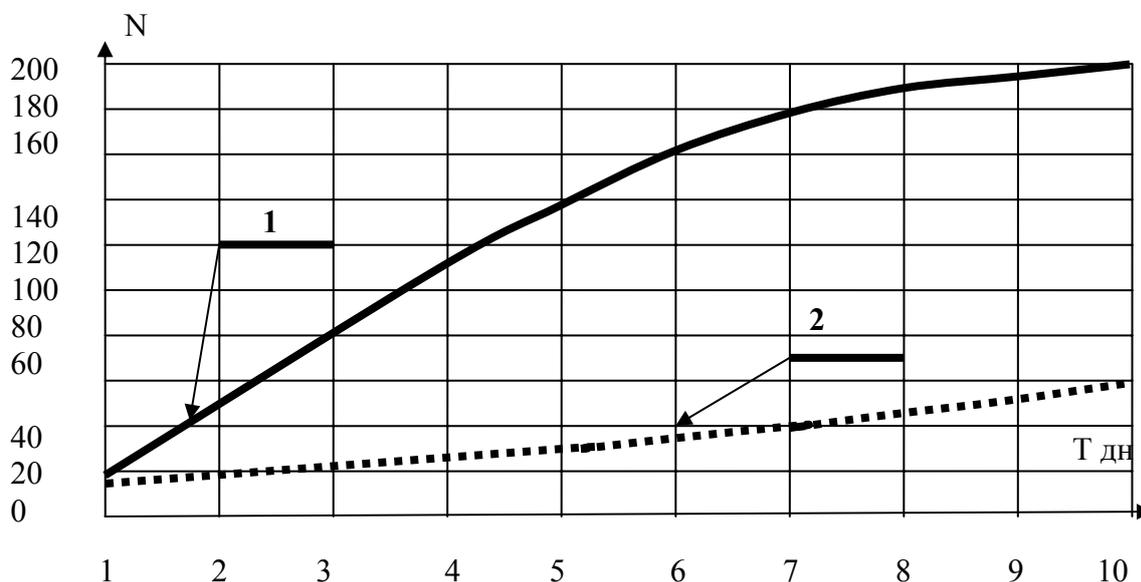


Рис. 4. Результаты выполнения физических упражнений, усредненных по количеству испытуемых. Т – дни испытаний; N – количество подъемов гантелей в один заход

Как следует из графика, усредненный результат контрольной и испытуемой групп существенно отличается. Если контрольная группа за 10 дней увеличила результат в 3 раза, то испытуемая группа увеличила свой результат практически в 11 раз.

Испытуемые, подняв в первый день гантели 17 раз, весом шесть килограмма каждая, на 10 день поднимают гантели около 200 раз. Физически здоровые люди в течение 10 дней, после обработки мышц рук лампой Д'Арсонваля, увеличивают силовую выносливость практически в 10–12 раз. Воздействие внешнего электромагнитного поля на мышцы раскрыло внутренний физический потенциал человека за очень короткий срок. В данном случае, за трое суток физический потенциал увеличился практически в 4 раза, при этом не наблюдались боли в мышцах.

Подводя итог проведенным теоретическим и экспериментальным исследованиям, можно сделать следующие выводы: проведенный биоинформационный подход в оценке основных физических параметров человека и использование полученных результатов для внешней стимуляции мышц позволяет увеличить силовую выносливость чело-

века практически в 10 раз. Увеличение интенсивности лимфотока нейтрализует действие молочной кислоты в мышцах и увеличивает скорость вывода продуктов распада, что позволяет практически полностью устранить боли в мышцах и обеспечить эластичность мышц после силовой нагрузки.

Литература

1. Потапчук А.А. Адаптивная физическая культура в работе с детьми, имеющими нарушения опорно-двигательного аппарата. СПб: СПбГАФК им. П.Ф. Лесгафта, 2003. 228 с.
2. Серобабина Е.А. Раскрытие потенциальных физических возможностей человека. // Адаптивная физическая культура. 2003. № 3. С. 36–37.
3. Серобабина Е.А., Серобабин А.Т. Акустический метод диагностики функциональной деятельности мозга человека. // II Евразийский конгресс по медицинской физике и инженерии «Медицинская физика-2005» М.: МГУ им. М.В. Ломоносова. С. 228–229.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РЕГУЛЯРИЗАЦИИ К ЗАДАЧЕ СИНТЕЗА ОДНОРОДНОГО ПОЛЯ В КАТУШКЕ МР-ТОМОГРАФА

В.О. Евсеев

Научный руководитель – д.т.н., профессор В.С. Сизиков

Рассматривается задача формирования высокооднородного магнитного поля на оси катушки МР-томографа путем отыскания соответствующего закона распределения тока J вдоль обмотки катушки. Задача сводится к интегральному уравнению, которое решается методом регуляризации Тихонова с ограничениями на искомый закон изменения J (неотрицательность и монотонность). Решение численных примеров показывает, что $J = \text{const}$ вдоль большей части катушки, кроме ее краев, где ток возрастает на 2–3 порядка. Это позволяет сформировать поле в рабочей области с относительной однородностью $\sim 10^{-4} - 10^{-5}$.

Введение

Среди различных задач магнитно-резонансной томографии (МР-томографии) одной из наиболее важных является задача формирования высокооднородного магнитного поля в некоторой рабочей области МР-томографа [1–10]. Высокая однородность поля (порядка 1–10 ppm) необходима для получения высококачественных томограмм [7, с. 51–52].

Задача формирования (синтеза) высокооднородного поля решается различными способами, в первую очередь, в зависимости от типа магнита, формирующего магнитное поле. Если используется постоянный магнит, то задача решается путем определения некоторой формы магнита (содержащего магнитные наконечники и углубления сложного профиля в наконечниках) [2, 5, 6, 10]. Если используется резистивный или сверхпроводящий электромагнит в виде набора соленоидальных корректирующих катушек, то задача сводится к определению параметров катушек [4, 9, 11, 12]. Если рассматривается набор изолированных осесимметричных тонких и толстых витков, то задача сводится к определению параметров витков [3]. Существует еще один вариант решения задачи синтеза магнитного поля, когда рассматривается одна тонкая или толстая катушка и требуется определить закон распределения тока вдоль обмотки такой (несоленоидальной) катушки [1]. Данная работа посвящена дальнейшему развитию задачи синтеза магнитного поля применительно к последнему варианту [7, с. 55–61], [8, 13], [14, pp. 213–224].

Постановка задачи и ее математическое описание

Рассмотрим следующую *обратную задачу* МР-томографии: определить распределение плотности тока $J(a)$ вдоль бесконечно тонкой обмотки цилиндрической катушки по заданной напряженности $H(z)$ на ее оси (в частности, $H(z) = \text{const}$). Это – *задача интегрального синтеза* магнитного поля на оси катушки МР-томографа [2, 13, 15]. Здесь a – координата вдоль обмотки катушки, z – координата вдоль ее оси.

Катушка в случае $J(a) \neq \text{const}$ называется *соленоидом с переменной плотностью тока*, или *соленоидом с неоднородным распределением тока* [12, с. 37]. Чтобы сформировать неоднородное распределение тока в катушке, можно использовать разбиение обмотки на ряд изолированных секций [12, с. 37] или сформировать изолированные витки с индивидуальной подводкой нужного тока $J(a)$ [7, с. 57], [8].

Пусть R – радиус катушки, l – ее полудлина. Тогда напряженность поля в некоторой точке $z \in (-\infty, +\infty)$ на оси катушки будет равна [1, 7, 8, 13, 14]

$$H(z) = \int_{-l}^l \frac{J(a)R^2 da}{\sqrt{[R^2 + (z-a)^2]^3}}, \quad -\infty < z < \infty, \quad (1)$$

причем некоторый коэффициент пропорциональности перед интегралом мы для упрощения записей положили равным единице.

Вычисление поля $H(z)$ по заданному току $J(a)$, согласно (1), есть *прямая задача*. Исследование прямой задачи показало [8, 13, 14], что при $J(a) = \text{const}$ поле $H(z)$ падает от центра катушки к ее краям, а вне катушки $H(z) \sim |z|^{-3}$ при $|z| \rightarrow \infty$.

Теперь рассмотрим гораздо более сложную задачу – *обратную задачу* (или *задачу синтеза*) – определение распределения тока $J(a)$ по заданному полю $H(z)$. Запишем (1) в виде

$$\int_{-l}^l \frac{R^2}{\sqrt{[R^2 + (z-a)^2]^3}} J(a) da = H(z), \quad -l < z < l. \quad (2)$$

Соотношение (2) является *интегральным уравнением Фредгольма I рода*. В нем $H(z)$ – заданная правая часть (напряженность магнитного поля на оси катушки), в частности, $H(z) = H = \text{const}$, а $J(a)$ – искомая функция (распределение тока вдоль обмотки). Задача решения уравнения (2) является *некорректной* (неустойчивой) [7, 14, 16, 17].

Введем безразмерные переменные: $s = a/R$, $x = z/R$, $s_0 = l/R$. Тогда уравнение (2) запишется в виде:

$$\int_{-s_0}^{s_0} K(x,s) J(s) ds = H(x), \quad -s_0 \leq x \leq s_0, \quad (3)$$

где ядро интегрального уравнения

$$K(x,s) = K(x-s) = \frac{1}{\sqrt{[1 + (x-s)^2]^3}}. \quad (4)$$

Решение уравнения (3) методом регуляризации с ограничениями

Некорректность задачи решения уравнения (2) и (3) проявляется в том, что его численное решение различными методами (квадратур, итераций и др.) [7, 14, 16, 17] является очень неустойчивым [1], [7, с. 58]. Поэтому необходимо применение устойчивых методов решения, например, метода регуляризации Тихонова [7, 14, 16, 17]. При этом эффективность этого метода можно повысить, если дополнительно использовать априорные данные о искомом решении $J(s)$.

В работах [8, 13, 14] установлены следующие *свойства функции $J(s)$* :

- 1) если $H(-x) = H(x)$, то $J(-s) = J(s)$;
- 2) $J(s) \rightarrow \infty$ при $s = -s_0 + 0$ и $s = s_0 - 0$;
- 3) $J(s) \geq 0$;
- 4) $J(s)$ монотонно возрастает от центра катушки ($s = 0$) к ее краям ($s = \pm s_0$), т. е.

функция $J(s)$ является четной, сингулярной, неотрицательной и кусочно монотонной.

Кроме того, уравнение (3) может быть приведено к виду [8, 13, 14]:

$$\int_{-s_0}^0 R(x,s) J(s) ds = H(x), \quad -s_0 \leq x \leq 0, \quad (5)$$

где новое ядро равно

$$R(x,s) = \frac{1}{\sqrt{[1+(x+s)^2]^3}} + \frac{1}{\sqrt{[1+(x-s)^2]^3}}. \quad (6)$$

Использование уравнения(5) позволяет искать решение $J(s)$ лишь в левом полупространстве $s \in (-s_0, 0]$, после чего в правом полупространстве $J(s) = J(-s)$, $s \in [0, s_0]$ в силу четности $J(s)$. При этом в левом полупространстве функция $J(s)$, $s \in (-s_0, 0]$, является неотрицательной монотонно невозрастающей (от левого края к центру катушки). А для функций такого класса существует вариант метода регуляризации Тихонова с ограничениями на решение [17, с. 118]. В этом варианте метода выполняется минимизация сглаживающего функционала с использованием ограничений на решение в виде его неотрицательности и монотонности при каждом значении параметра регуляризации $\alpha > 0$. Данный вариант метода реализован в программе РТИРР на фортране [17, с. 118, 174], в которой выполняется минимизация сглаживающего функционала методом проекции сопряженных градиентов на множество неотрицательных монотонно невозрастающих функций.

Численный пример

С помощью программы РТИРР был решен следующий *пример* (типа примеров в работах [1], [7, с. 57]). При этом в работах [8, 14] было использовано значение $s_0 = 1$. Однако, как было показано в [13], наиболее однородное поле формируется при $s_0 = 0.5$. Поэтому в данной работе мы положим $s_0 = 0.5$, кроме того, шаг дискретизации $h = \Delta s = \Delta x = 0.00625$, число шагов дискретизации в левом полупространстве $n = s_0 / h = 80$, общее число витков в катушке $N = 2n + 1 = 161$, напряженность поля $H(x) = H = \text{const} = 1$, $x \in [-s_0, s_0]$.

Задача решалась для ряда значений параметра регуляризации α . На рис. 1 отображены полученные регуляризованные (устойчивые) решения $J_\alpha(s)$ при $\alpha = 10^{-4}$ (кривая 1), $\alpha = 1.1 \cdot 10^{-5}$ (кривая 2) и $\alpha = 10^{-6}$ (кривая 3).

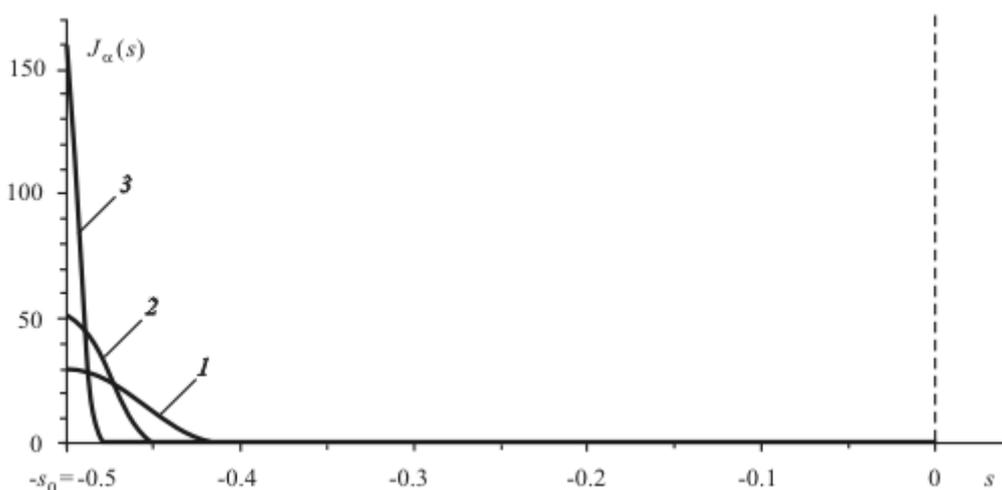


Рис. 1. Регуляризованные решения (распределения тока вдоль обмотки катушки) $J_\alpha(s)$ с ограничениями.

1 — $\alpha = 10^{-4}$, 2 — $\alpha = 1.1 \cdot 10^{-5}$, 3 — $\alpha = 10^{-6}$

На рис. 2 представлены соответствующие найденным решениям $J_\alpha(s)$ распределения напряженности магнитного поля (ср. (5))

$$H_\alpha(x) = \int_{-s_0}^0 R(x,s) J_\alpha(s) ds, \quad -s_0 \leq x \leq 0, \quad (7)$$

при $\alpha = 10^{-4}$ (кривая 1), $\alpha = 1.1 \cdot 10^{-5}$ (кривая 2) и $\alpha = 10^{-6}$ (кривая 3).

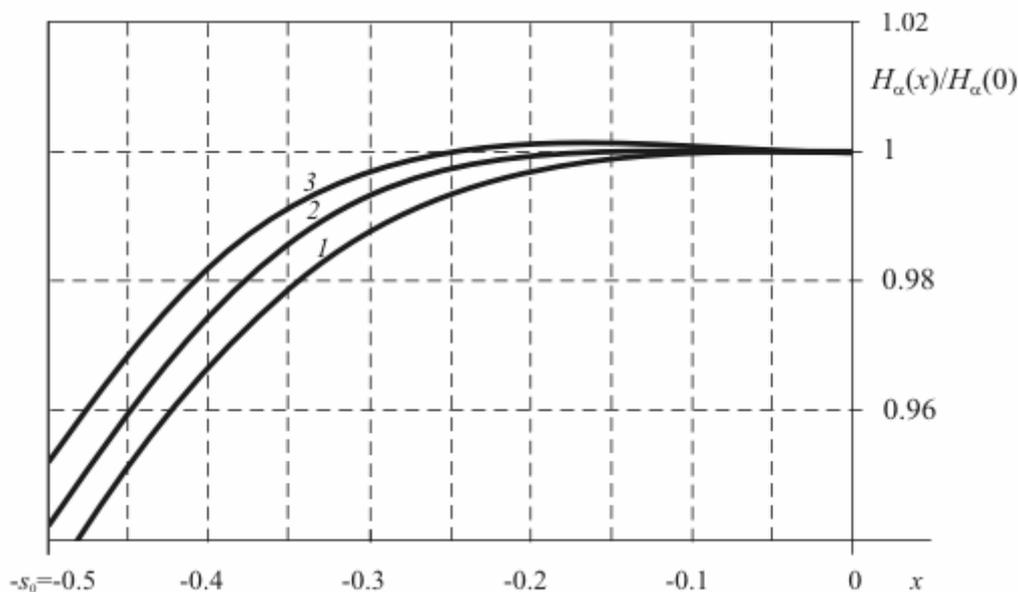


Рис. 2. Регуляризованные распределения напряженности магнитного поля вдоль оси катушки $H_\alpha(x)$

$$1 - \alpha = 10^{-4}, \quad 2 - \alpha = 1.1 \cdot 10^{-5}, \quad 3 - \alpha = 10^{-6}$$

При этом интегралы в (5) и (7) вычислялись по квадратурной формуле трапеций с постоянным шагом h .

Рис. 1 показывает, что с уменьшением α отношение $J_\alpha(-s_0)/J_\alpha(0)$ возрастает, и решение $J_\alpha(s)$ в пределе при $\alpha \rightarrow 0$ переходит в сингулярную функцию. При этом при любом α функция $J_\alpha(-s)$ сохраняет свою монотонность (в противоположность результатам моделирования в работе [1], в которой при решении интегрального уравнения методом регуляризации Тихонова не использовались ограничения на решения).

Рис. 2 показывает, что для некоторого умеренного (оптимального) значения α (в данном примере $\alpha_{\text{opt}} \approx 1.1 \cdot 10^{-5}$) относительная неоднородность поля

$$\Delta H_{\alpha_{\text{отн}}}(x) = \frac{|H_\alpha(x) - H_\alpha(0)|}{H_\alpha(0)} = \left| \frac{H_\alpha(x)}{H_\alpha(0)} - 1 \right| \quad (8)$$

равна $\approx 10^{-4} - 10^{-5}$ для $|x| \in [0, 0.15] = [0, 0.3]s_0$.

Заключение

1. Применение метода регуляризации Тихонова без ограничений на решение для решения задачи синтеза магнитного поля на оси катушки МР-томографа хотя и стабилизирует решение, но при малых значениях параметра регуляризации α решение $J_\alpha(s)$ имеет флуктуации тем большие, чем меньше α , как это видно из работ [1], [7, с. 58].

2. При использовании метода регуляризации Тихонова с ограничениями на реше-

ние флуктуации в решении $J_\alpha(s)$ исчезают даже при очень малых значениях α (см. рис. 1).

3. Как видно из рис. 1, при $\alpha \rightarrow 0$ решение $J_\alpha(s)$ переходит в сингулярную функцию типа δ -функции, что практически означает, что катушка должна состоять в основном из витков с однородным распределением тока, за исключением нескольких крайних витков, в которых ток нарастает к краям катушки.

4. Значение параметра регуляризации α , а, значит, и закон нарастания тока $J_\alpha(s)$ к краям катушки следует выбирать на основе двух критериев: отношение $J_\alpha(\pm s_0)/J_\alpha(0)$ не должно быть больше, чем $\approx 10^2 - 10^3$, иначе крайние витки могут перегореть от слишком сильного тока; относительная неоднородность поля (8) должна быть $\sim 10^{-4} - 10^{-5}$ в некоторой рабочей области.

5. Наиболее однородное поле формируется при $s_0 = l/R = 0.5$, т.е. в случае довольно короткой катушки. Это говорит о том, что практическая реализация изложенной методики будет связана с созданием весьма компактной катушки и, как следствие, малогабаритного МР-томографа.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 05-08-01304-а).

Литература

1. Adamiak K. Method of the magnetic field synthesis on the axis of cylinder solenoid // Appl. Phys. 1978. Vol. 16. P. 417–423.
2. Афанасьев Ю.В., Студенцов Н.В., Хорев В.Н. и др. Средства измерений параметров магнитного поля. Л.: Энергия, 1979. 320 с.
3. Lugansky L.B. Optimal coils for producing uniform magnetic fields // J. Phys. E: Sci. Instrum. 1987. Vol. 20. P. 277–285.
4. Тихонов А.Н., Рубашов И.Б., Арсенин В.Я. и др. О математическом проектировании конструкции ЯМР-томографа. Препринт. М.: Изд-во ИПМ АН СССР, 1987. 24 с.
5. Miyamoto T., Sakurai H., Hayashi H., Ohnishi Y. Magnetic field generating device for NMR-CT // Patent US 4672346, 1978.
6. Miyamoto T., Sakurai H., Takabayashi H., Aoki M. A development of a permanent magnet assembly for MRI devices using Nd-Fe-B materials // IEEE Transactions on Magnetics. 1989. Vol. 25, No. 5. P. 3907–3909.
7. Сизиков В.С. Математические методы обработки результатов измерений. СПб: Политехника, 2001. 240 с.
8. Сизиков В.С., Ахмадулин Р.И., Николаев Д.Б. Синтез магнитного поля вдоль оси катушки ЯМР-томографа // Изв. вузов. Приборостроение. 2002. т. 45, № 1. С. 52–57.
9. Галайдин П.А., Иванов В.А., Марусина М.Я. Расчет и проектирование электромагнитных систем магниторезонансных томографов. СПб: Изд-во СПбГУ ИТМО, 2004. 87 с.
10. Неронов Ю.И., Сизиков В.С., Соколов Д.Ю. Формирование высокооднородного поля постоянного магнита МР-томографа // Научно-техн. вестник СПбГУ ИТМО. 2006. Вып. 32. С. 129–137.
11. Дружкин Л.А. Задачи теории поля. М.: Изд-во МИРГЭ, 1964. 462 с.
12. Монтгомери Д.Б. Получение сильных магнитных полей с помощью соленоидов. М.: Мир, 1971. 359 с.
13. Иванов С.В., Рущенко Н.Г., Сизиков В.С., Соколов Д.Ю., Хомутикова Е.В. О решении задачи синтеза магнитного поля в МР-томографе методом регуляризации с ограничениями и методом аппроксимации δ -функцией. // Научно-техн. вестник СПбГИТМО (ТУ). 2003. Вып. 9. С. 105–112.

14. Petrov Yu.P., Sizikov V.S. Well-posed, ill-posed, and intermediate problems with applications. Leiden-Boston: VSP. 2005. 234 p.
15. Лухвич А.А., Чурило В.Р. Источники поляризации магнитного поля и его градиентов для я.м.р.-томографии (обзор) // ПТЭ. 1987. № 5. С. 172–173.
16. Верлань А.Ф., Сизиков В.С. Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы. Киев: Наук. думка, 1986. 544 с.
17. Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Численные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1990. 232 с.

О ВОССТАНОВЛЕНИИ СМАЗАННЫХ ТОМОГРАММ РАЗЛИЧНЫМИ МЕТОДАМИ

М.В. Римских

Научный руководитель – д.т.н., профессор В.С. Сизиков

Рассматривается задача реконструкции смазанных томографических изображений. Задача сводится к решению множества одномерных интегральных уравнений Фредгольма I рода типа свертки. Делается сравнение двух методов решения таких уравнений: метода преобразования Фурье и метода квадратур (с использованием метода регуляризации Тихонова в обоих случаях). Приведены численные результаты. Делается вывод, что метод квадратур более эффективен, чем метод преобразования Фурье.

Введение

Как известно [1], обработка изображений, в том числе томографических, включает в себя устранение искажений, распознавание образов и кодирование изображений. При этом *искажения изображений* могут быть следующих типов:

- искажения, устранение которых не требует математической обработки — царапины, штрихи на томограмме, неудачная яркость и контрастность;
- искажения, требующие примитивной математической обработки – геометрические искажения, требующие изменения масштаба по вертикали и/или горизонтали или устранения нелинейности;
- искажения, требующие сложной математической обработки – смаз, дефокусировка, зашумленность томограммы [1, 3–8].

В данной работе рассматривается задача реконструкции (восстановления, реставрации) смазанных (сдвинутых, смещенных) томографических изображений (томограмм).

Математическое описание задачи реконструкции смазанной томограммы

Рассмотрим данную задачу на примере смазанной томограммы (см. рис. 1). Полагаем, что за время экспозиции носитель томографического изображения совершил прямолинейный и равномерный сдвиг (смещение) на величину Δ . Можно также считать, что сдвиг совершил объект (подвижный пациент). В результате на носителе (томограмме) зафиксировается смазанное изображение типа рис. 1.

Определим по штрихам на томограмме направление смаза и его величину Δ . Направим вдоль смаза ось x , а перпендикулярно ему – ось y . Математически задача смазывания изображения описывается соотношением [3–8]:

$$\frac{1}{\Delta} \int_x^{x+\Delta} w(s, y) ds = g(x, y), \quad (1)$$

где $g(x, y)$ – распределение интенсивности вдоль смазанной томограммы (измеренная функция), а $w(s, y)$ – распределение интенсивности вдоль неискаженной томограммы, той томограммы, которая была бы получена в отсутствие сдвига, т.е. при $\Delta = 0$ (искомая функция). При этом sOy – неподвижная система координат, а xOy – система координат, связанная с движущимся носителем изображения.

Отметим, что под функциями $g(x, y)$ и $w(s, y)$ подразумеваются только амплитуды излучения без учета фазы (как в голографии). Отметим также, что если на томограмме фиксируется серое изображение (gray image), то под $g(x, y)$ и $w(s, y)$ будем подразумевать интенсивности $g_g(x, y)$ и $w_g(s, y)$ в сером цвете. Если же фиксируется цветное изображение (RGB image), то можно преобразовать RGB-изображение в gray-

изображение (это особенно эффективно выполняется в MatLab'e), или под записью (1) подразумеваем три соотношения для трех цветов – красного, зеленого и синего (R, G, B), причем с помощью светофильтров нужно получить распределение интенсивностей $g_R(x, y)$, $g_G(x, y)$, $g_B(x, y)$, затем восстановить $w_R(s, y)$, $w_G(s, y)$, $w_B(s, y)$ и, наконец, вычислить суммарную интенсивность $w(s, y) = w_R(s, y) + w_G(s, y) + w_B(s, y)$.

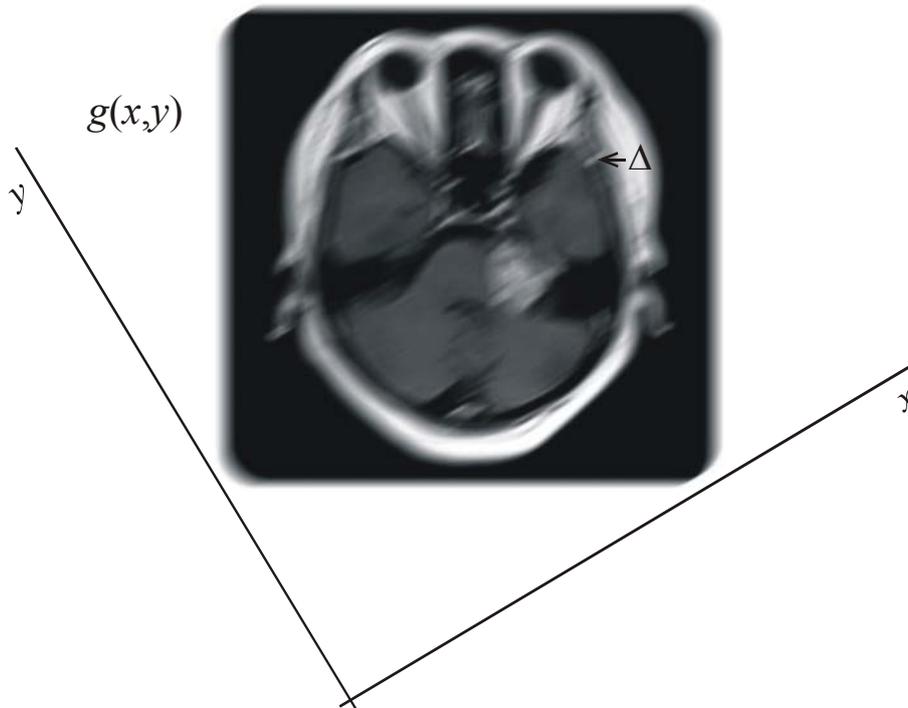


Рис. 1. Смазанная томограмма. $g(x, y)$ – распределение интенсивности по изображению, Δ – величина сдвига (смаза), ось x направлена вдоль смаза

Преобразование соотношения (1)

Соотношение (1) является неклассическим одномерным интегральным уравнением Вольтерра I рода относительно искомой функции $w(s, y)$ при каждом фиксированном значении y , играющем роль параметра, другими словами, (1) есть *множество одномерных интегральных уравнений*.

Отметим, что в ряде работ [3, 4] рассмотрены более сложные задачи – неравномерный и/или непрямолинейный сдвиг изображения и т.д.

Запишем уравнение (1) в виде (опустив для простоты y):

$$\frac{1}{\Delta} \int_x^{x+\Delta} w(s) ds = g(x), \quad (2)$$

где $w(s) \equiv w_y(s) \equiv w(s, y)$, $g(x) \equiv g_y(x) \equiv g(x, y)$.

Методы решения уравнения (2) недостаточно проработаны в виду того, что оно является неклассическим, нестандартным (оба предела интегрирования переменны, отсутствует в явном виде ядро) [9]. Однако уравнение (2) можно преобразовать к уравнению в стандартной форме, а именно, к одномерному интегральному уравнению Фредгольма I рода типа свертки [3–8]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} k(x-s) w(s) ds = g(x), \quad -\infty < x < \infty, \quad (3)$$

где

$$k(x) = \begin{cases} 1/\Delta, & x \in [-\Delta, 0], \\ 0, & x \notin [-\Delta, 0]. \end{cases} \quad (4)$$

Задачи решения уравнений (2) и (3) являются некорректными (в первую очередь, неустойчивыми), причем «степень неустойчивости» уравнения (3) выше, чем уравнения (2) [6, 7, 9]. Однако устойчивые методы решения уравнений типа (3) достаточно подробно разработаны [6, 7, 10, 11]. Основным (устойчивым) методом решения уравнения (3) считается метод преобразования Фурье (ПФ) с регуляризацией Тихонова [3, 4, 6, 7, 10, 11]. Назовем его *первым методом*.

Однако в данной работе мы хотим показать, что еще более эффективным (и также устойчивым) является метод квадратур с регуляризацией Тихонова. Назовем его *вторым методом*.

Два метода решения интегрального уравнения

Регуляризованное (устойчивое) решение уравнения (3) *методом ПФ с регуляризацией Тихонова* (первым методом) имеет вид [3–7, 10, 11]:

$$w_\alpha(s) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} W_\alpha(\omega) e^{-i\omega s} d\omega, \quad (5)$$

где регуляризованный Фурье-спектр решения равен

$$W_\alpha(\omega) = \frac{K(-\omega)G(\omega)}{L(\omega) + \alpha\omega^{2p}}, \quad (6)$$

причем

$$K(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} k(x) e^{i\omega x} dx = \frac{\sin(\omega\Delta)}{\omega\Delta} + \frac{\cos(\omega\Delta) - 1}{\omega\Delta} i, \quad (7)$$

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x) e^{i\omega x} dx \quad (8)$$

– Фурье-спектры ядра $k(x)$ и правой части $g(x)$ уравнения (3), $\alpha > 0$ – параметр регуляризации, $p = 1, 2, 3, \dots$ – порядок регуляризации (обычно $p = 1$).

При практической реализации первого метода вычисления одномерных обратного и прямого преобразований Фурье (5), (7), (8) выполняются в виде дискретного преобразования Фурье (ДПФ) или быстрого преобразования Фурье (БПФ).

Выбор α можно осуществлять, например, способом невязки или обобщенным принципом невязки [4, 10, 11]. Однако для задачи реконструкции изображений, как показала практика, более эффективен *способ подбора* (подробности см. в [5–8]).

Теперь рассмотрим решение уравнения (3) *методом квадратур с регуляризацией Тихонова* (вторым методом). Будем полагать, что при некотором фиксированном y правая часть $g(x)$ задана при $x \in [c, d]$, а функция $w(s)$ ищется при $s \in [a, b]$ (обычно $[a, b] \subseteq [c, d]$), т.е. вместо уравнения типа свертки (3) рассматривается уравнение общего типа:

$$Aw = \int_a^b k(x, s) w(s) ds = g(x), \quad c \leq x \leq d, \quad (9)$$

где

$$k(x, s) = k(x-s) = \begin{cases} 1/\Delta, & x-s \in [-\Delta, 0], \\ 0, & x-s \notin [-\Delta, 0], \end{cases} \quad (10)$$

A – оператор.

Применение *метода регуляризации Тихонова* к уравнению (9) порождает *интегральное уравнение II рода* [6, 7, 10, 11]:

$$\alpha w_\alpha(t) + \int_a^b R(t,s) w_\alpha(s) ds = F(t), \quad a \leq t \leq b, \quad (11)$$

с новым (симметричным, положительно определенным) ядром

$$R(t,s) = R(s,t) = \int_c^d k(x,t)k(x,s) dx \quad (12)$$

и с новой правой частью

$$F(t) = \int_c^d k(x,t)g(x) dx. \quad (13)$$

Для численного решения уравнения (11) используем *метод квадратур*. Полагаем, что при некотором u правая часть $g(x)$ задана, а решение $w(s)$ ищется на равномерных сетках узлов (соответственно): $x_i = c + h \cdot i$, $i = 0, 1, \dots, m$, $s_j = t_j = a + h \cdot j$, $j = 0, 1, \dots, n$, где $h = \Delta x = \Delta s = \Delta t = \text{const}$ – шаг дискретизации по x , s и t (более общие случаи неравномерных сеток рассмотрены в [6, 7, 10, 11]). Интегралы в (11)–(13) аппроксимируем конечными суммами (обычно по формуле трапеций).

В результате вместо интегрального уравнения (11) получим *систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)* [6, 7, 10, 11]:

$$(\alpha C + A^T A)w_\alpha = A^T g, \quad (14)$$

где C – некоторая диагональная матрица (в частности, единичная матрица), A – матрица $M \times N$, A^T – транспонированная матрица $N \times M$, где $M = m + 1$, $N = n + 1$ (подробности см. в [6, 7, 10, 11]).

У системы уравнений (14) матрица $\alpha C + A^T A$ является квадратной, симметричной, положительно определенной, поэтому для решения СЛАУ (14) обычно используется метод Холецкого.

Численная иллюстрация методов

Первые и второй методы проиллюстрируем численным примером. Был решен следующий *модельный пример* (ср. [6, стр. 198], [7, р. 162]). При некотором фиксированном значении u распределение интенсивности вдоль s на неискаженном томографическом изображении описывается следующей функцией (суммой 5 гауссиан):

$$w(s) = 6.5 \exp\left[-\left(\frac{s+0.66}{0.085}\right)^2\right] + 9 \exp\left[-\left(\frac{s+0.41}{0.075}\right)^2\right] + 12 \exp\left[-\left(\frac{s-0.14}{0.084}\right)^2\right] + \\ + 14 \exp\left[-\left(\frac{s-0.41}{0.095}\right)^2\right] + 9 \exp\left[-\left(\frac{s-0.67}{0.065}\right)^2\right], \quad (15)$$

$s \in [a, b]$, $a = -0.85$, $b = 0.85$, ядро $k(x)$ аппроксимировалось также гауссианой:

$$k(x) = \sqrt{\frac{q}{\pi}} e^{-qx^2}, \quad (16)$$

$q = 47$. Такое ядро примерно соответствует ядру (4) при $\Delta \approx 0.3$. Сначала решалась *прямая задача*: путем численного интегрирования вычислялась функция

$$g(x) = \int_a^b k(x-s)w(s)ds, \quad c \leq x \leq d, \quad (17)$$

на дискретной сетке узлов: $x = c, c+h, \dots, d$, причем $h=0.0125$, $c=-1$, $d=1$. Затем к значениям $g(x)$ были добавлены погрешности δg , распределенные по нормальному закону с нулевым математическим ожиданием и среднеквадратическим отклонением $\sigma = 0.05$, что соответствует относительной погрешности $\approx 1\%$.

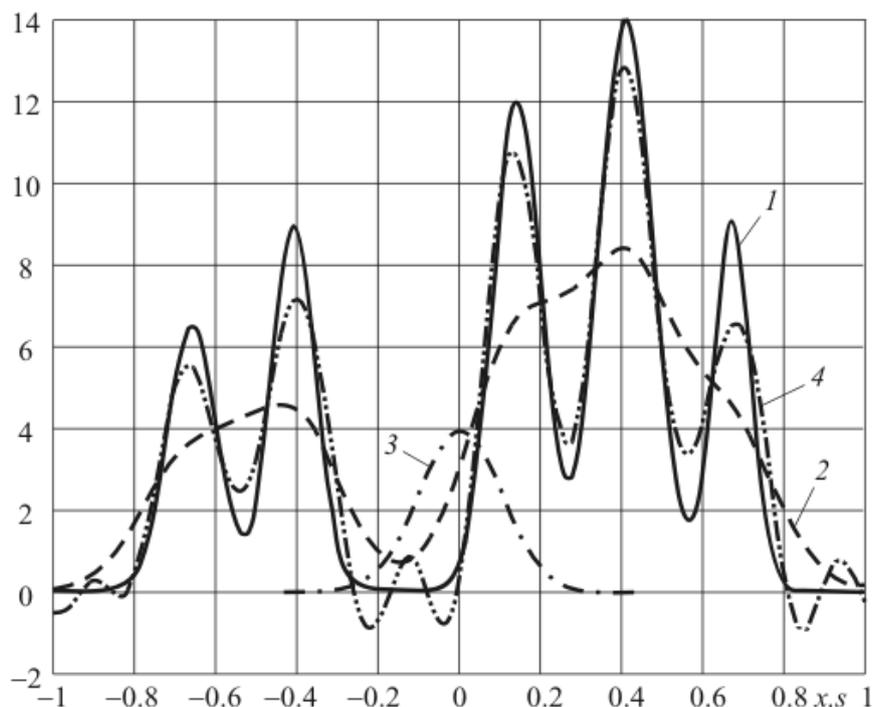


Рис. 2. Реконструкция изображения первым методом при некотором фиксированном значении y . 1 – интенсивность $w(s)$ вдоль неискаженного изображения, 2 – интенсивность $g(x)$ вдоль смазанного изображения, 3 – ядро $k(x)$ интегрального уравнения, 4 – реконструированное распределение интенсивности $w_\alpha(s)$ после перестановки частей решения на интервалах $[-1,0]$ и $[0,1]$

На рис. 2 представлены: интенсивность $w(s)$ вдоль неискаженного изображения (кривая 1), интенсивность $g(x)$ вдоль смазанного изображения (кривая 2) и ядро $k(x)$ (кривая 3). Видно, что флуктуации, присутствующие в функции $w(s)$, в значительной степени заглажены в функции $g(x)$.

Затем решалась *обратная задача* – восстановление $w(s)$ по измеренной $\tilde{g}(x) = g(x) + \delta g$ с помощью первого и второго методов.

Решение первым методом (методом ПФ с регуляризацией Тихонова) уравнения (3) с правой частью $\tilde{g}(x)$ осуществлялось по формулам (5)–(8), причем непрерывные преобразования Фурье (НПФ) заменялись дискретными преобразованиями Фурье (ДПФ). При этом использовались одинаковые носители для функций, входящих в (3): $\text{supp } k(x) = \text{supp } \tilde{g}(x) \leq [c, d]$, где $c = -1$, $d = 1$. Шаг дискретизации $h = \Delta x = \Delta s = 0.0125$, число шагов $m = (d - c) / h = 160$, а число узлов $M = m + 1 = 161$. На рис. 2 представлено регуляризованное решение (реконструированное распределение интенсивности при некотором фиксированном значении y) $w_\alpha(s)$, рассчитанное первым методом при $p = 1$, $\alpha = 10^{-8}$ (кривая 4).

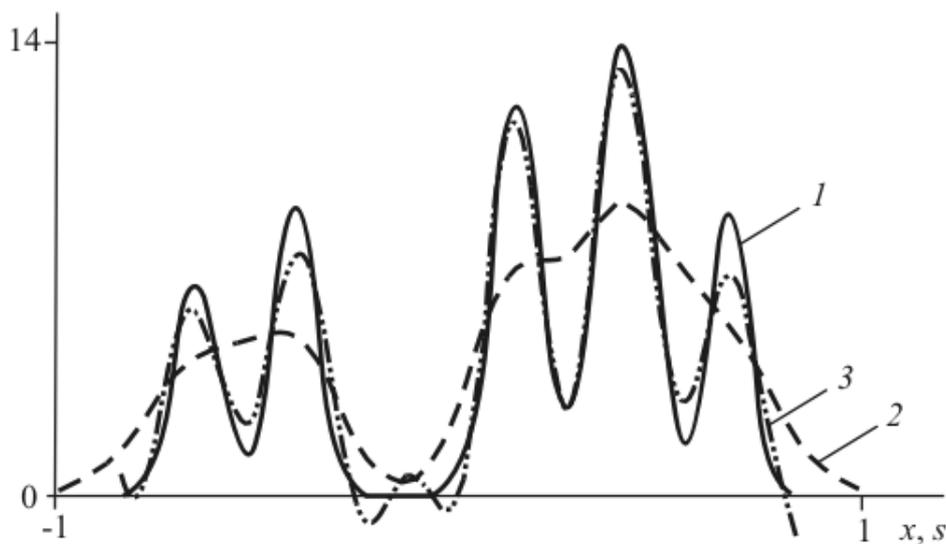


Рис. 3. Реконструкция изображения вторым методом при некотором фиксированном значении α . 1 – интенсивность $w(s)$ вдоль неискаженного изображения, 2 – интенсивность $g(x)$ вдоль смазанного изображения, 3 – реконструированное распределение интенсивности $w_\alpha(s)$

Решение вторым методом (методом квадратур с регуляризацией Тихонова) уравнения (9) с правой частью $\tilde{g}(x)$ осуществлялось по формулам (11)–(14) на сетках узлов: $x = c, c+h, \dots, d$, $s = a, a+h, \dots, b$, $t = a, a+h, \dots, b$, причем $a = -0.85$, $b = 0.85$, число узлов по x равно $M = 161$, а по s и t равно $N = 137$. На рис. 3 представлено регуляризованное решение $w_\alpha(s)$, полученное вторым методом при $\alpha = 10^{-3.5}$ (кривая 3).

Сравнение методов и выводы

Сравнение двух методов позволяет сделать следующие выводы.

1. Оба метода при удачно выбранных направлении смаза изображения, величине смаза Δ и параметре регуляризации α позволяют достаточно эффективно восстанавливать смазанные томографические изображения (см. рис. 2 и 3, а также [5], [6, стр. 65], [7, р. 193–197]).
2. Точность восстановления обоих методов приблизительно одинакова. Причем оба метода дают на краях, а также в местах широкой нулевой области решения ложные знакопеременные флуктуации – проявление эффекта Гиббса. Этот эффект можно исключить, полагая $w_\alpha(s) = 0$, если $w_\alpha(s) < 0$. Но можно использовать более совершенный подход, а именно, метод регуляризации Тихонова с ограничением на решение $w_\alpha(s)$ в виде его положительности [11, стр. 118]. Однако такой подход наиболее эффективен при использовании только квадратур, но не ПФ.
3. При программировании первого метода требуются лишь одномерные массивы, а второй метод использует как одно-, так и двумерные массивы, т.е. требует большей компьютерной памяти.
4. Первый метод вследствие замены НПФ на ДПФ отягощен такими особенностями ДПФ, как периодичность, эффект наложения, равенство длин носителей функций и др. [6, стр. 169], [11, стр. 39, 123]. В результате этого решение $w_\alpha(s)$ первым методом сначала получилось таким, как на рис. 4, а окончательное решение на рис. 2 (кривая 4) получено путем смещения решения $w_\alpha(s)$, $s < 0$ вправо на период $d - c = 2$, другими словами, пу-

тем перестановки частей решения на интервалах $[-1,0]$ и $[0,1]$. Второй метод такими особенностями неотягощен.

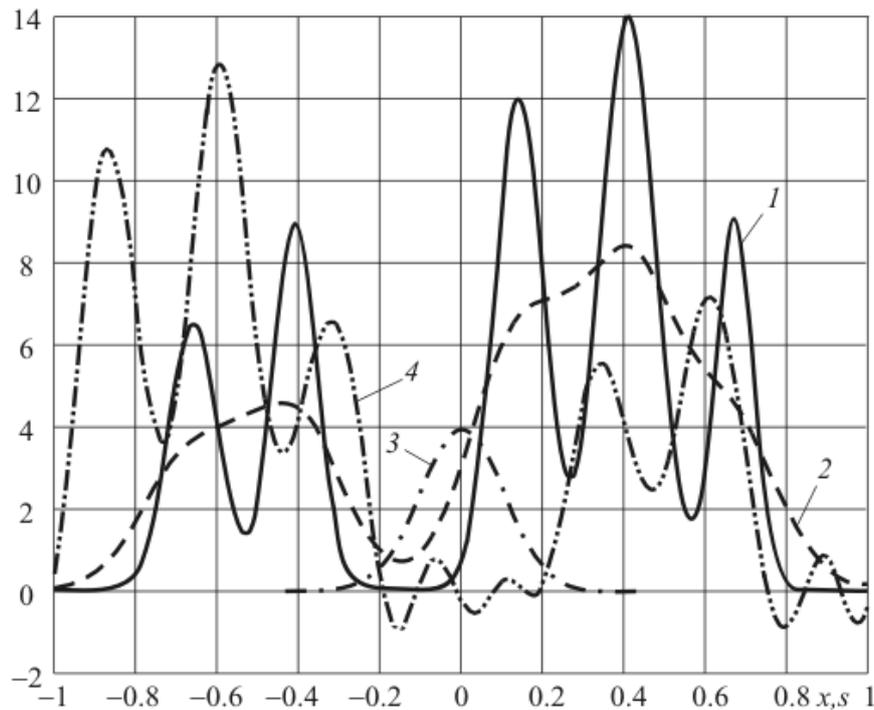


Рис. 4. Реконструкция изображения первым методом при некотором фиксированном значении y . 1, 2, 3 — как на рис. 2, 4 — реконструированное распределение интенсивности $w_\alpha(s)$ без перестановки частей решения

5. Если в первом методе использовать БПФ для ускорения обработки, то это потребует, чтобы при каждом значении y число отсчетов M вдоль x (см. рис. 1) было целой степенью числа 2, иначе измерения функции g нужно искусственно добавлять нулями или же использовать обычное ДПФ, что может понизить скорость обработки. Во втором методе числа узлов M и N могут быть произвольными (вообще говоря, зависящими от y). Если же требуется высокая скорость обработки, то второй метод может быть модифицирован следующим образом.

Запишем решение СЛАУ (14) в виде:

$$y_\alpha = B_\alpha g, \quad (18)$$

где

$$B_\alpha = (\alpha C + A^T A)^{-1} A^T \quad (19)$$

— матрица $N \times M$, которая может быть заранее рассчитана (может быть одна и та же для всех значений y , а может быть для каждого y своя). В результате реконструкция изображения сведется к умножению матрицы B на вектор g при каждом значении y . Это — наиболее быстрый алгоритм реконструкции. Кратко говоря, второй метод реконструкции смазанных томографических изображений (метод, использующий квадратуры и регуляризацию Тихонова) обладает большими возможностями, чем первый метод реконструкции (метод, использующий преобразование Фурье и регуляризацию Тихонова)

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 05-08-01304-а).

Литература

1. Бейтс Р., Мак-Доннелл М. Восстановление и реконструкция изображений. М.: Мир, 1989. 336 с.

2. Физический энциклопедический словарь / Гл. ред. Прохоров А.М. М.: Сов. энциклопедия, 1984. 944 с.
3. Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Обратные задачи обработки фотоизображений. Некоторые задачи естествознания. / Под ред. Тихонова А.Н., Гончарского А.В. М.: Изд. МГУ, 1987. С. 185–195.
4. Бакушинский А.Б., Гончарский А.В. Некорректные задачи. Численные методы и приложения. М.: Изд. МГУ, 1989. 199 с.
5. Сизиков В.С., Белов И.А. Реконструкция смазанных и дефокусированных изображений методом регуляризации. // Оптический журнал. 2000. Т. 67. № 4. С. 60–63.
6. Сизиков В.С. Математические методы обработки результатов измерений. СПб: Политехника, 2001. 240 с.
7. Petrov Yu.P., Sizikov V.S. Well-posed, ill-posed, and intermediate problems with applications. Leiden–Boston: VSP, 2005. 234 p.
8. Сизиков В.С., Российская М.В., Козаченко А.В. Обработка смазанного изображения методами дифференцирования, преобразования Хартли и регуляризации Тихонова. // Изв. вузов. Приборостроение. 1999. Т. 42, № 7. С. 11–15.
9. Апарцин А.С. Неклассические уравнения Вольтерра I рода: теория и численные методы. Новосибирск: Наука, 1999. 193 с.
10. Верлань А.Ф., Сизиков В.С. Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы. Киев: Наукова думка, 1986. 544 с.
11. Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Численные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1990. 232 с.

ПОВЫШЕНИЕ ОДНОРОДНОСТИ ПОЛЯ ПОСТОЯННОГО МАГНИТА МР-ТОМОГРАФА

Д.Ю. Соколов

Научный руководитель – д.т.н., профессор В.С. Сизиков

Сформулирован метод эквивалентных витков определения оптимальной конфигурации постоянного магнита МР-томографа для формирования высокооднородного поля в зазоре магнита. Используется аналогия между поверхностями магнита и набором витков с током. Это позволяет при расчете поля магнита использовать формулы для магнитных полей витков с током. В методе с целью повышения однородности поля в полюсные наконечники магнита вводятся углубления сложного профиля. Параметры углублений определяются из условия минимума отклонения рассчитанного поля от однородного в рабочей области. Приведены результаты компьютерного моделирования. Произведено сравнение данного метода с другими методами (методом скалярного потенциала и др.). Магнит может быть изготовлен как из сплава с высокой коэрцитивной силой, например, Nd-Fe-B, так и из мягкого железа с подпитывающей катушкой. Даны рекомендации по учету неоднородности намагниченности, по подавлению токов Фуко и по использованию данного метода в МР-томографии.

Введение

Одной из важнейших задач МР-томографии является задача формирования (синтеза) высокооднородного магнитного поля [1–6], так как только при высокой однородности поля ($dH/H \sim 10^{-6}$) можно обеспечить получение томограмм с высоким разрешением [6], [7, с. 51–52].

Во многих работах ([1–3, 8–16] и др.) рассматриваются *постоянные магниты* из ферромагнитных материалов. Преимущество постоянных магнитов перед сверхпроводящими и резистивными магнитами состоит в том, что постоянные магниты не требуют охлаждения жидким гелием или водой и питания электричеством. Однако они создают относительно низкие поля (0.1–0.4 Тл), но это не следует считать недостатком. В последние годы многие фирмы-производители МР-томографов (General Electric, Siemens, Toshiba и др.) стали уделять внимание выпуску среднеполюсных МР-томографов, поскольку повысились их технические и алгоритмические характеристики. Высокополюсные томографы (с полем выше ≈ 1 Тл) перестали иметь существенные преимущества для клинической диагностики перед средне- и даже низкополюсными томографами (кроме ЯМР-спектроскопии *in vivo* [17], где необходимы поля > 1.5 Тл).

Расчет конфигурации (формы, геометрии) постоянного магнита, при которой формируется высокооднородное магнитное поле, требует специального алгоритмического подхода. Это связано со следующими обстоятельствами. Существует ряд хорошо разработанных методов (способов) расчета магнитных полей, создаваемых витками с током различной конфигурации (изолированные витки, соленоиды, катушки с зазором и/или пазом и т.д.) [1–6, 18–20], и все эти методы основаны на законе Био–Савара–Лапласа [1–3, 18, 21]. Сложнее обстоят дела с расчетом магнитных полей, создаваемых постоянными магнитами, и это обусловлено тем, что: а) не существует реальных магнитных зарядов–монополей [21, с. 247, 611], поэтому используются диполи, что приводит к несколько более сложному закону, чем закон Био–Савара–Лапласа; б) в постоянном магните нужно учитывать такие явления, как намагничивание и размагничивание, гистерезис, неодинаковость намагничивания, токи Фуко, неоднородность материала [1–3, 18]; в) имеет место более сложный математический аппарат расчета полей постоянных магнитов (методы скалярного и векторного потенциалов и др. [1–3, 9–13, 22–24]), чем витков с током. Тем не менее, можно отметить, что для расчета постоянных магнитов развиты следующие методы [3, с. 185]: метод отношений, метод размагничивающего фактора и метод эквивалентного соленоида, а также методы скалярного и векторного потенциалов и метод диполей [1–3, 25]. Проанализируем некоторые из этих методов.

Метод скалярного потенциала. В работах [9, 11–13] для расчета магнитного поля, создаваемого постоянным магнитом сложной конфигурации (магнит с наконечниками и углублениями), используется *скалярный магнитный потенциал* u [1–3, 9, 11, 13, 21–26]. Для потенциала u в любой односвязной области пространства, не содержащей токов, справедливо *уравнение Лапласа*, которое в сферических координатах записывается в виде [9, 25]:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial u}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} = 0, \quad (1)$$

где r, θ, φ – сферические координаты, $u = u(r, \theta, \varphi)$ – скалярный магнитный потенциал. При этом должны быть добавлены еще граничные условия. *Напряженность магнитного поля* $\mathbf{H} = \mathbf{H}(r, \theta, \varphi)$ равна

$$\mathbf{H} = -\text{grad} u \equiv -\nabla u. \quad (2)$$

Общее решение уравнения (1) имеет вид [9, 11, 13, 25]:

$$u(r, \theta, \varphi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{r}{r_0} \right)^n \left(A_n^{(m)} \cos m\varphi + B_n^{(m)} \sin m\varphi \right) P_n^m(\cos \theta), \quad r < r_0, \quad (3)$$

где

$$P_n^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m P_n(x)}{dx^m},$$

r_0 – некоторая константа (обычно радиус сферы, внутри которой ищется решение (3)), $P_n(x)$ – полиномы Лежандра, $P_n^m(x)$ – присоединенные функции Лежандра, $A_n^{(m)}, B_n^{(m)}$ – коэффициенты, определяемые из граничных условий. Если, например, для заданной конфигурации магнита известны (измерены магнитометром) значения потенциала u на некоторой поверхности в ряде ее точек, то подставляя в (3) его экспериментальные значения $u_i, i = 1, 2, \dots, K$, получим систему K уравнений, решая которую найдем некоторое конечное число коэффициентов $A_n^{(m)}, B_n^{(m)}, n = 0, 1, \dots, N, m = 0, 1, \dots, M$. После этого потенциал u можно рассчитать во всех точках пространства (при $r < r_0$) по формуле (3) с конечными верхними пределами M и N суммирования по m и n .

Если на некоторой поверхности известны производные потенциала u , т.е. компоненты напряженности поля H_x, H_y, H_z , то нужно путем дифференцирования (3) найти

$$H_x = -\frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \theta}, \quad H_y = -\frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial u}{\partial \varphi}, \quad H_z = -\frac{\partial u}{\partial r}, \quad (4)$$

а затем, подставив в (4) экспериментальные значения $(H_x)_i, (H_y)_i, (H_z)_i$, измеренные на поверхности, получим систему уравнений относительно $A_n^{(m)}, B_n^{(m)}$ [25].

Если же постоянный магнит и его магнитное поле симметричны относительно оси z , то потенциал u не зависит от φ и записывается в более простом виде [2, 13, 26]:

$$u(r, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{r}{r_0} \right)^n Z_n P_n(\cos \theta), \quad r < r_0, \quad (5)$$

где Z_n – некоторые коэффициенты, определяемые из граничных условий.

Итак, первый метод требует экспериментальных значений потенциала u (или напряженностей H_x, H_y, H_z) в ряде точек на некоторой граничной поверхности. Затем путем решения системы уравнений определяются коэффициенты $A_n^{(m)}, B_n^{(m)}$ или Z_n . И, наконец, потенциал $u(r, \theta, \varphi)$ или $u(r, \theta)$ рассчитывается по формуле (3) или (5) с ко-

нечными верхними пределами суммирования по m и n . Если расчетное поле не удовлетворяет требованиям однородности, то вводят изменения в форму магнита. При этом для каждой новой его формы нужно заново выполнить перечисленные операции, в том числе, экспериментальные измерения.

Видим, что данный метод является весьма трудоемким. Тем не менее, он позволяет решать задачу синтеза поля в самом общем виде, а именно, в случае неодинаковости намагниченности магнита, в случае наличия неоднородностей в материале магнита и т.д. Поэтому в работах [9–13] и др. использован этот метод. Отметим, что данный метод используют при настройке (доводке до оптимальной) однородности поля постоянного магнита МР-томографа, когда зарегистрированные в измерениях неоднородности поля устраняют путем внесения дополнительных ферромагнитных вкладышей.

Метод диполей [25]. В этом методе используются элементарные магниты – *диполи* [2, 18, 25]. Диполь создает в некоторой точке A магнитную напряженность [24, 25]

$$d\mathbf{H} = p \left(\frac{3(\mathbf{e}_p, \mathbf{r})\mathbf{r}}{r^5} - \frac{\mathbf{e}_p}{r^3} \right), \quad (6)$$

где $\mathbf{p} = m d\mathbf{l}$ – магнитный момент диполя, m – воображаемый магнитный заряд, $d\mathbf{l}$ – расстояние между двумя зарядами, образующими диполь, r – расстояние от диполя до точки A , \mathbf{e}_p – единичный вектор вдоль \mathbf{p} . Формулу (6) можно записать иначе:

$$d\mathbf{H} = p \frac{3 \cos(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \mathbf{e}_r - \mathbf{e}_p}{r^3}, \quad (7)$$

где \mathbf{e}_r – единичный вектор вдоль \mathbf{r} .

Для сравнения приведем формулу для напряженности магнитного поля, создаваемого элементом $d\mathbf{l}$ проводника с током I в некоторой точке A (*закон Био–Савара–Лапласа*) [18]:

$$d\mathbf{H} = \frac{\mu_0}{4\pi} I \frac{[d\mathbf{l} \times \mathbf{r}]}{r^3}, \quad (8)$$

где $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ Тл м / А – магнитная постоянная. Формула (8) часто использовалась для расчета магнитных полей, создаваемых различными проводниками с током [1–6, 18–20]. Формула (6) или (7) может быть также использована для расчета магнитных полей не отдельных диполей, а намагниченных тел (например, постоянных магнитов) путем интегрирования по телу. В частности, если тело (магнит) намагничено однородно, т.е. его намагниченность $\mathbf{J} = \text{const}$, то магнитный потенциал, создаваемый всем телом в некоторой точке A , равен [24, 25] $u = -(\mathbf{J}, \nabla V)$, где V – гравитационный потенциал, создаваемый однородным телом.

Видим, что метод диполей является также трудоемким, однако он не требует экспериментальных измерений, как метод потенциала.

Во многих работах ([1–3] и др.) использован также метод, называемый *методом эквивалентного соленоида*. Этот метод основан на аналогии между полем магнита и полем поверхностных некомпенсированных амперовых токов и, как следствие, на возможности рассматривать постоянный магнит как соленоид. Однако этот метод развит лишь для случая, когда намагниченность магнита $\mathbf{J} = \text{const}$, а таким свойством обладают лишь магниты эллипсоидальной формы или магниты с очень высокой коэрцитивной силой и остаточной намагниченностью [1–3]. Кроме того, метод эквивалентного соленоида практически не развит для случая, когда наконечники магнита имеют углубления сложного профиля. Наконец, метод эквивалентного соленоида в основном использовался для решения прямой задачи – расчета магнитного поля по заданной форме и размерам магнита, а для практики магнитов МР-томографов более важна обратная задача – расчет конфигурации магнита, при которой создается наиболее однородное

лированные витки переменного радиуса $R(z')$ (см. рис. 1) и задача заключается в отыскании закона $R(z')$ (с некоторыми ограничениями). При этом временно полагаем, что намагниченность магнита \mathbf{J} и плотность материала магнита одинаковы по всему объему магнита.

Напомним основные (известные) формулы для напряженности полей витков с током. Заметим, что формулы для полей соленоидов нам не потребуются.

Основные формулы для напряженности магнитного поля витков с током. Рассмотрим *тонкий круговой виток с током* (рис. 2). Продольная составляющая вектора магнитной напряженности, создаваемой витком в некоторой точке $M(z, r)$, равна [2, 3, 5, 6, 14, 15, 19] (в Тл)

$$H_z(z, r) = C_1 \frac{R}{2} \int_0^{2\pi} \frac{R - r \cos \varphi}{(R^2 + r^2 - 2Rr \cos \varphi + \Delta z^2)^{3/2}} d\varphi, \quad (9)$$

где $C_1 = \mu_0 I / 2\pi$, I — ток в витке (в А), R — радиус витка (в м), $\Delta z = z - z'$, причем z' — z -координата центра витка (в м).

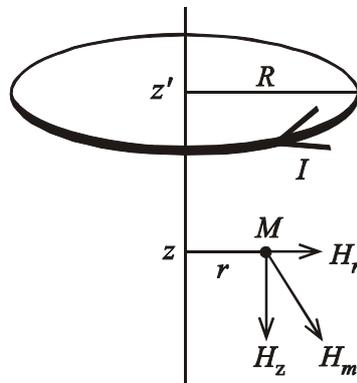


Рис. 2. Тонкий круговой виток с током

Поперечная (радиальная) составляющая равна [19]

$$H_r(z, r) = C_1 \frac{R \Delta z}{2} \int_0^{2\pi} \frac{\cos \varphi}{(R^2 + r^2 - 2Rr \cos \varphi + \Delta z^2)^{3/2}} d\varphi. \quad (10)$$

Часто [6] поперечную составляющую не учитывают, однако в некоторых областях пространства (вблизи витка) она может быть сопоставима с продольной составляющей, поэтому мы ее учитываем. Интегралы в (9) и (10) берутся аналитически, в результате (ср. [2, 3, 5, 6, 14, 15, 19])

$$H_z(z, r) = \frac{C_1}{\sqrt{(R+r)^2 + \Delta z^2}} \left[\frac{R^2 - r^2 - \Delta z^2}{(R-r)^2 + \Delta z^2} E(k) + K(k) \right], \quad (11)$$

$$H_r(z, r) = \frac{C_1 \Delta z}{r \sqrt{(R+r)^2 + \Delta z^2}} \left[\frac{R^2 + r^2 + \Delta z^2}{(R-r)^2 + \Delta z^2} E(k) - K(k) \right], \quad (12)$$

где E и K — полные эллиптические интегралы соответственно 2-го и 1-го рода с модулем

$$k = \left\{ 4Rr / [(R+r)^2 + \Delta z^2] \right\}^{1/2}, \quad (13)$$

равные [27]

$$E(k) = \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \psi} d\psi, \quad k \in [0, 1], \quad (14)$$

$$K(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\psi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \psi}}, \quad k \in [0, 1), \quad (15)$$

причем $E(0) = K(0) = \pi/2$, $E(1) = 1$, $K(1) = \infty$.

Модуль вектора магнитной напряженности, который мы обозначим через $H_m(z, r)$, равен

$$H_m(z, r) = |\mathbf{H}(z, r)| = \sqrt{H_z^2(z, r) + H_r^2(z, r)}. \quad (16)$$

Частные случаи. Если точка M находится на оси витка (т.е. $r = 0$) и $R \neq 0$, то $k = 0$ и

$$H_z(z, 0) = C_1 \pi \frac{R^2}{(R^2 + \Delta z^2)^{3/2}}, \quad H_r(z, 0) = 0, \quad H_m(z, 0) = H_z(z, 0). \quad (17)$$

Если точка M находится на витке (т.е. $\Delta z = 0$, $r = R$), то

$$H_z(z = z', r = R) = H_r(z = z', r = R) = H_m(z = z', r = R) = \infty. \quad (18)$$

Формулы (11)–(18), справедливые для отдельных круговых витков с током, могут быть использованы для расчета магнитного поля постоянного магнита сложной конфигурации, если представить такой магнит в виде набора (фиктивных) круговых витков с током. При этом нужно учитывать, что магнитное поле витков, уложенных в углубления, вычитается из магнитного поля витков, уложенных на боковые поверхности магнита и наконечников, поскольку направления некомпенсированных амперовых токов у них различные. Аналогично, поле витков, уложенных в «ямки», также вычитается из магнитного поля витков, уложенных на боковые поверхности магнита и наконечников, а поле витков, уложенных в «горки», складывается с магнитным полем витков, уложенных на боковые поверхности магнита и наконечников.

Магнит сложной конфигурации

Рассмотрим магнит в виде двух цилиндров с полюсными наконечниками (pole pieces, pole segments) и зазором (air gap). Для повышения однородности поля в работе [8], а также [9, 10, 12–16] и др. предложены различные варианты полюсных наконечников: с кольцевым выступом (annular projection) трапецеидальной, треугольной или кривообразной формы вдоль периметра наконечника, с выпуклым выступом (convex projection) дискообразной формы в центре наконечника, а также с выемкой (recess) в середине выпуклого выступа. В этих работах параметры магнита и полюсных наконечников подбирались, а затем магнитное поле рассчитывалось согласно вышеприведенному методу скалярного потенциала.

В данной работе рассмотрим магнит (рис. 1) в виде двух цилиндров с полюсными наконечниками и зазором. Внутри каждого наконечника сформируем углубление (hollow), а внутри каждого углубления – «ямку» (small pit), или выемку. В работах [9, 10, 13] внутри углубления формируется «горка» (hill), или выпуклый выступ, однако «ямка» (выемка), как показало моделирование, дает более однородное поле. Такой магнит с зазором, углублениями и «ямками» (выемками) будем называть *постоянным магнитом сложной конфигурации*.

Что касается ярма (кожуха, оболочки) магнита, то в работах [8, 9] рассмотрено несколько его вариантов: ярмо (yoke) цилиндрической формы с входным отверстием, ярмо с двумя пластинами и несколькими стержнями, ярмо в виде четырехсторонней рамы с входом и др. В работе [8] предложены также устройства для усиления магнитного поля и регулирующий механизм для изменения некоторых параметров магнита (величины зазора, диаметра полюсных наконечников и др.). Однако в данной работе

мы рассмотрим только метод определения оптимальной формы магнита, обеспечивающей высокую однородность поля.

Параметры магнита и углублений. Введем следующие обозначения. *Параметры магнита:* L – длина магнита, δ – длина наконечника, R_1 – радиус наконечника, R_2 – радиус магнита, Δ – полудлина зазора. Формы углублений и выемок аппроксимируем прямыми линиями. Прямолинейная аппроксимация наиболее проста при математической и технической реализации, а также порождает наиболее устойчивый алгоритм. Тем не менее, в дальнейшем необходимо рассмотреть и более сложные аппроксимации.

Прямолинейной аппроксимации соответствует следующая формула для радиуса витка, уложенного в углубление, в функции z' (см. рис. 1):

$$R(z') = \frac{\sigma}{g}(\Delta - |z'|) + \rho + \sigma, \quad (19)$$

и формула для радиуса витка, уложенного в выемку:

$$R(z') = \frac{\xi}{p}(\Delta + g - |z'|) + \eta + \xi. \quad (20)$$

Параметры углубления: глубина g , минимальный радиус ρ , максимальный радиус $\rho + \sigma$; *параметры выемки:* глубина p , минимальный радиус η , максимальный радиус $\eta + \xi$.

Параметры магнита L , δ , R_1 , R_2 , Δ будем считать заданными, а параметры углубления g , ρ , σ , p , η , ξ подлежащими определению.

Критерий выбора параметров углублений. В качестве *критерия выбора* оптимальных значений g , ρ , σ , p , η , ξ используем условие минимума отклонения рассчитанного поля от однородного [14–16]:

$$\varepsilon_{\text{opt}} = \min_{g, \rho, \sigma, p, \eta, \xi} \varepsilon, \quad (21)$$

где

$$\varepsilon = \frac{1}{n+1} \sum_{i=0}^n \left| \frac{H_z(z_i, 0) - H_z(0, 0)}{H_z(0, 0)} \right|, \quad (22)$$

причем n – число дискретных шагов h вдоль z от $z = 0$ до $z = \Delta/2$. Задачу минимизации (21) можно решать, используя известные методы минимизации функционалов без ограничений и с ограничениями на искомые параметры (градиента, Ньютона, координатного спуска, проекции градиента и др.) [29].

При этом *ограничения* на параметры целесообразно задавать в виде:

$$(q_i)_{\min} \leq q_i \leq (q_i)_{\max}, \quad i = 1, \dots, 6, \quad (23)$$

где $q_1 = g$, $q_2 = \rho$, $q_3 = \sigma$, $q_4 = p$, $q_5 = \eta$, $q_6 = \xi$ – искомые параметры, а значения $(q_i)_{\min}$, $(q_i)_{\max}$ следует выбирать, исходя из физико-технических ограничений на параметры, из решения близких задач и т.д.

Результаты численного моделирования

Разработан пакет программ MAGNET для определения оптимальных конфигураций цилиндрических магнитов с зазорами и наконечниками, имеющими углубления и выемки (с целью повышения однородности полей), и для расчета их магнитных полей методом эквивалентных витков. Программы разработаны на MS Fortran 5 и Fortran 90, а графика – на MathCAD, CorelDRAW и PaintBrush. Вычисления запрограммированы с двойной точностью.

Рассмотрим пример *магнита* (рис. 3), имеющего следующие *параметры* (в мм): $L = \delta = 100$, $R_1 = R_2 = 320$, $\Delta = 150$. Это – заданные параметры.

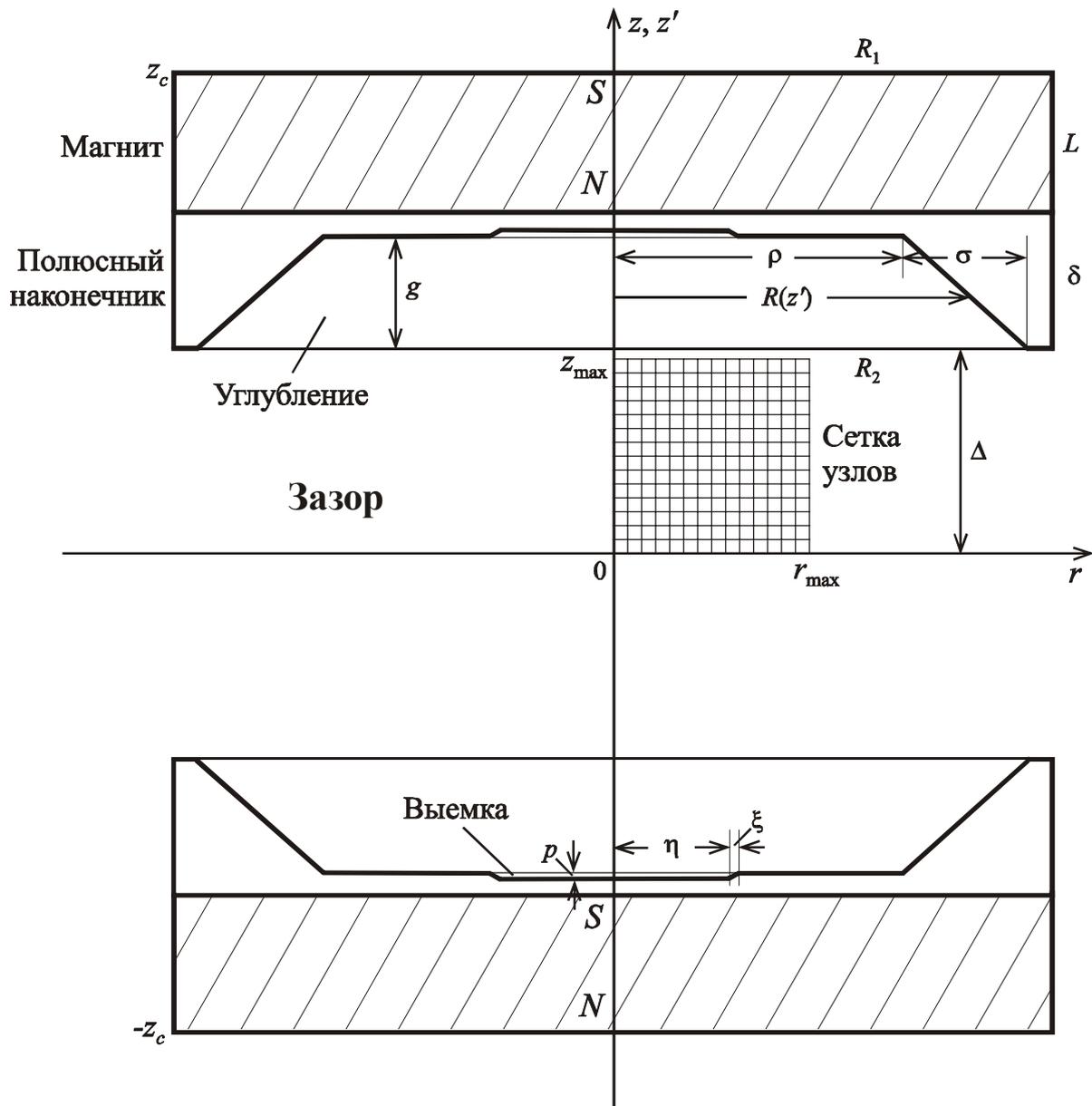


Рис. 3. Пример магнита

Для расчета компонент поля $H_z(z,r)$, $H_r(z,r)$ и $H_m(z,r)$ в зазоре задавалась *сетка узлов*: $z \in [0, z_{\max}]$, $r \in [0, r_{\max}]$ с шагом дискретизации $h = \Delta z = \Delta r = 1$ мм, где $z_{\max} = r_{\max} = 140$ мм. Суммирование по (фиктивным) виткам магнита, наконечников, углублений и выемок производилось с шагом дискретизации $\Delta z' = 0.5$ мм.

Сначала рассчитывалась функция $H_z(z,0)$ согласно (17) путем суммирования по (фиктивным) виткам, причем поля витков углублений и выемок вычитались из полей витков боковых поверхностей магнита и его наконечников. Данный расчет не требует больших затрат компьютерного времени в виду простоты формулы (17).

Искомые параметры углубления g , ρ , σ , p , η , ξ определялись путем минимизации (21)–(23) при $n = 75$, т.е. до $z = \Delta/2 = 75$ мм. При этом к ограничениям (23) добавлялись еще условия: Δ должно быть кратно Δz , а L , Δ , g и p кратны $\Delta z'$.

Были получены следующие оптимальные значения параметров (в мм): $g = g_{\text{opt}} = 81.0$, $\rho = \rho_{\text{opt}} = 209.7$, $\sigma = \sigma_{\text{opt}} = 90.6$, $p = p_{\text{opt}} = 3.5$, $\eta = \eta_{\text{opt}} = 85.5$, $\xi = \xi_{\text{opt}} = 1.37$, $\varepsilon = \varepsilon_{\text{opt}} = 2.749 \cdot 10^{-6} \approx 2.75$ ppm.

Затем при найденных оптимальных значениях параметров была рассчитана функция $H_z(0, r)$ согласно (11). На рис. 4 приведены две нормированные функции: $H_z(z, 0)/H_z(0, 0)$ и $H_z(0, r)/H_z(0, 0)$ при оптимальных значениях параметров. Результаты, отображенные на рис. 4, качественно близки результатам японских физиков [9, 10, 12, 13]. Однако в работах [9, 10, 12, 13] в основания углублений были введены так называемые «горки» (выпуклые выступы), а в данной работе введены «ямки» (выемки), что позволило получить более однородное поле.

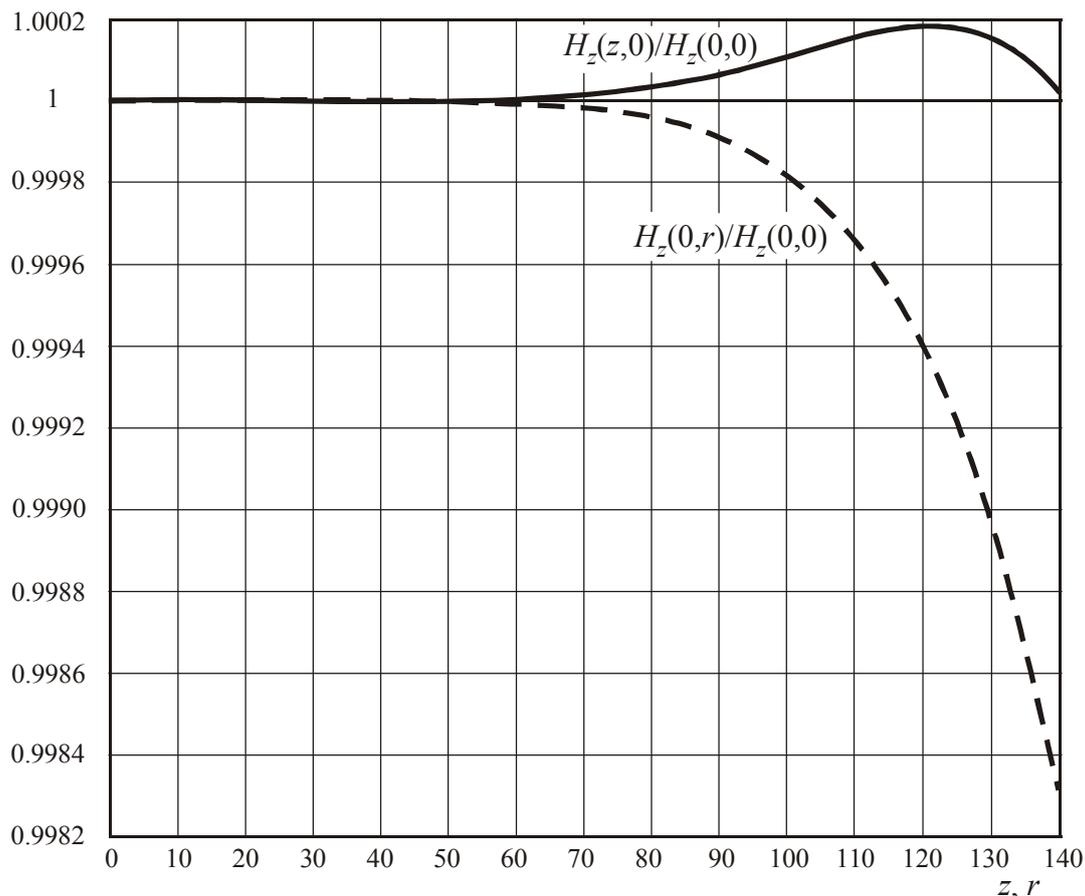


Рис. 4. Нормированные функции $H_z(z,0)/H_z(0,0)$ и $H_z(0,r)/H_z(0,0)$

Далее были рассчитаны компоненты поля $H_z(z, r)$, $H_r(z, r)$ и $H_m(z, r)$ на всей сетке узлов z, r согласно формулам (11)–(16) – этот расчет требует наибольших затрат компьютерного времени. На рис. 5 приведены изолинии нормированного поля $H_m(z, r)/H_m(0, 0)$. Эти результаты качественно близки результатам работы [13].

На рис. 6 для большей наглядности и информативности приведены изолинии функции (логарифм относительной неоднородности поля)

$$\lg \frac{|H_m(z, r) - H_m(0, 0)|}{H_m(0, 0)}, \quad (24)$$

причем непрерывными линиями отображены изолинии, а пунктирной линией – 50-процентная зона (рабочая зона радиуса $\Delta/2$). Видим, что рис. 6 дает более точное представление о неоднородности поля, чем рис. 5 или 4.

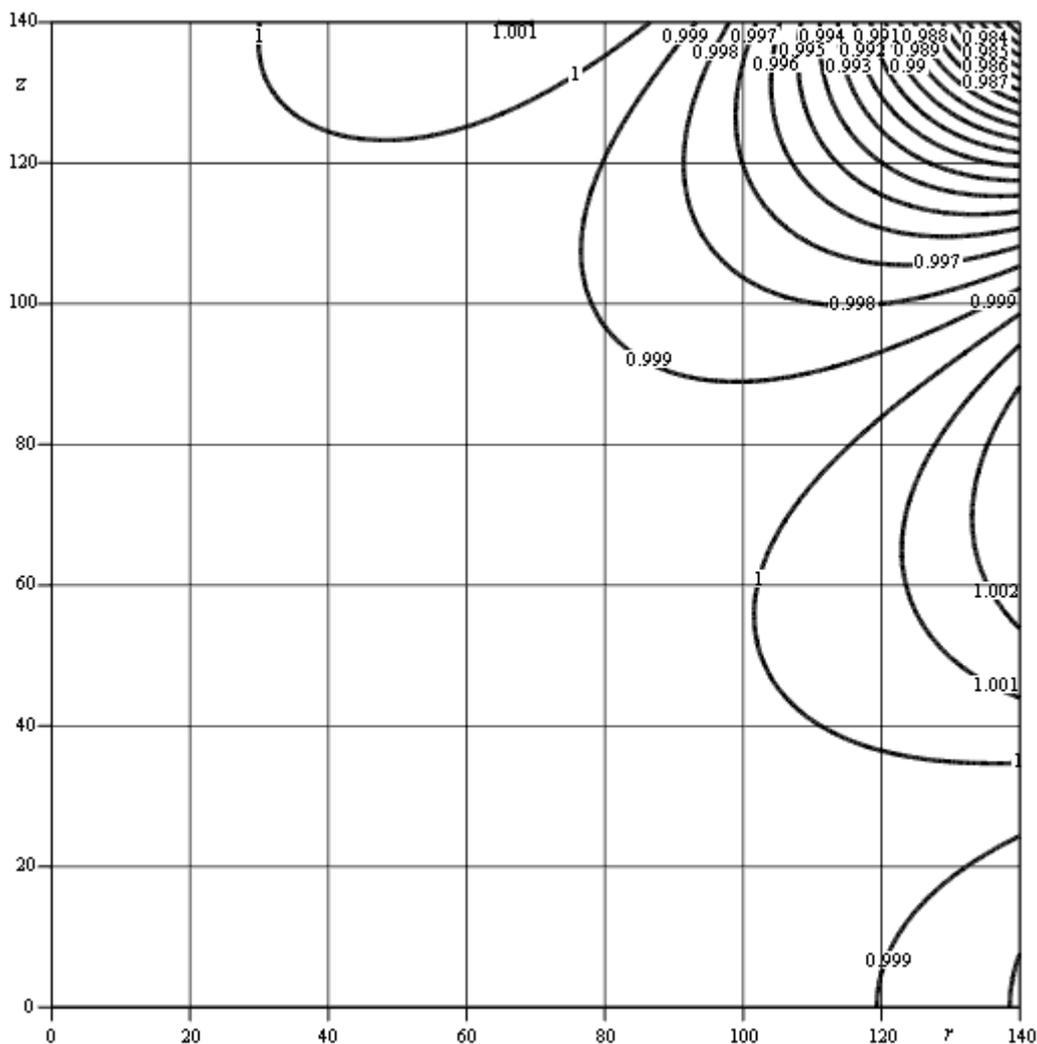


Рис. 5. Изолинии нормированного поля $H_m(z,r)/H_m(0,0)$

Замечания

Приведем следующие важные замечания математического и технического характера.

1. Если значения всех параметров L , δ , R_1 , R_2 , Δ , g , ρ , σ , p , η , ξ умножить на некоторый множитель $a > 0$, то, как видно из (11), (12), (17), ход относительных зависимостей $H_z(z,r)/H_z(0,0)$, $H_r(z,r)/H_r(0,0)$, а значит и вид кривых на рис. 4–6 не изменится. Лишь z и r нужно умножить на a . Другими словами, если решен некоторый частный численный пример, то из него можно получить ряд других примеров путем умножения всех параметров на ряд значений a (без решения этих примеров). Например, положив $a=1.4$, получим новые значения параметров (в мм): $L = \delta = 140$, $R_1 = R_2 = 448$, $\Delta = 210$, $g = 113.4$, $\rho = 293.58$, $\sigma = 126.84$, $p = 4.9$, $\eta = 119.7$, $\xi = 1.918$, $h = 1.4$, $z_{\max} = r_{\max} = 196$, $\Delta z' = 0.7$, $\Delta/2 = 105$. При этом ε сохранит свое значение: $\varepsilon = 2.749 \cdot 10^{-6}$, а также сохранят свой вид кривые на рис. 4–6. При этом сложных пересчетов делать не нужно. Данное замечание согласуется с так называемыми теоремами подобия магнитных систем [3, с. 108].

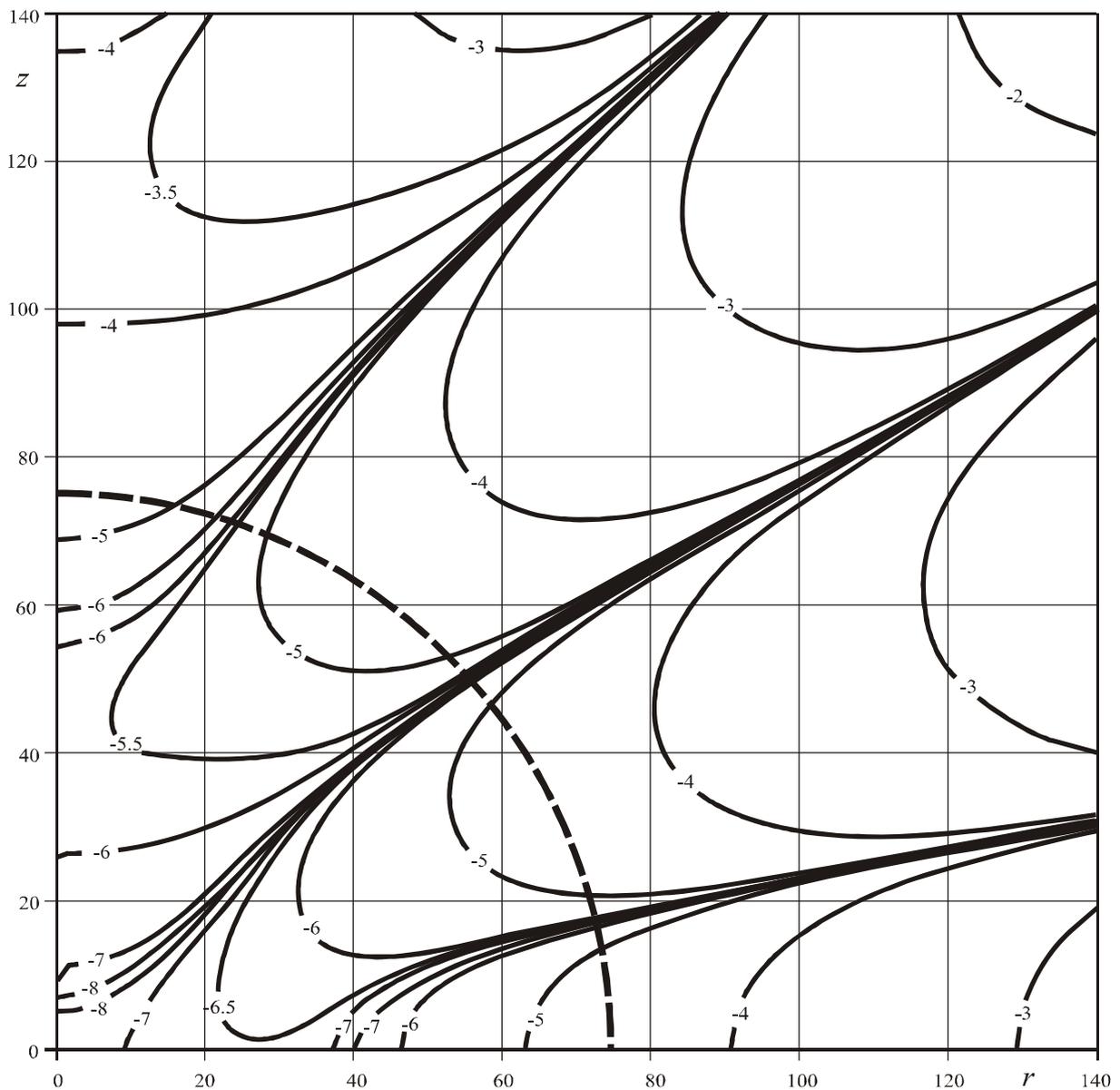


Рис. 6. Изолинии логарифма относительной неоднородности поля

2. Если постоянный магнит изготовить из мягкого железа, то он будет дешевым, но его поле будет довольно слабым (около 0.1–0.5 Тл), к тому же мягкое железо быстро размагничивается и потребуются непрерывное намагничивание его с помощью катушки с током простой конфигурации. Можно этого избежать, если использовать высококачественный сплав, например, Nd-Fe-B (как в работах [8–10, 12, 13]), но это будет дорогой магнит. К тому же, слабость поля не является недостатком (как отмечено во Введении), а изготовление намагничивающей (подпитывающей) катушки с током простой конфигурации является несложной процедурой.

3. Метод эквивалентных витков изложен применительно к идеализированному случаю однородного намагничивания магнита ($\mathbf{J} = \text{const}$), что справедливо лишь для магнита эллипсоидальной формы или для магнита из материала с очень большой магнитной твердостью [1, с. 151]. Кроме того, полагается, что магнит и его наконечники являются однородными. Однако на практике часто имеют место заметные неоднородности материала магнита и наконечников. В этих случаях расчеты данным методом можно использовать в качестве хорошего начального приближения, чтобы уточнить параметры и поле методом потенциала или иным способом настройки, использующим измерения поля магнитометром.

4. В полюсных наконечниках имеют место токи Фуко [18, с. 430], которые уменьшают добротность резонансной индуктивности, принимающей МР-сигналы. Для подавления токов Фуко предлагается изготавливать полюсные наконечники из набора изолированных стержней, параллельных оси магнита. При этом стержни целесообразно изготавливать прямоугольными в сечении, чтобы они плотно прилегали друг к другу.

Заключение

В данной работе дано развитие метода эквивалентных витков расчета конфигураций постоянных магнитов МР-томографов, создающих высокооднородные поля. Для достижения высокой однородности поля в наконечниках магнитов использованы углубления и выемки («ямки»). Для расчета полей использована *аналогия* между постоянным магнитом (а также его наконечниками, углублениями и выемками) и набором витков с током. Приведены рабочие формулы, разработаны программы и решены модельные примеры, показавшие, что данный метод позволяет в принципе (при условии постоянства намагниченности и плотности материала магнита) получать высокооднородные поля постоянных магнитов с относительной неоднородностью $\Delta H/H \sim 10^{-5} - 10^{-6}$, т.е. 1–10 ppm в рабочей области, причем необходимая конфигурация магнита определяется путем чисто компьютерного моделирования без измерений поля.

Сопоставим результаты данной работы с результатами работы [15]. В работе [15] положено: $L = \delta = 125$, $R_1 = R_2 = 300$, $\Delta = 150$ и получено: $\varepsilon = 4.493 \cdot 10^{-6} \approx 4.5$ ppm, т.е. в данной работе получено более однородное поле, чем в работе [15]. Если проанализировать также результаты работ [9, 10, 12, 13, 16], то можно сделать вывод, что однородность поля повышается (Δ понижается) с уменьшением отношения Δ/R , где $R = (R_1 + R_2)/2$, а также с уменьшением $L + \delta$. Можно рекомендовать брать отношение Δ/R примерно в диапазоне 0.43–0.47.

Отметим также, что в работах [9, 13] достигнута (методом скалярного потенциала) однородность поля $\approx 30 - 70$ ppm, а в наших работах (в [15, 16] и в данной работе) $\approx 3 - 5$ ppm, т.е. получено более однородное магнитное поле, причем примерно в одинаковых рабочих областях.

Метод эквивалентных витков можно рекомендовать для практического использования при реализации дешевого отечественного МР-томографа на базе постоянного магнита сложной конфигурации.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 05-08-01304-а).

Литература

1. Коген-Далин В.В., Комаров Е.В. Расчет и испытание систем с постоянными магнитами. М.: Энергия, 1977. 248 с.
2. Афанасьев Ю.В., Студенцов Н.В., Хорев В.Н. и др. Средства измерений параметров магнитного поля. Л.: Энергия, 1979. 320 с.
3. Постоянные магниты. Справочник. Изд-е 2-е / Под ред Ю.М. Пятина. М.: Энергия, 1980. 488 с.
4. Lugansky L.V. Optimal coils for producing uniform magnetic fields // J. Phys. E: Sci. Instrum. 1987. Vol. 20. P. 277–285.
5. Тихонов А.Н., Рубашов И.Б., Арсенин В.Я. и др. О математическом проектировании конструкции ЯМР-томографа. Препринт ИПМ АН СССР, 1987. 24 с.
6. Галайдин П.А., Иванов В.А., Марусина М.Я. Расчет и проектирование электромагнитных систем магниторезонансных томографов. СПб: СПбГУ ИТМО, 2004. 87 с.

7. Сизиков В.С. Математические методы обработки результатов измерений. СПб: Политехника, 2001. 240 с.
8. Miyamoto T., Sakurai H., Hayashi H., Ohnishi Y. Magnetic field generating device for NMR-CT // Patent US4672346. Cl. B29C67/20, C08J5/18, G01R33/383. 1987.
9. Miyamoto T., Sakurai H., Takabayashi H., Aoki M. Development of a permanent magnet assembly for MRI // J. Magnet. Soc. Japan. 1989. Vol. 13. N 2. P. 465–468.
10. Miyamoto T., Sakurai H., Yanaka S. et al. Application of Nd-Fe-B magnet to MRI systems // J. Magnet. Soc. Japan. 1989. Vol. 13. N 4. P. 567–571.
11. Abele M.G., Chandra R., Rusinek H. et al. Compensation of non-uniform magnetic properties of components of a yokeless permanent magnet // IEEE Trans. on Magnetics. 1989. Vol. 25. N 5. P. 3904–3906.
12. Miyamoto T., Sakurai H., Takabayashi H., Aoki M. A development of a permanent magnet assembly for MRI devices using Nd-Fe-B material // IEEE Trans. on Magnetics. 1989. Vol. 25. N 5. P. 3907–3909.
13. Sakurai H., Aoki M., Miyamoto T. Improvement of the field homogeneity with a permanent magnet assembly for MRI // J. Magnet. Soc. Japan. 1990. Vol. 14. N 2. P. 465–468.
14. Sizikov V.S., Neronov Yu.I., Sokolov D.Yu. On synthesis of high-homogeneous field of a permanent magnet in MR imaging // Proc. Int. Symp. on NMR in Condensed Matter. St. Petersburg, 2005. P. 53.
15. Сизиков В.С., Соколов Д.Ю. О синтезе высокооднородного поля постоянного магнита в МР-томографии // Научное приборостроение. 2006. Т. 16. № 4. С. 97–104.
16. Сизиков В.С., Соколов Д.Ю. О повышении однородности поля постоянного магнита МР-томографа // Изв. вузов. Приборостроение. 2006. Т. 49. № 12. С. 32–38.
17. Неронов Ю.И., Каршенбойм С.Г. Метод определения частоты резонанса ЯМР-сигналов и регистрация эффектов изотопного замещения ядер молекул водорода // Научное приборостроение. 2006. Т. 16, № 1. С. 97–101.
18. Фриш С.Э., Тиморева А.В. Курс общей физики. Учебник. Т. 2. Электрические и электромагнитные явления. Изд-е 10-е. СПб.: Лань, 2006. 528 с.
19. Дружкин Л.А. Задачи теории поля. М.: МИРГЭ, 1964. 462 с.
20. Монтоммери Д. Получение сильных магнитных полей с помощью соленоидов. М.: Мир, 1971. 360 с.
21. Тамм И.Е. Основы теории электричества. Уч. пособие для вузов. Изд-е 11-е. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. 616 с.
22. Поливанов К.М. Теоретические основы электротехники. Ч. 3. Теория электромагнитного поля. М.: Энергия, 1969. 352 с.
23. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Т. 5. Электричество и магнетизм. Изд-е 2-е. М.: Мир, 1977. 302 с.
24. Парселл Э. Электричество и магнетизм. Берклеевский курс физики. Учебник для вузов. Изд-е 4-е. СПб.: Лань, 2005. 416 с.
25. Яновский Б.М. Земной магнетизм. Изд-е 4-е. Л.: ЛГУ, 1978. 592 с.
26. Корзюк В.И., Шушкевич Г.Ч. Проникновение магнитного поля в тонкую незамкнутую эллипсоидальную оболочку в присутствии проводящей толстостенной сферической оболочки // ЖТФ. 2006. Т. 76. Вып. 6. С. 9–14.
27. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов. Изд-е 13-е. М.: Наука, 1986. 544 с.
28. Петров Ю.П., Сизиков В.С. Корректные, некорректные и промежуточные задачи с приложениями. СПб: Политехника, 2003. 261 с. Пер.: Petrov Yu.P., Sizikov V.S. Well-Posed, Ill-Posed, and Intermediate Problems with Applications. Leiden–Boston: VSP, 2005. 234 p.
29. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. М.: Мир, 1975. 536 с.

СИСТЕМА УПРАВЛЕНИЯ УЧЕБНЫМ ЯМР-ТОМОГРАФОМ

А.Н. Серегин

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор Ю.И. Неронов

Приводится краткое описание разработанной системы управления учебным ЯМР-томографом. Описаны ее основные части, их назначение и принципы их взаимодействия между собой.

Введение

Использование явления ядерного магнитного резонанса как средства для магнитного «внутривидения» было предложено в заявке на изобретение в 1960 году [1]. На этом принципе разработаны ЯМР-томографы, которые являются наиболее дорогими приборами медицинской диагностики. Лучшие из них укомплектованы сверхпроводящими магнитами и изготавливаются рядом зарубежных фирм. Из-за высокой стоимости их число в России значительно уступает требованиям современного здравоохранения, и стоит задача о заполнении этого рынка отечественными приборами. ЯМР-томограммы медицинского назначения могут содержать артефакты, которые не имеют анатомического объяснения. Они связаны с физическими особенностями данного метода, такими как, например, проявление на изображениях химического сдвига в экранировании протонов. Для научной проработки таких явлений достаточно использовать малогабаритные ЯМР-томографы [2]. Как раз такой томограф находится на кафедре измерительных технологий и компьютерной томографии ИТМО, однако из-за морально устаревшего программного обеспечения и устройства управления не представляется возможным проводить достаточно сложные эксперименты. Поэтому была поставлена задача – создать новую современную систему управления, с помощью которой можно было бы повысить функциональность кафедрального ЯМР-томографа. Разработка этой системы ведется автором с 2005 года, к этому времени процесс создания СУ вошел в завершающую стадию [3]. В данной работе были полностью решены все проблемы, которые не удалось решить в предыдущие годы.

Содержание работы

- Работа любого ЯМР-томографа основана на выполнении следующих действий [4].
1. Подача импульсов возбуждения на резонансную индуктивность. Это необходимо для поворота векторов намагниченности протонов, что и вызывает ядерный магнитный резонанс. Ширина импульсов должна быть порядка сотни микросекунд, временной промежуток между импульсами необходимо выдерживать постоянным с высокой точностью.
 2. Подача линейных градиентов магнитного поля. Это необходимо для выполнения частотно-фазового кодирования радиочастотного сигнала. Линейные градиенты формируются специальными катушками. Однако для управления ими необходимы высокочастотные импульсы шириной порядка нескольких миллисекунд. Эти импульсы должны подаваться синхронно с запускающими импульсами. Для получения двумерного изображения объекта, без выделения отдельных слоев, достаточно двух градиентов – фазового и частотного. Следовательно, имеется необходимость подачи высокочастотных импульсов одновременно по трем каналам (рис. 1).
 3. Считывание частотных и фазовых характеристик ЯМР-сигнала. Кодированный радиочастотный сигнал необходимо получить, оцифровать и декодировать, получив изображение исследуемого объекта. При этом оцифровка должна идти с частотой дискретизации 44100 Гц.

В результате проведенной работы была спроектирована и макетирована система управления учебным томографом, соответствующая техническому заданию. Система разделена на две части: внешний блок, присоединяющийся к персональному компьютеру при помощи USB-кабеля, и программное обеспечение, установленное на этот персональный компьютер.

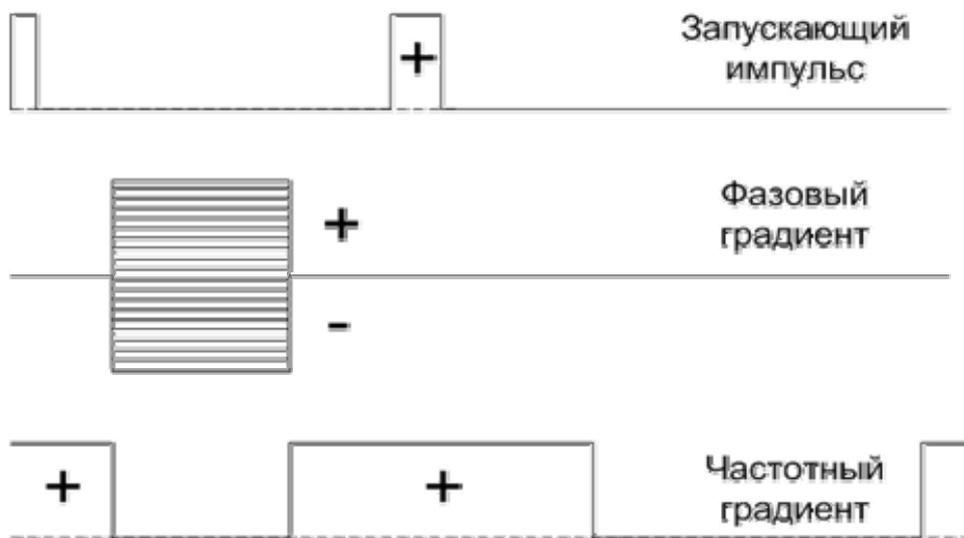


Рис. 1. Схема импульсов

Внешний блок

Внешний блок имеет один двухканальный вход для сигнала с томографа, 3 входа для программирования микроконтроллеров, 3 выхода на катушки для запускающего импульса и градиентных полей, а также USB выход для передачи параметров импульсов вводимых пользователем, а также для передачи оцифрованных данных на персональный компьютер.

Внешний блок содержит три микроконтроллера, которые общаются между собой посредством протокола SPI (Serial Peripheral Interface). Один из контроллеров управляет четырехканальным цифро-аналоговым преобразователем, при помощи двух встроенных таймеров отсчитывает интервалы между импульсами и выставляет их. Второй контроллер управляет аналого-цифровым преобразователем, подавая на него сигналы границ выборки, выбора канала, а также побитно считывая оцифрованный сигнал. Третий контроллер является основным – он управляет другими двумя контроллерами, получает команды с персонального компьютера и передает обратно оцифрованный сигнал. Связь с компьютером через USB осуществляется при помощи специальной микросхемы-переходника USB-UART от компании FTDI [5]. Вместе с этой микросхемой фирмой-разработчиком поставляется драйвер и специальная библиотека функций, которые позволяют работать с USB-портом на скоростях, позволяющих передавать оцифрованный сигнал в реальном времени.

Плата питается от сети переменного тока 220 вольт. С помощью трансформатора это напряжение преобразуется в три отдельных источника питания: +5 вольт для питания цифровой части устройства, ± 12 вольт для питания выходных операционных усилителей, и гальванически развязанное от других источников +5 вольт для питания аналоговой части АЦП. На печатной плате предусмотрены зазоры общей шины питания для гальванической развязки питания цифровой и аналоговой частей АЦП, а также гальванической развязки преобразователя USB-UART. Этим обеспечивается защита слабых аналоговых сигналов от работающих цифровых устройств.

Программное обеспечение

При помощи программного обеспечения пользователь управляет градиентами, запускающим импульсом, а также получает результаты измерений посредством графического интерфейса (UI). На рис. 2 представлен его внешний вид с пояснениями.

Программное обеспечение было разработано на языке C++ при помощи библиотек пакета Borland C++ Builder версии 6.0 [6]. Этот пакет был выбран из-за того, что он приспособлен для наиболее легкого и быстрого создания приложений, использующих windows-окна. Программу условно можно разделить на 3 части: графический интерфейс, блок связи с внешним устройством, блок обработки данных.

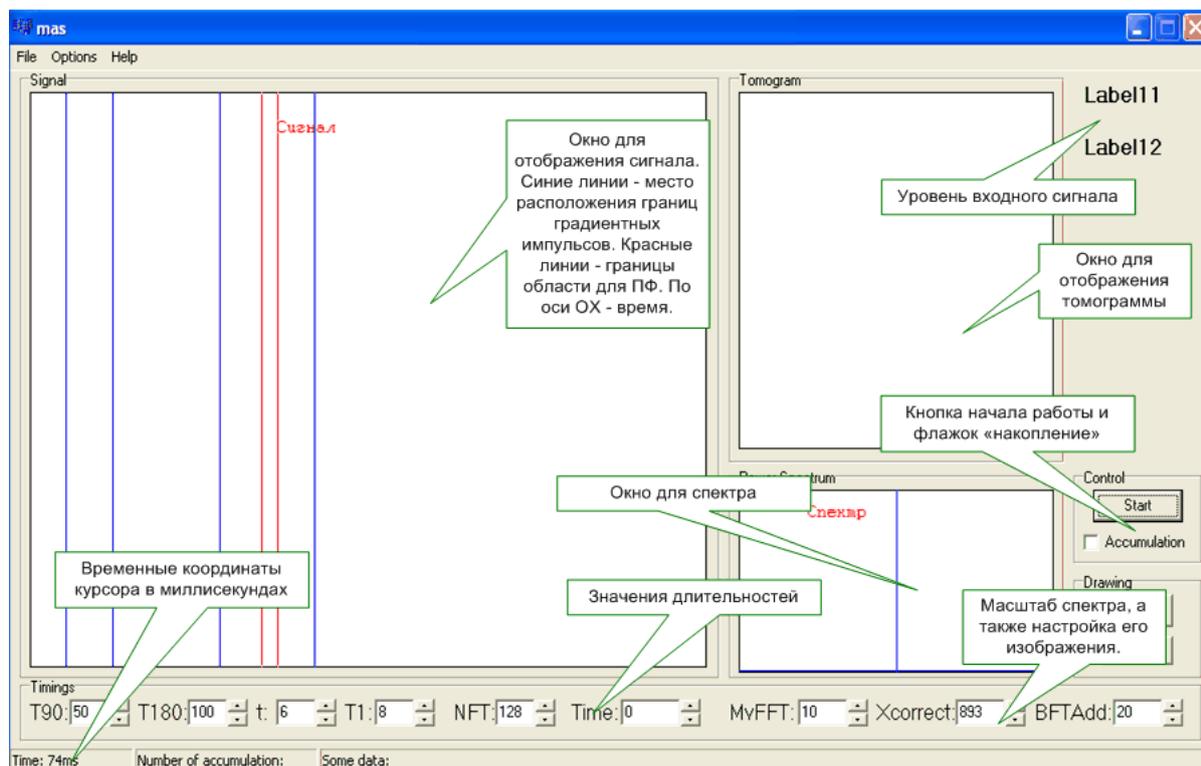


Рис. 2. Графический интерфейс

Блок связи с внешним устройством представляет собой отдельный программный поток, опрашивающий USB-порт на наличие переданных данных, когда считанный за заданное пользователем время сигнал получен, поток генерирует Win-сообщение, которое перехватывает обработчик сообщений, находящийся в основном потоке программы. По этому сообщению происходит прорисовка сигнала, расчет спектра и изображения, после чего на внешний блок подается команда старта следующей последовательности импульсов.

Всего внешнее устройство понимает только 2 команды: код «2», означающий, что надо запускать импульсы с текущими значениями, и код «8», после которого следуют 8 значений длительностей, которые программа берет из полей ввода, расположенных в нижней части окна приложения (Timings). Если пользователь изменил хотя бы одно из значений, в контроллер будет передан массив из всех переменных.

В блок обработки данных входят три функции: отрисовки сигнала, расчета и отображения спектра мощности, а также расчета и отрисовки изображения.

Функция отрисовки изображения преобразует однобайтовые данные в 16-ти разрядные двухбайтовые из расчета, что нечетные байты – старшие, а четные – младшие, при этом единица в старшем разряде обозначает знак «минус». Затем рисует по точкам сигнал, учитывая выбранный масштаб.

Спектр мощности рассчитываем при помощи одномерного Фурье-преобразования, используя сигнал из правого и левого канала как мнимую и действительную часть функции. При этом расчет ведется по области сигнала, где располагается полезный сигнал с томографа. В окне его границы указаны красными линиями.

Расчет изображения ведется посредством серии математических преобразований: двойного Фурье-преобразования, вычисления среднего арифметического и интерполяции. Картинка рисуется в специальном окне попиксельно.

Заключение

В работе была поставлена задача создания системы управления учебным ЯМР-томографом для последующего использования ее в учебно-образовательных, а также в исследовательских целях. В дальнейшем планируется добавить возможность получения трехмерных изображений. Предполагается, что данная разработка поможет в исследовании различных особенностей ядерного магнитного резонанса, а также их влияния на получаемое изображение объекта.

Литература

1. Иванов В.А. Способ определения внутреннего строения материальных объектов. Авторское свидетельство 1112266, приоритет от 1960 г. // Бюллетень изобретений. 1984. № 33.
2. Неронов Ю.И., Иванов В.К. Разработка мини-ЯМР-томографа для учебных и научно-исследовательских целей. // Научное приборостроение. 2006. Т. 16. №2. С. 97
3. Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. Выпуск 26. СПб: СПбГУ ИТМО, 2006. С. 51.
4. Неронов Ю.И., Гарайбех Зияд. Ядерный магнитный резонанс в томографии и в спектральных исследованиях тканей головного мозга. СПб: СПбГУ ИТМО, 2003. 105 с.
5. <http://www.ftdichip.com/Drivers/D2XX.htm>
6. Kent Reisdorph, Ken Henderson. Borland C++ Builder in 21 days. Sams Publishing, 1997. 703 с.

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ АНАЛОГОВОГО БИМЕДИЦИНСКОГО СИГНАЛА В ДИСКРЕТНУЮ РАВНОМЕРНУЮ ВЫБОРКУ ДЛЯ ПОСЛЕДУЮЩЕЙ ЦИФРОВОЙ ОБРАБОТКИ СРЕДСТВАМИ ВЕЙВЛЕТ-АНАЛИЗА

**О.А. Монахова (Энгельский технологический институт Саратовского
государственного технического университета)
Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор Ю.В. Клинаев
(Энгельский технологический институт Саратовского государственного
технического университета)**

Статья содержит обзор работ, посвященных применению вейвлетного анализа в различных отраслях медико-технической науки. Предлагается сервисное программное средство для автоматизированной оцифровки отсканированных бумажных носителей ЭКГ для дальнейшей разработки эффективных методик прогнозирования критических состояний пациентов с ишемической болезнью сердца на основе вейвлетного анализа данных электрокардиографических обследований.

Введение

На основании анализа современных достижений и тенденций развития медико-технической науки и смежных областей знаний можно выделить такое перспективное направление научных исследований, как прогнозирование состояния организма, его органов, систем и тканей на основе цифрового кодирования, фильтрации и компьютерной обработки биомедицинских сигналов (БМС). Как сообщалось в [1–12], для обнаружения и распознавания ключевых диагностических признаков БМС наиболее перспективным представляется использование вейвлет-преобразования. Среди множества современных направлений научных исследований в данной области медико-технических технологий и их технического обеспечения выделяется одно, являющееся, с нашей точки зрения, наиболее трудно практически реализуемым – автоматизация вейвлет-анализа данных электрокардиографических обследований пациентов с ишемической болезнью сердца.

Основная часть

Запись электрической активности сердца – один из наиболее известных и широко используемых методов исследования деятельности сердца. Обычно производят регистрацию проекции электрического импульса сердца в нескольких плоскостях, иначе – в нескольких отведениях. Подробную информацию об отведениях и методах анализа ЭКГ и ее регистрации можно найти, например, в [13].

На рис. 1 показано три периода реальной ЭКГ во II отведении (при его записи отрицательный электрод накладывают на правую руку, а положительный – на левую ногу), на которой можно выделить несколько характерных импульсов, называемых зубцами. Зубец P соответствует сокращению левого и правого предсердий. Комплекс QRS, включающий в себя три импульса Q, R и S, отражает период активности желудочков. Зубцы Q и S могут быть выражены слабо либо вовсе отсутствовать. Зубец T соответствует периоду реполяризации желудочков.

Вид электрокардиограммы может существенно изменяться в зависимости от отведения. Одна из основных характеристик ЭКГ – интервал R-R между двумя следующими друг за другом импульсами R, отражающий частоту сердечных сокращений. Выявление импульсов R или комплексов QRS является первоочередной задачей при автоматической обработке ЭКГ. Задача существенно усложняется при увеличении объема

данных, например, в том случае, когда длительная запись кардиограммы получена в результате мониторинга по Холтеру [14].

Сигнал ЭКГ, помимо записи электрической активности сердца, содержит шумовую добавку, которая включает в себя фон переменного тока (50 или 60 Гц) питающей сети, высокочастотные колебания, вызванные мышечными сокращениями, а также низкочастотную (доли Гц) составляющую, обусловленную изменением сопротивления контактов датчик-тело.

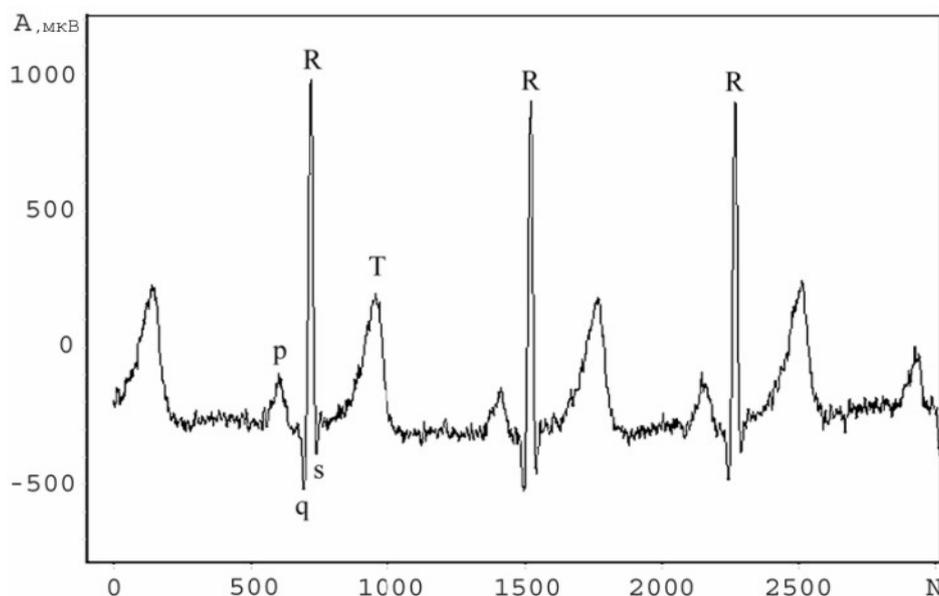


Рис. 1. Три периода электрокардиограммы (II отведение), записанной при частоте дискретизации 1 кГц. По горизонтальной оси отложены номера отсчетов, по вертикальной – уровень сигнала в микровольтах

Обычные аналоговые электрокардиографы представляют собой электронно-механические системы. Напряжение, наведенное на электроды в результате сердечной деятельности, усиливается электронным усилителем и регистрируется на бумажной ленте при помощи механического самописца. Для диагностики некоторых нарушений ритма сердца нужна длительная запись потенциалов сердца. Однако при длительном мониторинге длина ленты может выражаться десятками метров, и обработка ЭКГ становится неудобной. В [15] сообщалось о преимуществах отказа от механического звена в цепи обработки ЭКГ, и приводились аргументы в пользу записи потенциалов сердца в память компьютера.

У авторов возникла ситуация, когда регистрация ЭКГ в памяти компьютера не представляется возможной, но данные ЭКГ-обследований на бумажных носителях, т.е. непрерывно изменяющиеся сигналы в результате измерений, должны быть преобразованы в наборы дискретных отсчетов, иначе говоря, оцифрованы для дальнейшего вейвлет-анализа. Были собраны данные электрокардиографических обследований 40 пациентов, вскоре умерших по различным причинам в разных отделениях Энгельсской городской больницы № 2 (данные любезно предоставлены архивом Энгельсской городской больницы № 2, гл. врач – к.м.н. Г.О. Текнеджян, зав. кардиологическим отделением Т.И. Гордиенко).

Для решения данной проблемы был создан пользовательский интерфейс с помощью конструктора графического интерфейса GUI Builder системы компьютерной математики MatLab v.7.1R14SP3. Выбор среды программирования обоснован эффективным сопряжением средств анализа и обработки данных, представленных в пакетах расширений Image Processing Toolbox, Signal Processing Toolbox и Wavelet Toolbox сис-

темы компьютерной математики MatLab, и сервисных средств визуального программирования GUI Builder.

Приложение «Chart's digitization» позволяет осуществить извлечение аналогового сигнала f из графического файла и его дискретизацию, которая состоит в задании значений $\{f(nT)\}_{n \in \mathbb{Z}}$, выбранных с шагом T ¹. Приближение $f(t)$ при $\forall t \in \mathbb{R}$ может быть получено с помощью интерполяции этих отсчетов. Дискретный сигнал может быть представлен как сумма дельта-функций Дирака: с каждым выбранным значением $f(nT)$ связывают дельта-функцию Дирака $f(nT)\delta(t-nT)$, сосредоточенную в точке $t=nT$. Поэтому равномерная выборка сигнала f соответствует сумме взвешенных

$$\text{дельта-функций Дирака } f[t] = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(nT)\delta(t-nT).$$

На рис. 2 представлен вид рабочего окна программы.

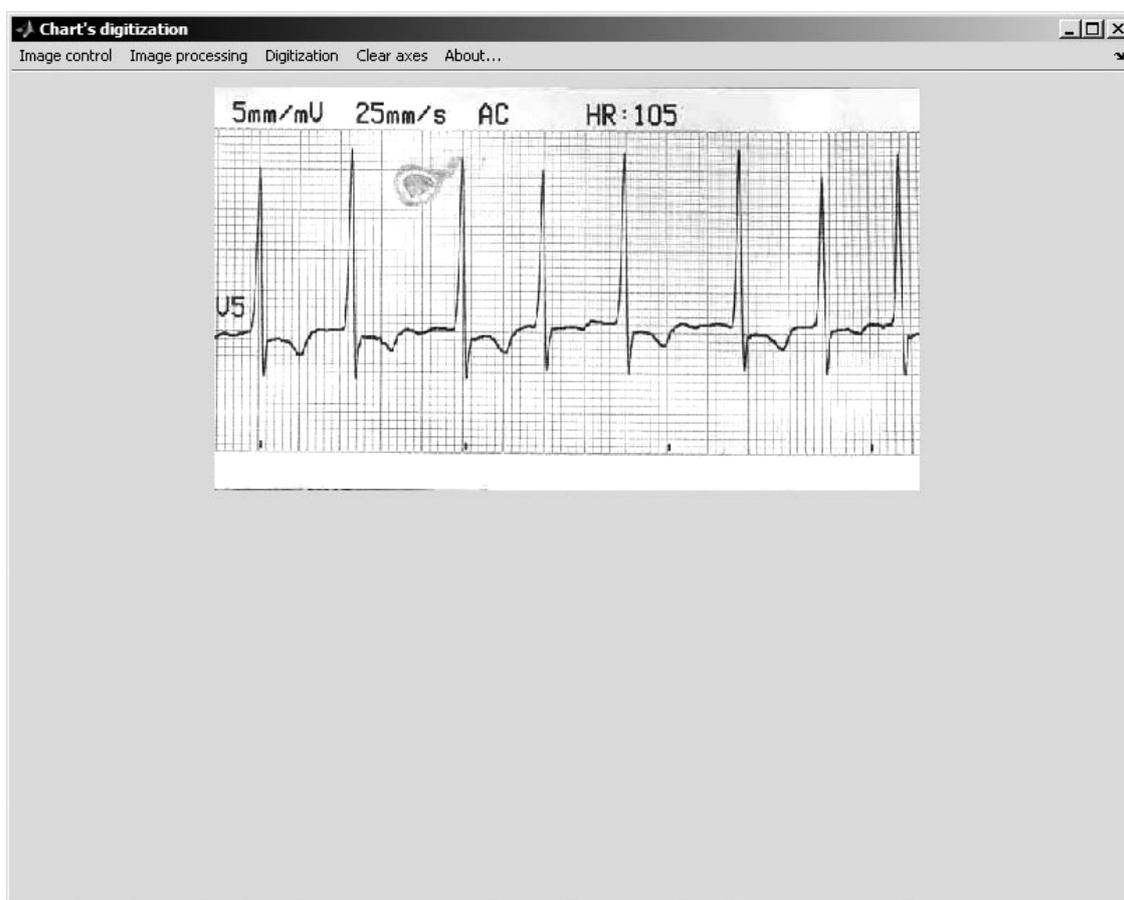


Рис. 2. Рабочее окно программы «Chart's digitization»

Программа поддерживает обработку графических файлов в следующих форматах: BMP, JPG, GIF, TIF. Перед началом работы с программой необходимо загрузить исходное изображение (рис. 3), используя команду Open... меню Image control.

Меню Image Processing состоит из следующих команд (рис. 4):

1. Crop – применяется для кадрирования исходного изображения;
2. Adjust brightness/contrast – применяется для регулировки яркости и контрастности исходного изображения;
3. Remove noise pollution – применяется для очистки исходного изображения от точечных «загрязнений»;

¹ Шаг выбирается автоматически, исходя из размера одного пикселя исходного изображения

4. Convert to binary raster data – применяется для бинаризации исходного изображения.

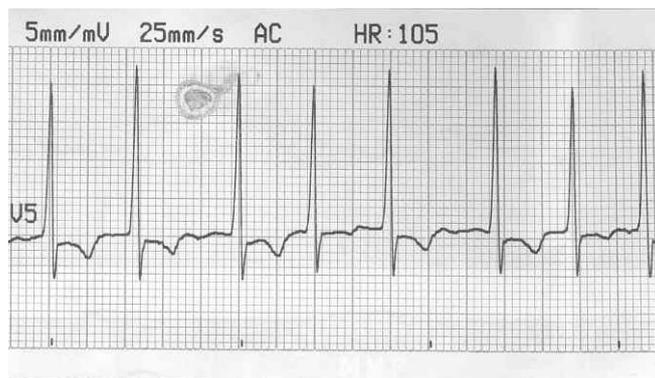


Рис. 3. Исходное изображение – фрагмент ЭКГ в V отведении

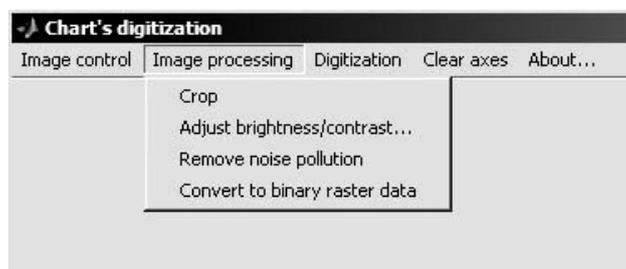


Рис. 4. Вид меню Image Processing программы «Chart's digitization»

При выборе команды Adjust brightness/contrast меню Image Processing на экране монитора появляется подокна Image Tool 1-I, используемое для обработки изображения и Overview (Image Tool 1), используемое для предпросмотра. Командой Adjust contrast меню Tools окна Image Tool 1-I вызывается подокно Adjust contrast (Image Tool 1) (рис. 5), используемое для выравнивания гистограммы изображения, представляющей распределение яркости пикселей изображения.

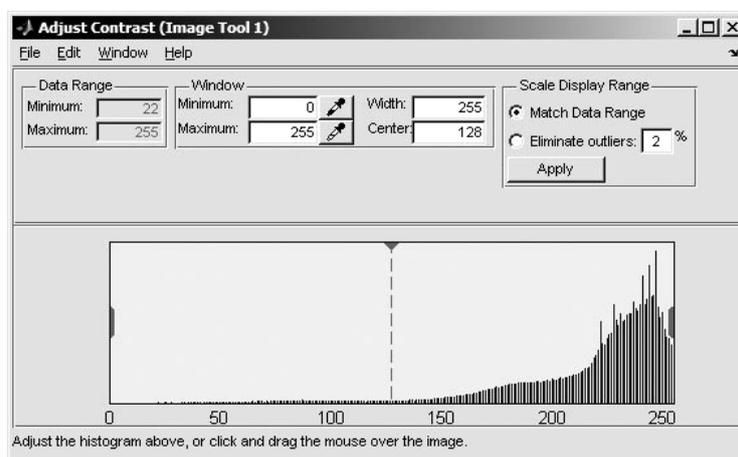


Рис. 5. Вид подокна Adjust contrast (Image Tool 1)

При использовании меню Convert to binary raster data растровое полутоновое изображение может быть преобразовано в бинарное в соответствии с выбором уровня порога яркости (по умолчанию 0,9), когда изображение является матрицей пикселей $I(r,c)$, представленных всего двумя цветами: белый (элемент матрицы имеет значение 1) и черный (элемент матрицы имеет значение 0). Здесь r – номер строки и c – номер столбца элемента, соответствующего заданному пикселу. Пикселями, несущими извлекаемую нами информацию, являются те элементы матрицы $I(r,c)$, значение которых

равно нулю. При использовании меню Digitization записываются координаты тех пикселей, значение которых равно нулю; иная информация отбрасывается. Извлеченная информация сохраняется как рабочая область переменной, которой является дискретная равномерная выборка, с расширением .mat, для дальнейшего вейвлет-анализа [16].

Предусмотрена возможность сохранения обработанного изображения в файл командой Save... меню Image control.

На рис. 6 представлен вид рабочего окна по окончании работы программы.

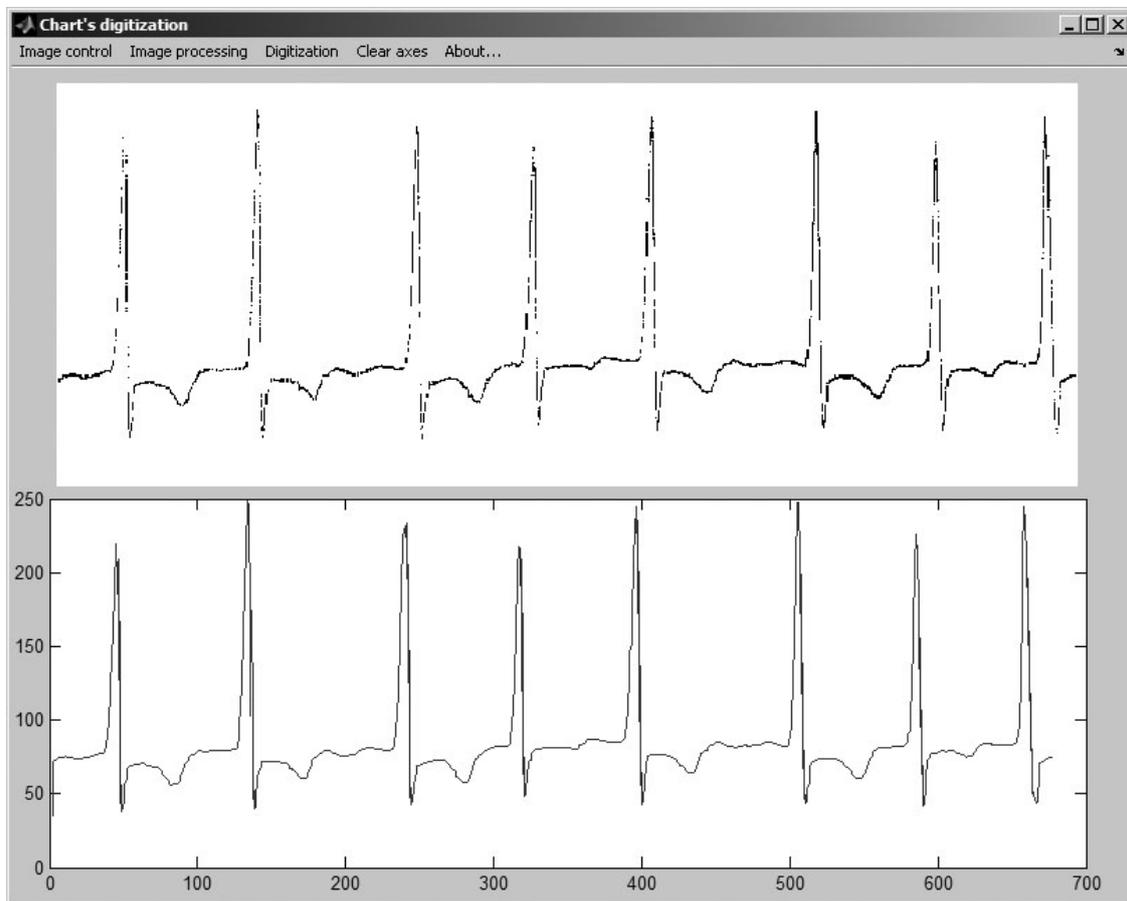


Рис. 6. Вид окна по окончании выполнения программы «Chart's digitization»

При использовании меню Clear axes оси для построения графиков очищаются.

При использовании меню About... на экран монитора выводится окно-сообщение с кратким описанием программы и информацией об авторах (рис. 7).

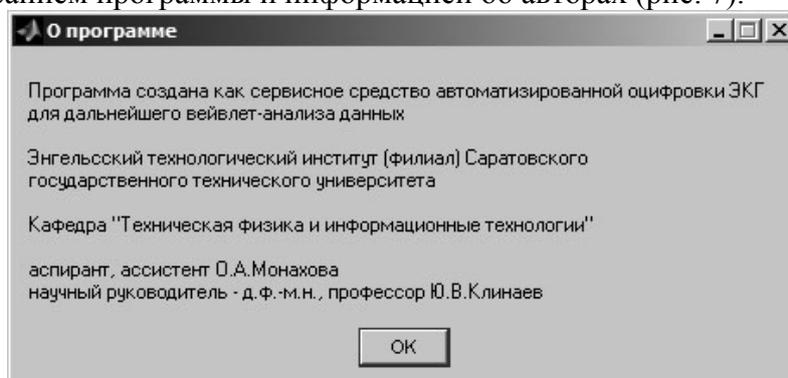


Рис. 7. Вид подокна «О программе»

Заключение

Было создано сервисное программное средство для автоматизированной оцифровки отсканированных данных электрокардиографических обследований пациентов с ишемической болезнью сердца для дальнейшего вейвлет-анализа.

Литература

1. Blanco S., Kochen S., Rosso O.A., Saldado P. Applying Time-Frequency Analysis to Seizure EEG Activity. // *IEEE Engineering in Medicine and Biology*. 1997. Vol. 16. № 1. P. 64–71.
2. Davies P.F., Shi C., Depaola N., Helmke B.P., Polacek D.C. Hemodynamics and the focal origin of atherosclerosis: a spatial approach to endothelial structure, gene expression, and function. // *Ann. N. Y. Acad. Sci.* 947. 2001. P. 7–16.
3. Cloutier G., Chen D., Durand L.G. Performance of time-frequency representation techniques to measure blood flow turbulence with pulsed-wave doppler ultrasound. // *Ultrasound in Med. & Biol.* 2001. Vol. 27. № 4. P. 535–550.
4. Ku D.N., Giddens D.P., Zarins C.K., Glagov S. Pulsatile flow and atherosclerosis in the human carotid bifurcation. Positive correlation between plaque location and low and oscillating shear stress. // *Arteriosclerosis*. 1985. № 5. P. 293–301.
5. Ivanov P.C., Rosenblum M.G., Peng C.K., Mietus J., Havlin S., Stanley H.E., Goldberger A.L. Scaling Behaviour of Heartbeat Intervals Obtained by Wavelet - Based Time - Series Analysis. // *Nature*. 1996. Vol. 383. № 26. P. 323–327.
6. Thurner S., Feurstein M.C., Teich M.C. *Phys. Rev. Lett.* 80 p 1544.
7. May Ph. Wavelet analysis of blood flow singularities by using ultrasound data. // *Center for Turbulence Research Annual Research Briefs*, 2002. P. 349–362.
8. Титов Ю.М., Темников А.А., Куклин С.Г., Смирнова Ю.Ю. Вейвлет-анализ вариабельности частоты сердечных сокращений при ишемической болезни сердца // *Медицинская физика. Техника, биология, клиника*, 2001. № 11. с. 86–87.
9. Дремин И.М., Иванов О.В., Нечитайло В.А. Вейвлеты и их использование // *Успехи физических наук*, 2001. т. 171. № 5. с. 465–501.
10. Ламброу Т., Линней А., Спеллер Р. Применение вейвлет-преобразования к обработке медицинских сигналов и изображений // *Компьютерра*, 1998. № 8. С. 50–51.
11. Опарин А.Л., Рудык Ю.С. Прогностические возможности вейвлет-преобразования сердечного ритма у больных острым инфарктом миокарда / *Всероссийская науч. конф. "Кардиология – XXI век"*. Санкт-Петербург, 22-23 ноября 2001. с. 118.
12. Клинаев Ю.В., Монахова О.А., Вест С.С. Цифровая обработка сигналов на примере Windows-приложений для восстановления оцифрованных аналоговых сигналов графики и акустики с использованием вейвлетного анализа / *Радиотехника и связь: материалы третьей международной научно-технической конференции*. Саратов: СГТУ, 2006. с. 97–102.
13. Дощицин В. *Клиническая электрокардиография*. М.: МИА, 1999.
14. Дабровски А., Дабровски Б., Пиотрович Р. *Суточное мониторирование ЭКГ*. М.: Медпрактика, 2000.
15. Латфуллин И.А., Тептин Г.М., Контуров С.В. Сравнительный анализ погрешностей в аналоговой и компьютерной электрокардиографии. // *Вестник аритмологии*. 1999. № 5. С. 54–58.
16. Дьяконов В. *MatLab. Обработка сигналов и изображений*. СПб: Питер, 2002. 608 с.

ДИФРАКЦИЯ ШИРОКОПОЛОСНОГО ТЕРАГЕРЦОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА АМПЛИТУДНЫХ И ФАЗОВЫХ ЭКРАНАХ, ВОССТАНОВЛЕНИЕ ИЗОБРАЖЕНИЙ ПО ПОЛУЧЕННОЙ КАРТИНЕ ДИФРАКЦИИ

А.А. Городецкий

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор В.Г. Беспалов

В статье приведены результаты численного исследования дифракции импульсного широкополосного терагерцового излучения на амплитудном и фазовом экране произвольной формы и восстановления амплитудного и фазового профиля экрана по полученной в результате моделирования дифракционной картине. Также представлена схема эксперимента для проведения экспериментов по интравидению.

Введение

Терагерцовая область частот (300 ГГц–10 ТГц) представляет собой довольно значительную часть спектра оптического излучения, находящуюся между микроволновой радиочастотной и инфракрасной областью. В отличие от последних, ТГц-область до последнего времени оставалась практически неизученной, что связано с отсутствием как источников достаточно мощного терагерцового излучения, так и приемников, способных зарегистрировать излучение в данной области спектра.

За последние пятнадцать лет вместе с развитием фемтосекундных твердотельных лазеров (в особенности лазеров на кристаллах сапфира, активированных ионами титана) и микроэлектроники, в исследованиях терагерцовой области наметился значительный сдвиг. Появилось несколько новых способов генерации, управления его параметрами и детектирования ТГц-излучения.

В настоящее время развиваются несколько направлений создания когерентных импульсных источников ТГц-диапазона. В начале 90-х годов было показано, что при освещении некоторых фотополупроводников фемтосекундными импульсами света поверхность образцов излучает когерентные сверхкороткие широкополосные импульсы в дальнем ИК диапазоне спектра. Эффект генерации электромагнитного излучения поверхностью полупроводника при таком возбуждении объясняется динамикой образования фотоносителей – электронно-дырочных пар и их сверхбыстрым движением в приповерхностном электрическом поле. Согласно уравнениям Максвелла, возникающий при этом приповерхностный ток $J(t)$ вызывает генерацию электромагнитного импульса $E(t) \sim \partial J/\partial t$, обычно в виде одного колебания со спектром, определяемым Фурье-преобразованием его временной формы. Таким образом, поверхность полупроводника работает как динамическая фотопроводящая антенна, излучающая импульсы широкополосного электромагнитного излучения длительностью в сотни фемтосекунд. Центральная частота генерации в фотополупроводниках, как правило, находится в районе 1–2 ТГц. Наряду с возбуждением фотоносителей, ТГц-излучение может генерироваться в процессе коллективного оптического возбуждения электронов в гетероструктурах и квантовых ямах. Возможно получение ТГц-излучения при фокусировке первой и второй гармоник излучения фемтосекундного лазера в воздух, при нелинейно-оптическом детектировании (выпрямлении) высокоинтенсивного фемтосекундного импульса [1]. Эффективное ТГц импульсное излучение всего в два периода колебаний было получено при использовании биполярной фотопроводящей антенны [2].

Для детектирования ТГц-излучения могут использоваться также несколько методов. Первым приемником терагерцового излучения стала фотопроводящая антенна [3], электрооптическое детектирование, впервые продемонстрированное 10 лет назад [4], также получило широкое распространения из-за широкой полосы пропускания и возможности параллельного формирования изображений. В электрооптической схеме де-

тектирования двулучепреломление в кристалле вызывается действием электрической компоненты терагерцового излучения, которая модулирует состояние поляризации пробного пучка при прохождении света через кристалл. Временная эволюция формы импульса может быть получена изменением относительной длины траекторий терагерцового излучения и пробного пучка в кристалле.

Ультракороткие ТГц оптические импульсы в настоящее время перспективны для внутренней и внешней связи в интегральных схемах, для целей спектроскопии дальнего ИК-диапазона с разрешением во времени и химического определения состава сложных соединений, для создания ТГц-радаров, для целей оптической ТГц-томографии с разрешением во времени (T-ray imaging).

Основная идея предлагаемой ТГц томографической системы состоит в измерении амплитудно-фазового пропускания в различных точках объекта, прозрачного в диапазоне 0.1–2 ТГц и дальнейшей математической обработки полученных данных. Предлагаемая экспериментальная схема представлена на рис. 1.

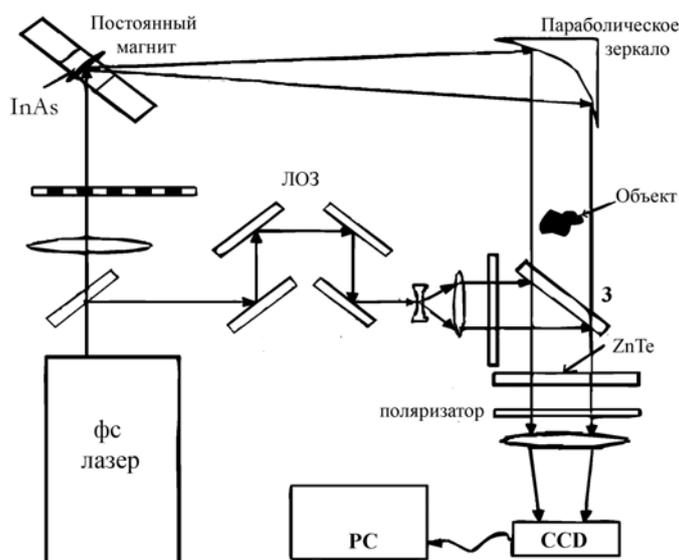


Рис. 1. Экспериментальная схема ТГц спектрографа-томографа

В схеме ТГц спектрографа-томографа лазерный пучок от фемтосекундного лазера разделяется на пробный пучок и пучок накачки. Пучок накачки падает на электрооптический кристалл InAs, помещенный в постоянное магнитное поле, где путем возбуждения фотоносителей происходит генерация ТГц-излучения, которое потом собирается параболическим зеркалом, после чего освещает мишень и рассеивается на ней. Пробный пучок, предварительно расширенный с помощью системы линз ЛОЗ, и терагерцовый коллинеарно проходят через электрооптический кристалл ZnTe, после чего измеряется поляризация прошедшего пробного излучения в каждой точке с использованием ПЗС-матрицы. ТГц-излучение создает внутренний электрооптический потенциал в кристалле, а индуцированное электрическое поле создает двулучепреломление в кристалле вследствие электрооптического эффекта. Картина двулучепреломления повторяет пространственное распределение амплитуды ТГц-излучения, а при освещении кристалла поляризованной оптической волной фемтосекундного Ti:S-лазера пространственная картина может быть зарегистрирована обыкновенной ПЗС-камерой. С помощью линии оптической задержки производится изменение времени пересечения терагерцового излучения и пробного пучка в кристалле. Таким образом, измеряя при различных задержках картину двулучепреломления, можно измерить зависимость амплитуды ТГц-излучения от времени в различных точках изображения объекта

Построение и восстановление изображений с помощью сверхширокополосных ультракоротких ТГц-импульсов

Так как при детектировании терагерцового излучения мы получаем временную зависимость электрического поля $E(x, y, t)$ ТГц-импульсов в каждой точке плоскости электрооптического кристалла, становится возможным восстановить трехмерный образ регистрируемого объекта, изображение которого формируется плоской ПЗС-матрицей, что в случае, например, обычных методов регистрации монохроматического излучения, было бы просто невозможно. Спектр исходного ТГц-импульса представлен на рис. 2.

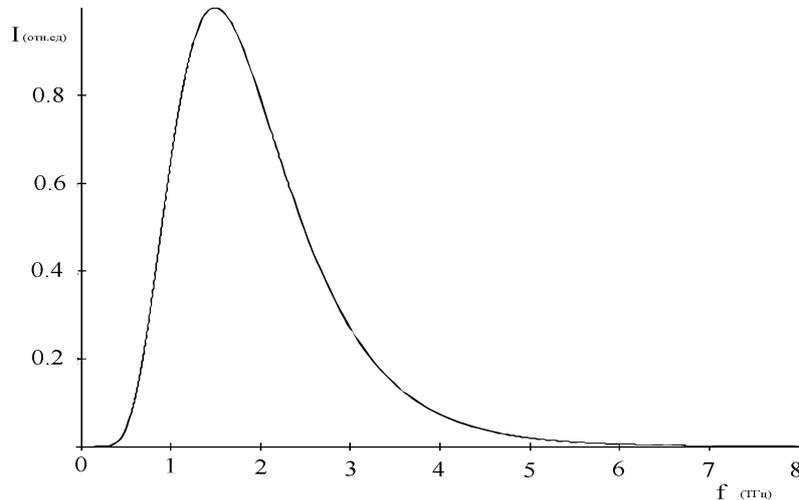


Рис. 2. Широкополосный ТГц-импульс

Рассмотрим объект, обладающий амплитудным или фазово-вращательным пропусканием, с которым жестко связана система координат (x, y) . Плоскость регистрирующего экрана параллельна плоскости объекта и находится на расстоянии l от него. С плоскостью экрана связана система координат (ξ, η) , оси которой параллельны осям плоскости (x, y) .

Используя математическое выражение принципа Гюйгенса-Френеля, нетрудно [7] найти амплитуду поля монохроматического излучения длины волны λ в точке (ξ, η)

$$U(\xi, \eta, \lambda) = \iint_A h(\xi, \eta, x, y, \lambda) U(x, y, \lambda) dx dy, \quad (1)$$

где

$$h(\xi, \eta, x, y, \lambda) = \frac{1}{i\lambda} \frac{\exp\left(-i \frac{2\pi}{\lambda} r\right)}{r}, \quad (2)$$

а $r = \sqrt{l^2 + (x - \xi)^2 + (y - \eta)^2}$ – расстояние между точками.

Так как используется сверхширокополосный ТГц-спектр $U(\lambda)$, для получения выражения квадрата модуля амплитуды в точке (ξ, η) следует $U(\lambda) \cdot U^*(\lambda)$ просуммировать по всем длинам волн:

$$U^2(\xi, \eta) = \int \left(\iint_A h(\xi, \eta, x, y, \lambda) U(x, y, \lambda) dx dy \right) \left(\iint_A h(\xi, \eta, x, y, \lambda) U(x, y, \lambda) dx dy \right)^* d\lambda. \quad (3)$$

На рис. 3 приведены результаты численного моделирования дифракции сверхширокополосного ТГц-излучения на отверстии произвольной формы по формулам, приведенным выше.

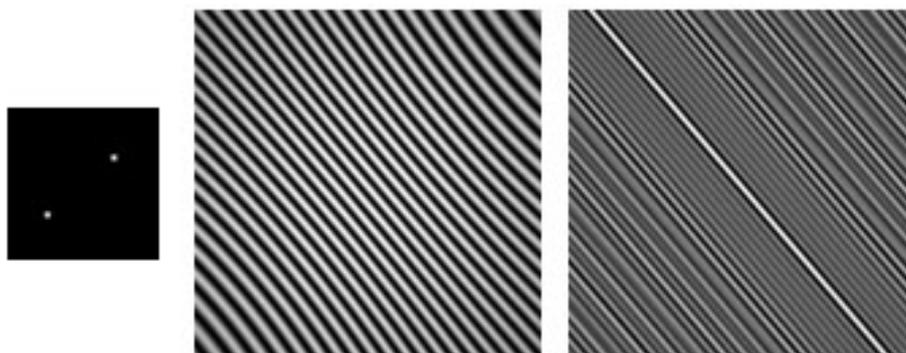


Рис 3. Объект и его дифракционная картина, полученная с помощью монохроматического излучения и с помощью широкополосного ТГц-излучения

В результате измерений может быть получена зависимость амплитуды электрического поля ТГц-импульса в каждой точке экрана. Следовательно, возможным становится решение обратной задачи. В силу обратимости по времени уравнений Максвелла можно развернуть волновой фронт во времени, что эквивалентно замене монохроматических компонент амплитуды на комплексно сопряженные им значения.

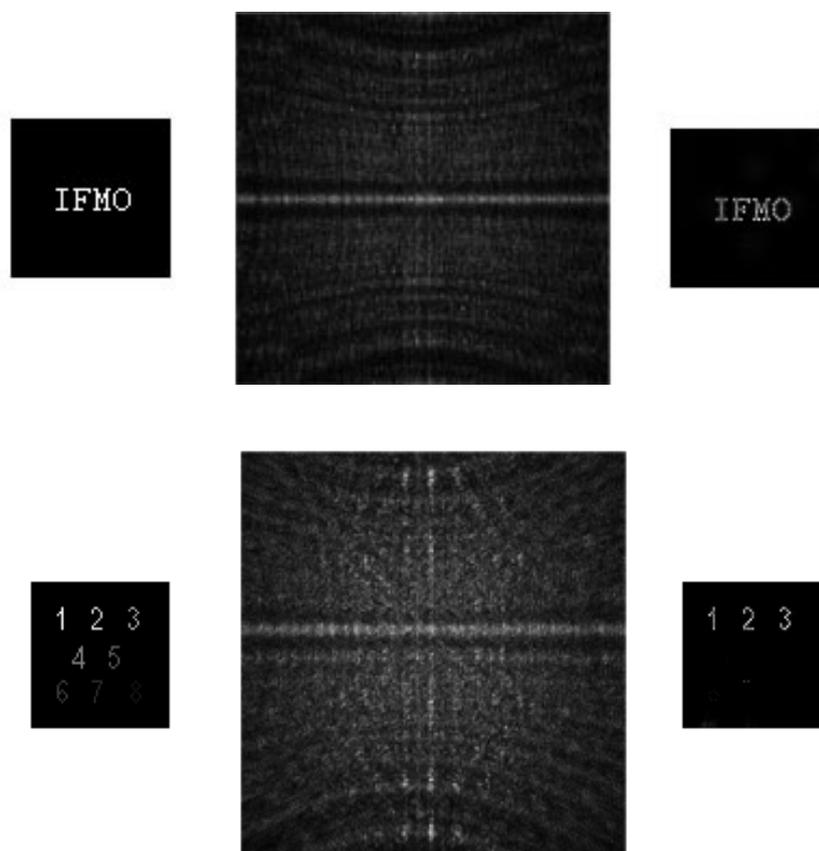


Рис. 4 Амплитудный экран, полученная на нем дифракционная картина и восстановленное изображение

Таким образом, меняя компоненту зарегистрированного поля на ее комплексно-сопряженную, для каждой длины волны получаем поле в точке объекта с координатами (x, y) в зависимости от поля, зарегистрированного на экране в точках с координатами (ξ, η) :

$$U(x, y, \lambda) = \iint_{A'} h(x, y, \xi, \eta, \lambda) U^*(\xi, \eta, \lambda) d\xi d\eta, \quad (4)$$

где

$$h(x, y, \xi, \eta, \lambda) = \frac{1}{i\lambda} \frac{\exp\left(-i\frac{2\pi}{\lambda}r\right)}{r}, \quad (5)$$

а $U^*(\xi, \eta, \lambda)$ – комплексно сопряженное к амплитуде поля для длины волны λ в точке с координатами (ξ, η) . Интегрирование следует проводить по всему размеру экрана. Для восстановления амплитудного экрана следует проинтегрировать квадрат модуля амплитуды по всем длинам волн, амплитуда которых отлична от нуля.

$$U^2(x, y) = \int \left(\iint_A h(x, y, \xi, \eta, \lambda) U^*(x, y, \lambda) dx dy \times \left(\iint_A h(x, y, \xi, \eta, \lambda) U^*(x, y, \lambda) dx dy \right)^* \right) d\lambda. \quad (6)$$

На рис. 4 показано восстановление изображения объекта, полученное с помощью численного моделирования.

Для восстановления фазового экрана достаточно использовать одну длину волны:

$$\varphi = \arctg \left(\frac{\operatorname{Re}(U(x, y, \lambda))}{\operatorname{Im}(U(x, y, \lambda))} \right). \quad (7)$$

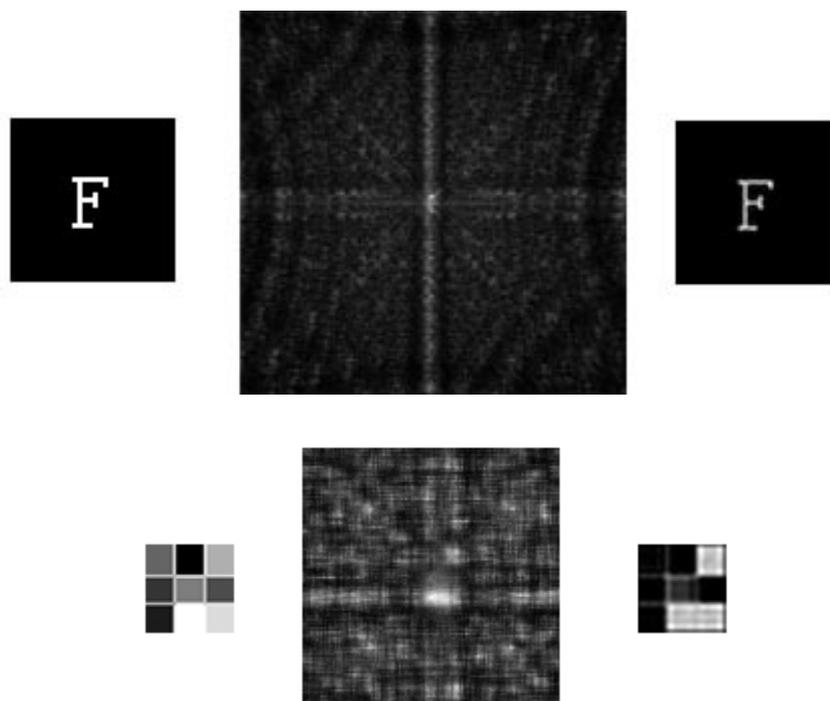


Рис. 5. Фазовый экран, полученная на нем дифракционная картина и восстановленное изображение

Выводы

1. Предложен метод восстановления изображения амплитудного и фазового объекта, освещенного сверхширокополосным ТГц-излучением, по его временной амплитудно-фазовой зависимости электрического поля в дифракционной картине.
2. Переработано и улучшено программное обеспечение, позволяющее моделировать дифракцию сверхширокополосного импульсного терагерцового излучения, с возможностью применения в реальном эксперименте.

3. Получены дифракционные картины фазовых экранов различной формы, выявлены особенности дифракционных картин широкополосного излучения.
4. Численно решена обратная задача дифракции сверхширокополосного импульсного терагерцового излучения пикосекундной длительности в условиях регистрации зависимости поля от времени в различных точках на плоскости.

Работа была поддержана грантами РФФИ №06-02-17303-а, №06-02-0184-э_б, №06-02-03035-б.

Литература

1. D. J. Cook and R.M. Hochstrasser. // *Opt. Letts.* 2000. 25. P. 1210.
2. J.F. Holzman, F.E. Vermeulen and Y. Elezzabi. // *J. Opt. Soc. Am. B* 17. 2000. P. 1457.
3. Auston D.H. and Smith P.R. Generation and detection of millimeter waves by picosecond photoconductivity. // *Appl. Phys. Lett.* 1983. 43. P. 631–3.
4. Wu Q. and Zhang X.-C. Free-space electro-optic sampling of terahertz beam. // *Appl. Phys. Lett.* 1995. 67. P. 3523.
5. P.Y. Han and X.-C. Zhang Free-space coherent broadband terahertz time-domain spectroscopy // *Meas. Sci. Technol.* 2001.12. P. 1747–1756.
6. S. Wang and X.-C. Zhang Pulsed terahertz tomography. // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2004. 37.
7. Гудмен Дж. Введение в Фурье-оптику. М.: Мир, 1970.

ВЛИЯНИЕ ПОЛЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ЭРИТРОЦИТЫ

В.В. Богатырёва, А.Ю. Москалёва

Научный руководитель – д.т.н., профессор В.А. Тарлыков

Способность эритроцитов осуществлять перенос кислорода очень важна для жизни человека. Основной характеристикой является их деформируемость, связанная с жесткостью эритроцитарных мембран. Известно, что лазерное излучение способно оказывать лечебное воздействие на биологические объекты. В статье обсуждается влияние электромагнитного поля на эритроциты. Учитывается обмен энергией и информацией с окружающей средой. Рассматриваются процессы, происходящие в биовеществе под действием лазерного излучения. Приводятся данные по изменению оптических и механических характеристик эритроцитов, саморепродукции и самоорганизации. Были проведены экспериментальные исследования зависимости изменения жесткости эритроцитарных мембран и относительного радиуса эритроцитов в гипоосмотических растворах от плотности мощности излучения He-Ne-лазера. Также исследована зависимость жесткости мембран эритроцитов от длительности облучения образцов крови He-Ne-лазером.

Введение

Механизм воздействия лазерного излучения на биологические объекты до сих пор остается неизвестным. Авторы приводят различные данные по механизму лазерной биостимуляции (ЛБС). Поэтому представляет большой интерес проведение исследований в данном направлении.

Среди множества гипотез для объяснения терапевтического эффекта низкоинтенсивного лазерного излучения (НИЛИ) сегодня выделяют две основные [1]. Одна из них – стимуляция биологических процессов через фоторегуляторную систему (Н.Ф. Гамаля) [2–7] – квантово-механический подход. По другой гипотезе предполагается, что лазерное излучение реализует биостимулирующий эффект за счет передачи им энергии лазерного излучения (В.М. Инюшин) [3, 7–11] – энергоинформационный подход.

Воздействие лазерного излучения на живые биологические объекты, в частности эритроциты, в основном зависит от интенсивности излучения и экспозиции, а также длины волны излучения, плотности мощности, плотности энергии [2–6, 8, 9].

По данным исследований [2, 12] благоприятное воздействие лазерного излучения на одну и ту же ткань наблюдается при облучении излучением различного спектрального диапазона. Учитывая, что наименьшей функциональной единицей живого организма является клетка, рассматривать селективность поглощения отдельными атомами и молекулами нецелесообразно. Эти факты говорят в пользу энергоинформационного подхода. Кроме того, при облучении гелий-неоновым лазером суспензии эритроцитов, согласно квантово-механическому подходу, изменение деформируемости эритроцитов происходит вследствие поглощения излучения кислородом – запрещенный переход.

Так как клетка обладает энергией и несет в себе некоторую информацию, то световое поле может оказывать влияние на живую систему посредством энергоинформационного обмена [8, 13, 14].

Действие поля лазерного излучения на эритроциты

Эффект ЛБС может быть обусловлен тем, что живые организмы являются открытыми, неравновесными, диссипативными, самоструктурирующимися и самоорганизующимися системами, на которые может оказывать действие когерентное излучение. При этом с окружающей средой происходит обмен веществом и информацией. При ЛБС поведение биологической системы нелинейно, и потому может наблюдаться самоорганизация. Для описания этих процессов можно воспользоваться понятием производства энтропии, которое введено в неравновесной термодинамике на основе принципа Пригожина. Система «когерентный свет–биологическое вещество» идет по пути уменьшения производства энтропии [10, 15].

В биологических структурах организма существуют собственные электромагнитные поля и свободные заряды, которые перераспределяются под влиянием фотонов лазерного излучения. При оптимальных дозах воздействия на организм низкоэнергетическим лазерным излучением осуществляется энергетическая подкачка [14]. В ответ на это в системах и органах происходят процессы активизации саморегуляции, мобилируются собственные резервы самогенеза.

При рассмотрении одного из возможных механизмов энергоинформационного обмена живых клеток с полем лазерного излучения следует учесть электрические свойства клеток [12]. Эритроциты имеют отрицательные поверхностные заряды. На внутренней поверхности мембраны преобладают положительно заряженные области (рис. 1). Как и другие клетки, эритроциты являются биоплазменными системами [12].

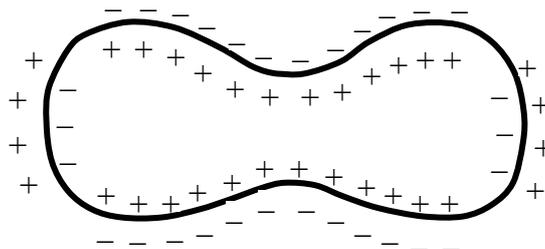


Рис. 1. Распределение мембранного потенциала эритроцита [16]

К основным свойствам биоплазмы относятся упорядоченность и необычайная устойчивость при насыщенности энергией [12]. В биоплазме распространяются электромагнитные и звуковые волны, гравитационные поля [11, 17]. Такие колебания высококогерентны и поляризованы. Поэтому необходимым условием биостимуляции является использование лазерных источников света, так как они обладают высокой временной и пространственной когерентностью [18]. Важно производить непрерывное облучение для обеспечения максимального согласования всего поля. Колебания в красной области спектра являются доминирующими [12]. Поэтому излучение He-Ne-лазера оказывает сильное действие на биологические процессы [12].

«Вмороженное» в биоплазму волновое поле изотропно и представляет собой голограмму, несущую информацию о свойствах всего организма. Изменение структуры внешних электромагнитных полей (ЭМП) способно вызывать изменения упорядоченности биоплазмы, в результате чего может наблюдаться восстановление функций поврежденной биосистемы [11, 12].

Внутривенное лазерное облучение крови (ВЛОК) способствует снижению агрегационной активности эритроцитов вследствие изменения их физико-химических свойств, в частности, увеличения отрицательного электрического заряда на поверхности клетки [10].

Эффект лазерной активации суспензии эритроцитов осуществляется через цепь структурно-функциональных перестроек в системе «растворитель (вода) – клеточная поверхность». В итоге у эритроцитов наступают существенные сдвиги в сорбционной поверхности, выявляется снижение pH в среднем на 0,15, уменьшение потребления эритроцитами глюкозы и дезоксигенация гемоглобина [11].

Конформационные и структурные перестройки мембранных макромолекул под влиянием лазерного излучения сопровождаются уменьшением количества неполярных и увеличением числа полярных групп на клеточной поверхности [11]. Происходит резервирование энергии в мембранах.

Согласно другому механизму особое внимание следует уделить биожидкостям, так как они обязательно присутствуют в составе всех биообъектов [12, 15]. На основании своих исследований В.М. Инюшин и соавторы считают, что при взаимодействии НИЛИ красного и ближнего ИК-диапазона с биообъектом одним из главных звеньев

процесса является передача энергии воздействия через жидкие среды организма. Это объясняется авторами наличием резонансной спектральной «памяти» в жидких средах при лазерном облучении [5]. В работе [11] авторы выдвигают гипотезу, что наблюдаемые перестройки мембранных макромолекул являются следствием конформационных переходов в структуре поверхностной воды. Упорядочивание молекул воды в жидкой фазе крови происходит под действием поляризующего поля лазерного излучения.

Все биожидкости являются молекулярно-ионными растворами с водой в качестве растворителя [12]. Биораствор может играть роль матрицы, на которой протекают все биохимические реакции. Накопление в биосистеме участков с измененной структурой вызывает неспецифическую модификацию энергетики и кинетики метаболических процессов, протекающих в водной матрице биожидкости, и последующие эффекты биостимуляции.

Равномерное распределение молекул гемоглобина в эритроците обуславливает равномерное распределение внутриклеточной воды. Молекулы гемоглобина располагаются на внутренней стороне мембраны между двумя молекулами воды, что позволяет сохранять автономность каждой молекулы гемоглобина и обеспечивает эластичность формы клетки. Вода составляет 65–70 % от объема эритроцита. При температуре 36,8 °С она обладает уникальными свойствами: минимальной теплоемкостью и квазикристаллической упорядоченностью при одновременном сохранении свойства жидкой воды – низкой вязкости [19].

ЭМП действует на биожидкости, содержащие водородные связи. Биологическая активность воды характеризуется распределением, а не числом водородных связей среди ее молекул. В водяной матрице клетки происходят различные временные процессы [5], приводящие к возникновению локальных неоднородностей (кластеров). ЭМП влияют на движение зарядов H^+ , меняя их действия на кластеры. Кроме того, наблюдается пороговый эффект: изменения накапливаются, не меняя структуры, а потом происходит раскол кластеров или их объединение [5, 20].

При кристаллизации молекулы воды взаимно ориентируются, и происходит насыщение водородными связями. Это приводит к изменению конфигурации белковых молекул, на которые могут наращиваться и затем объединяться в сеть структуры из молекул воды. Таким образом, вокруг эритроцита находится слой воды толщиной 5–10 мкм, пронизанный сеткой льдоподобных нановолокон (гидрогель). Аналогичные структуры может образовывать инактивированный альбумин и, скорее всего, другие белковые компоненты плазмы крови [4].

В работе [21] описывается поведение эритроцитов в низкочастотном ЭМП. В системе «эритроцит-плазма» происходит периодическое изменение давлений внутренней жидкости и внеклеточной жидкости, вызывающее механические колебания мембраны клетки. Отмечается, что электромагнитный гемолиз не связан с тепловыми эффектами.

Слабое переменное магнитное поле (МП) порядка 0,8–2,0 мТл наводит ЭДС в клетках. Происходит перестройка липидных (ЖК) компонентов биологических мембран. Наблюдается переход золь-гель, изменяется электрическое сопротивление в гелях [9]. МП величиной 10–50 мТл изменяет магнитную восприимчивость макромолекул вещества, пространственное положение диполей, внутриклеточных структур и клеточных мембран, приводит к увеличению ионной активности в тканях, конформационным изменениям ЖК-структур, в первую очередь внутриклеточной воды [3].

Выдвинуто предположение [3, 9], что наблюдаемые эффекты ЛБС вызваны эффектом Фредерикса, который заключается в переориентации директора молекул ЖК в масштабах всей ячейки. Этот эффект возникает даже в слабых полях НИЛИ с мощностью 1–20 мВт, независимо от длины волны излучения. Светоиндуцированная переориентация директора приводит к изменению показателя преломления ЖК (рис. 2) [9].

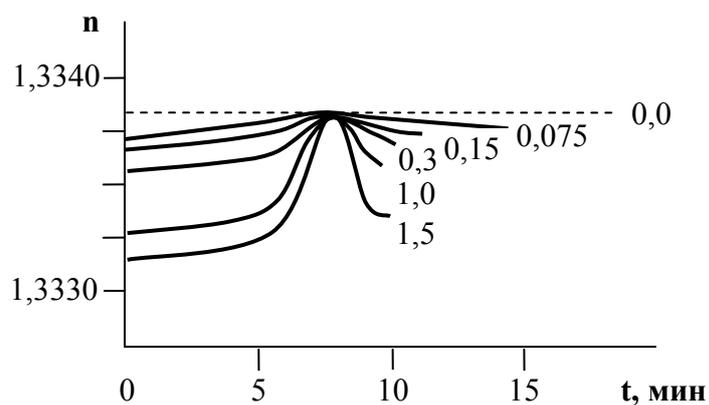


Рис. 2. Зависимость показателя преломления n от времени облучения при различной объемной концентрации эритроцитов в суспензии [9]

Следует отметить, что в качестве ЖК выступают не только липиды мембраны, но ЖК-кластеры воды, в которых водородные связи вносят основной вклад в поляризуемость [9]. Водные кластеры можно уподобить ЖК-доменам радиусом порядка 10–15 нм (для эритроцитов). При поверхностном взаимодействии с коллоидными частицами домены существуют в течение длительного времени (от десятков минут до часов). Плотность домена может изменяться [9].

Полосы или ленты молекул воды совершают изгибные и поворотные движения вокруг своего равновесного положения. Структура жидкой воды похожа на структуру нематических ЖК с квазикристаллическим типом упаковки [22]. Дефекты скручивания являются очень устойчивыми и могут перемещаться на большие расстояния без потери формы и энергии (солитоны), поэтому вода имеет долгую память относительно внешних воздействий. Динамическое состояние жидкой воды определяется наличием в ней солитонов. Низкочастотное электромагнитное поле меняет скорость движения солитонов [9].

Биологические молекулы представляют собой цепочку нелинейно связанных осцилляторов [23], которые переизлучают поглощенную лазерную энергию по механизму возврата Ферми-Паста-Улама. Энергия первоначального возмущения распределяется не по всем возможным колебательным состояниям цепочки (термолизация), а по отдельным высшим колебательным гармоникам, через некоторое время возвращаясь к распределению колебаний, подобному первоначальному возмущению. При переизлучении сложной биомолекулой возникают уединенные электромагнитные волны – солитоны. С учетом явления резонанса можно сказать, что и поглощение солитонов максимально для молекул, имеющих структуру, подобную биомолекуле-излучателю [23].

«Распространение уединенных волн в живой ткани обеспечивает энергоинформационный обмен между биологическими макромолекулами и приводит к формированию суммарного поля, которое стимулирует исправление «дефектных» молекул». Биостимуляция осуществляется за счет снижения синтеза дефектных молекул, так как нормальные молекулы за счет резонансного поглощения получают больше энергии [23].

МП вызывает ориентационную перестройку жидких кристаллов, составляющих основу мембран и клеточных структур. Происходящая переориентация сказывается на их проницаемости, что важно для регуляции биохимических процессов.

Под воздействием МП-эритроциты могут изменять свою форму [24], что способствует улучшению их прохождения в сосудистом русле. На тканевом уровне эффект магнитного воздействия достигается за счет повышения проницаемости мембран в зоне воздействия и улучшения микроциркуляции крови.

Также в основе ЛБС может лежать эффект Гальбота (рис. 3а) [1,10]. Поперечная периодичность поля лазерного излучения, прошедшего через клеточную структуру,

приводит к возникновению продольной (вдоль направления распространения) его периодичности (рис. 3б) [10]. Чем больший оптический путь пройден светом через биологическую ткань, тем в большей степени его структурные характеристики – спекл-пятна [25] и каустики – соответствуют характеристикам биоткани. Изменение структуры светового фронта должно идти до тех пор, пока его фрактальная размерность не сравняется с фрактальной размерностью облучаемой биоткани, что обеспечит наилучшие условия возбуждения биологических структур и макромолекул [13]. Модовая структура поля когерентного излучения, распространяющегося в клеточной среде, приводит к саморепродукции изображений и «самоисправлению» элементов структуры поля. При лазерном облучении наибольшее пропускание имеет место для пространственно-временных мод, содержащихся в падающей волне и соответствующих наинизшей моде элементарной составляющей структуры – клетке [10].

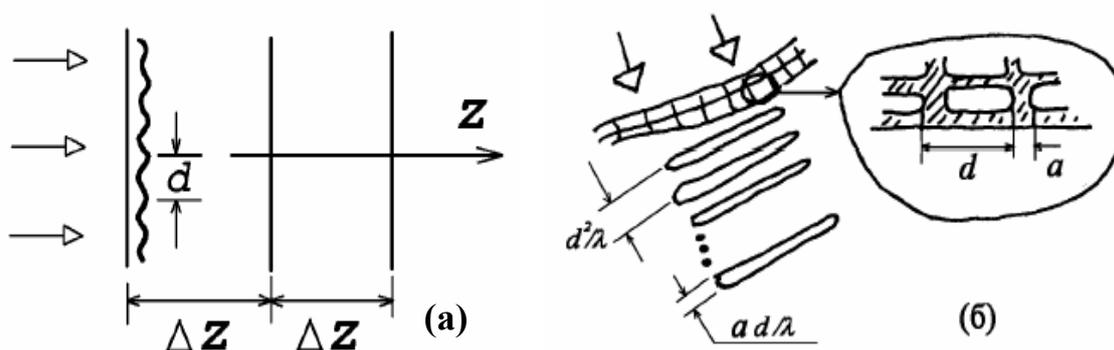


Рис. 3. Расположение плоскостей Тальбота для периодического предмета (а), структура поля когерентного излучения при внутривенном облучении крови транскутанным способом (б)

Свойство самореставрации периодических полей позволяет объяснить одну из причин невлияния лазерного излучения на функционирование здоровых биотканей [10].

В статье [26] описано влияние градиентного (по интенсивности) лазерного поля на органеллы, мембраны и клетки, в частности эритроциты. Показано, что градиентное лазерное поле оказывает влияние на концентрацию частиц и увеличивает их температуру, вызывая диффузию. Наблюдается обратимая деформация цитоскелета.

Приводятся результаты эксперимента по расположению эритроцитов в световом поле двух интерферирующих лазерных лучей: клетки выстраивались в максимумах интерференционной картины. После перекрытия второго луча в течение нескольких секунд они сохраняли свое положение, после чего опять располагались хаотично.

Под действием градиентного лазерного поля аргонового лазера ($\lambda=514$ нм) с изменяющейся плотностью мощности от 300 до 1200 Вт/см² эритроцитарные монетные столбики разрушались в случае, когда они располагались под углом к интерференционным полосам [26]. Более подробно схожий эксперимент описан в [27].

Освещение биологической ткани когерентным лазерным светом приводит к сильной неравномерности распределения интенсивности излучения [27] в клетке, что в свою очередь приводит к внутри- и внеклеточным градиентным силам, действие которых может значительно повлиять на направление и скорость биологических процессов.

Авторы сделали выводы, что действие градиентного лазерного поля нерезонансного типа не сопровождается поглощением фотона, слабо зависит от длины волны, но требует высокой степени когерентности [27].

В [12] описывается эксперимент по наблюдению переизлучения поглощенного лазерного излучения корешком лука. Регистрация производилась с помощью фотоэмульсии, нанесенной на специальную пластинку и защищенной УФ-фильтрами от ко-

решка. В результате было получено изображение лука в лучах собственного излучения. Небольшая угловая расходимость излучения дает возможность предполагать, что каждый точечный источник на объекте генерирует подобно лазеру когерентное излучение, доказывая плазменную природу излучения. Умерщвление корешка вызывает свечение, засвечивающее фотопленку с большим ореолом вокруг объекта. Мертвый корешок вообще не излучал. Сделан вывод о возможности когерентного излучения нести в себе голограмму состояния объекта.

Экспериментальные исследования деформируемости эритроцитов

Важным компонентом крови являются эритроциты, выполняющие, прежде всего, дыхательную функцию [28]. Облучение крови позволяет оказывать влияние на весь организм сразу, так как она циркулирует по всем органам. ЛБС кровеносной системы посредством ВЛОК широко используется в биологической и медицинской практике, но механизм действия этого феномена остается до конца неясным. Этим обусловлен значительный интерес к изучению влияния облучения крови на ее реологические показатели (деформируемость, агрегацию эритроцитов, вязкость крови). Контроль реологических параметров необходимо осуществлять при различных заболеваниях системы крови, в том числе множественной миеломе.

Экспериментальные исследования деформируемости эритроцитов методом лазерной дифрактометрии проводились на образцах крови больных множественной миеломой. При этом эритроциты помещали в гипотонические растворы различной концентрации или в изотонический раствор. Методика приготовления образцов крови и проведения экспериментального исследования описана в [29]. В качестве источника излучения использовался He-Ne-лазер ($\lambda = 0,63$ мкм), плотность мощности изменялась в диапазоне от 2,5 до 170 мВт/см², а также 235 мВт/см². Схема экспериментальной установки приведена на рис. 4.

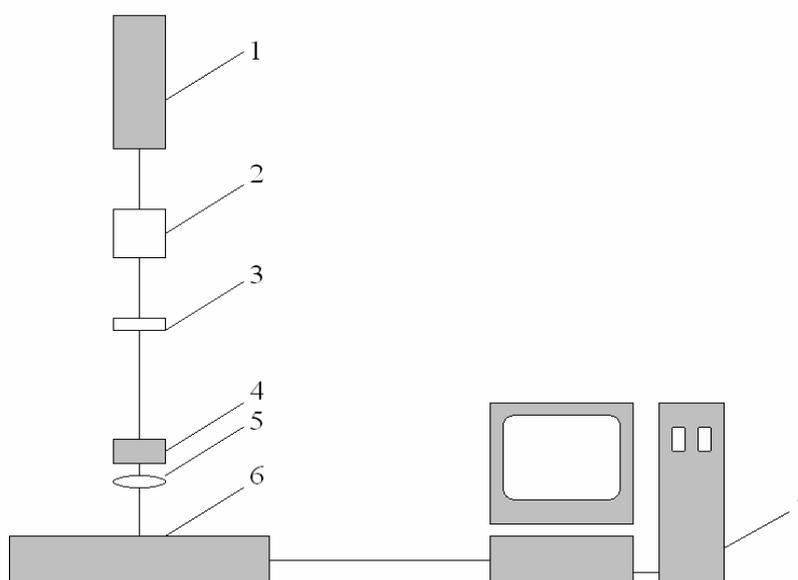


Рис. 4. Схема экспериментальной установки: 1 – He-Ne – лазер ($\lambda=0,63$ мкм); 2 – оптический attenuator; 3 – диафрагма; 4 – образец; 5 – объектив; 6 – фотоприемное устройство, 7 – персональный компьютер

Были получены следующие экспериментальные результаты.

Проведено исследование влияния плотности мощности излучения He-Ne-лазера на жесткость эритроцитарных мембран в условиях гипотонического набухания эритроцитов. Плотность мощности излучения He-Ne-лазера изменялась в диапазоне от 5 до

115 мВт/см² (15 образцов крови больных множественной миеломой) и от 2,5 до 170 мВт/см² (8 образцов крови больных множественной миеломой). Для каждого образца крови были построены графики изменения относительного радиуса совокупности эритроцитов от концентрации NaCl в растворе для каждой плотности мощности во второй фазе гипосмотического набухания (рис. 5). Характерный вид полученной зависимости изменения жесткости эритроцитарных мембран от плотности мощности лазерного излучения для одного из образцов крови приведен на рис. 6.

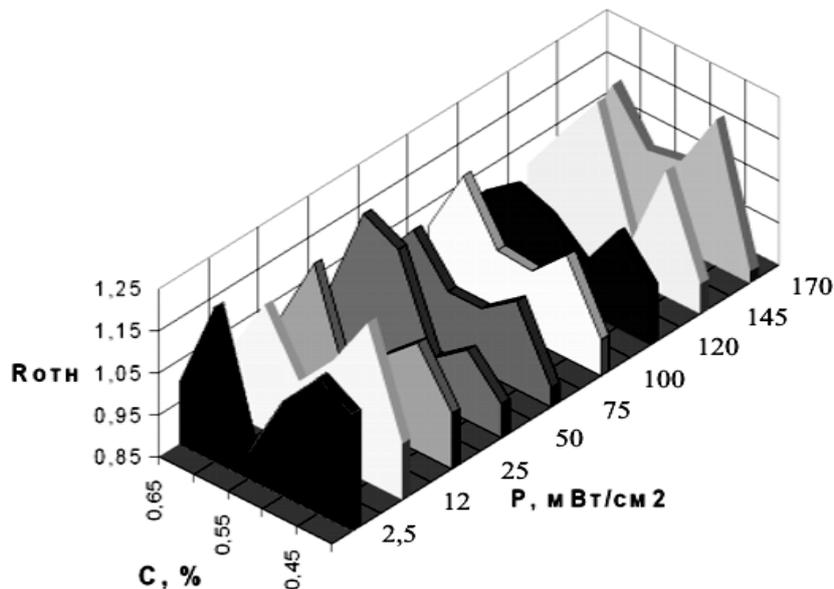


Рис. 5. Изменение относительного радиуса сферулированных эритроцитов в зависимости от концентрации NaCl в гипосмотическом растворе при разных плотностях мощности лазерного излучения (от 2,5 до 170 мВт/см²)

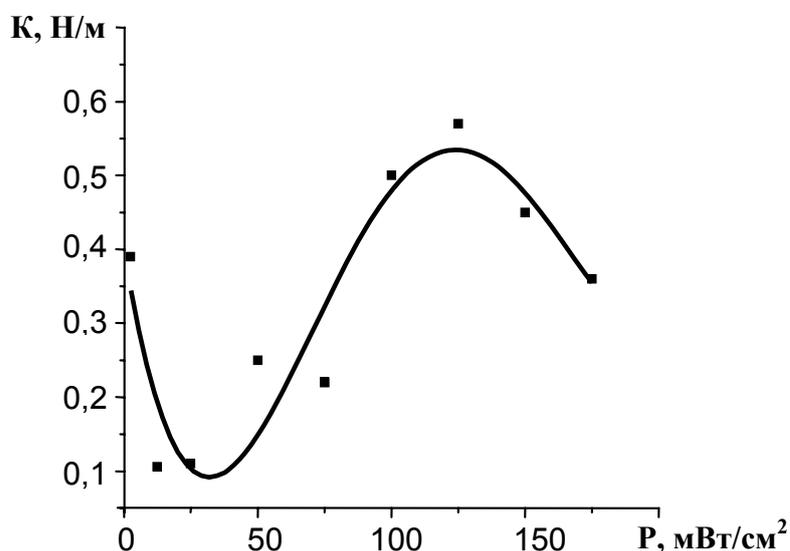


Рис. 6. Характерный вид зависимости жесткости эритроцитарных мембран от плотности мощности излучения He-Ne-лазера

При воздействии на эритроциты, находящиеся в изотоническом растворе (8 образцов крови больных множественной миеломой), излучения He-Ne-лазера, плотность мощности которого изменялась в диапазоне от 2,5 до 170 мВт/см², для ряда образцов была получена зависимость изменения относительного радиуса эритроцитов от плотности мощности He-Ne-лазера (рис. 7), которая отражает характерные для гипосмотического набухания процессы. Это может указывать на возможность инициации процесса

гипоосмотического набухания эритроцитов в изотоническом растворе в результате облучения образца крови.

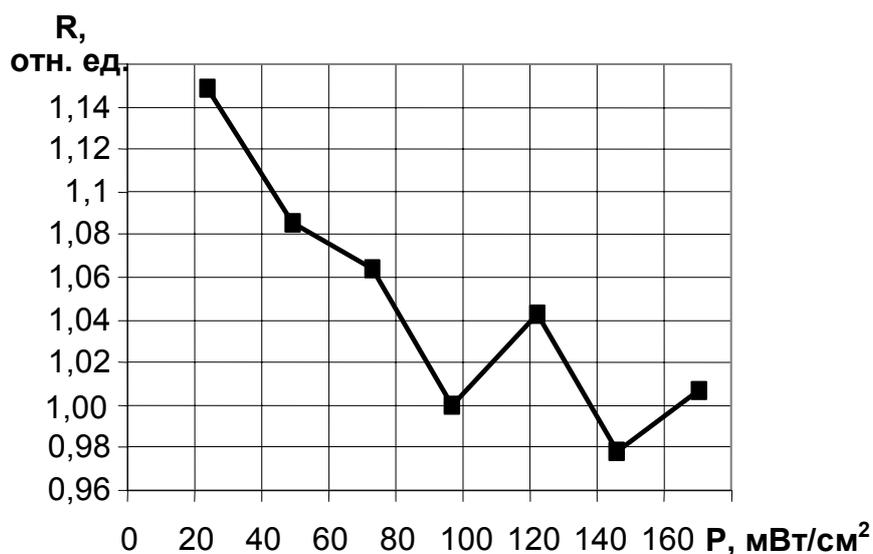


Рис. 7. Зависимость относительного радиуса эритроцитов в изотоническом растворе от плотности мощности He-Ne-лазера

Была обнаружена зависимость жесткости мембран эритроцитов от длительности облучения образцов крови He-Ne-лазером, плотность мощности 235 мВт/см². Исследовано 5 образцов крови больных множественной миеломой (эритроциты, помещенные в гипоосмотические растворы). Длительность воздействия составила 20 минут, при этом контроль жесткости эритроцитарных мембран проводили в процессе облучения и еще в течение 20 минут после выключения лазера (через каждые 5 минут). Пример полученной зависимости жесткости мембран эритроцитов от длительности облучения для одного из образцов крови приведен на рис. 8. При этом для отдельных образцов наблюдается обратимый характер полученной зависимости после выключения лазера (рис. 8), для других образцов данная зависимость отсутствует, что может быть связано с различием исходных характеристик крови для разных больных.

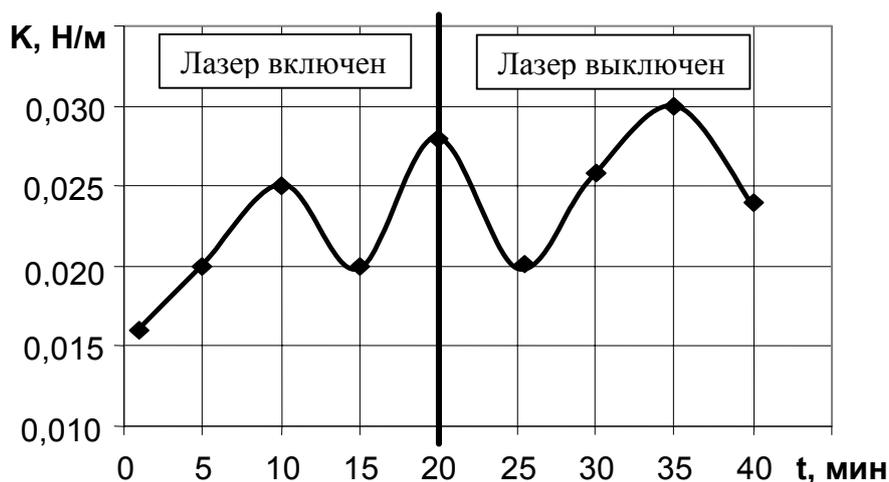


Рис. 8. Зависимость жесткости эритроцитарных мембран от длительности облучения образца крови излучением He-Ne-лазера (1–20 мин. – лазер включен, 21–40 мин. – лазер выключен)

Наблюдаемые при облучении крови изменения относительного радиуса эритроцитов и их деформируемости могут быть объяснены не только с позиции энергоинформационного подхода, но и происходящими при этом фотоиндуцированными процессами,

среди которых можно отметить структурные перестройки эритроцитарной мембраны и изменение ее проницаемости.

Заключение

НИЛИ оказывает эффективное терапевтическое воздействие, а также может вызывать структурные изменения биологических сред.

Подробно рассмотрено действие поля лазерного излучения согласно энергоинформационному подходу. Воздействие НИЛИ на эритроциты осуществляется за счет передачи энергии и информации клеткам. Абсолютное значение длины волны лазерного излучения не оказывает влияния на эффективность ЛБС, однако требуются монохроматичность и когерентность облучающего света (энергоинформационный подход).

Процесс взаимодействия лазерного излучения с живой тканью является самоорганизующимся: сама ткань меняет пространственные и частотные характеристики первоначального излучения, которое, в свою очередь, меняет оптические характеристики ткани за счет возбуждаемых биологических процессов. Саморепродукция биологических структур происходит за счет того, что когерентное излучение, попадая в биовещество, изменяет свое пространственное распределение интенсивности за счет оптической анизотропии ткани.

Некоторые авторы разделяют действия магнитных волн, акустических и электрических, рассматривая влияние НИЛИ на биоплазму и биологические растворы, включающие в свой состав воду. Взаимодействие структурированной воды и белковых макромолекул приводит к перестройке последних.

В результате экспериментальных исследований были получены зависимости жесткости эритроцитарных мембран и относительного радиуса красных клеток крови от плотности мощности излучения He-Ne-лазера, изменяющейся в диапазоне от 2,5 до 170 мВт/см².

Также была обнаружена зависимость жесткости мембран эритроцитов от длительности облучения образцов крови He-Ne-лазером при плотности мощности 235 мВт/см². Данные, полученные в результате 20-минутного облучения и дополнительного контроля в течение 20 минут после выключения лазера, показали для ряда образцов детальную обратимость изменения жесткости мембран эритроцитов после прекращения воздействия лазерного излучения.

При исследовании влияния НИЛИ на эритроциты следует учитывать не только механизмы энергоинформационного подхода, но и возможность протекания фотозависимых химических реакций в клеточной мембране.

Литература

1. Богатырева В.В. Влияние низкоинтенсивного лазерного излучения на живые клетки. // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. 2006. Вып. 26. Исследования в области приборостроения. С. 10–17.
2. Карандашов В.И., Петухов Е.Б., Зродников В.С. Фототерапия (Светолечение): Руководство для врачей. / Под ред. Н.Р. Палеева. М.: Медицина, 2001. 392 с.
3. Низкоинтенсивная лазерная терапия / Под ред. Москвина С.В., Буйлина В.А. М.: Техника, 2000. 724 с.
4. Захаров С.Д., Иванов А.В., Вольф Е.Б. и др. Структурные перестройки в водной фазе клеточных суспензий и белковых растворов при фотоокислородном эффекте. // Квантовая электроника. 2003. Т. 33. № 3. С. 149–162.
5. Захаров С.Д., Иванов А.В. Светоокислородный эффект – физический механизм активации биосистем квазимонохроматическим излучением. М., 2006. 50 с.

6. Гамалея Н.Ф. Световое облучение крови – фундаментальная сторона проблемы / Тезисы Всесоюзной конференции «Действие низкоэнергетического лазерного излучения на кровь». Киев, 1989. С. 180–182.
7. Малов А.Н., Выговский Ю.Н. Физика лазерной биостимуляции. М.: МИЛТА– ПКП ГИТ, 2002. 77 с.
8. Владимиров Ю.А. Лазерная терапия: настоящее и будущее. // Соросовский образовательный журнал. 1999. № 2. С. 2–8.
9. Чудновский В.М., Леонова Г.Н., Скопинов С.А. Биологические модели и физические механизмы лазерной терапии. Владивосток: Дальнаука, 2002. 157 с.
10. Malov A.N., Malov S.N., Feshchenko V.S. Resonance nature of laser biostimulation from the point of view quasi-optics. // Laser Physics. 1996. Vol. 6. №5. P. 979–982.
11. Инюшин В.М. Биоэнергофикация – новое направление для интенсификации производства. / Биоэнергетика организмов. Сб. науч. ст./ Под ред. В.М. Инюшина. Алма-Ата, 1987. 79 с.
12. Инюшин В.М. Биостимуляция лучом лазера и биоплазма. // Казахстан, 1975. 120 с.
13. Салаяев Р.К., Дударева Л.В., Ланкевич С.В. и др. Влияние пространственной структуры лазерного излучения на эффективность лазерной биостимуляции / www.media-security.ru
14. Крайнов В.П. Ориентация и фокусировка молекул полем лазерного излучения. // Соросовский образовательный журнал. 2000. Т. 6. Вып. 4. С. 90–95.
15. Опритов В.А. Энтропия биосистем. // Соросовский образовательный журнал. 1999. № 6. С. 33–38.
16. Лукашев Е.А. Асимптотическое решение модели форм эритроцита как автоволнового процесса. // Биофизика. 1991. Т. 36. Вып. 1. С. 83–89.
17. Семенов С.Н. Фонон – квант биологической (клеточной) мембраны. / www.sciteclibrary.ru
18. Будаговский А.В. О способности клеток различать когерентность оптического излучения. // Квантовая электроника. 2005. Т. 35. № 4. С. 369–374.
19. Цветков В.Д. Кислородное обеспечения сердца и принцип оптимального вхождения. Пушкино, 2004. 152 с.
20. Сусак И.П., Пономарев О.А., Шигаев А.С. О первичных механизмах воздействия электромагнитных полей на биологические объекты. // Биофизика, 2005. Т. 50. № 2. С. 367–370.
21. Жгенти Т.Г., Кеванишвили Г.Ш. О воздействии низкочастотного электромагнитного поля на биологическую клетку. // Биофизика. 1991. Т. 36. Вып. 3. С. 483–486.
22. Скопинов С.А. Локальная структура и ее роль в формировании ориентационного порядка в нематических жидких кристаллах // Автореф. дисс. на соиск. учен. степ. к. ф.-м. н. / Урал. политех. ин-т им. С.М. Кирова // Свердловск, 1983. 23 с.
23. Загускин С.Л. Лазерная терапия – мифы и реальность, возможные пути развития. // Лазер Информ, 1999. Вып. 2 (161). С. 1–6.
24. Христофоров В.Н., Грабовщинер А.Я., Любимова И.П., Христофорова Т.В. Механизмы нелинейных оптических процессов в биологии при квантовой терапии. / X международная научно-практическая конференция по квантовой медицине. 01 – 05 дек. 2003. М., 2004. С. 74–76.
25. Союз врача и инженера. М: Знание, 1988. 64 с.
26. Стародубцов В. Магнитотерапия. // 9 месяцев. 2006. №8. / www.7ya.ru
27. Иванов А.П., Кацев И.Л. О спекл-структуре светового поля в дисперсионной среде, освещенной лазерным пучком. // Квантовая электроника. 2005. Т. 35. № 7. С. 670–674.
28. A.N. Rubinov. Physical grounds for biological effect of laser radiation. // J. Phys. D: Appl. Phys., 2003. Vol. 36. P. 2317–2330.

29. S.B. Bushuk, J.V. Kruchenok, G.I. Kurilo et al. Orientation of erythrocytes in the fringes of an interference laser field. // *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.* 2005. Vol. 7. P. 382–385.
30. Иржак Л.И. Состав и функции крови. // *Соросовский образовательный журнал.* 2001. Т. 7. №. 2. С. 11–19.
31. Москалева А.Ю. , Смирнова О.А. Дифрактометрический метод исследования влияния плотности мощности лазерного излучения на деформируемость эритроцитов. // *Вестник II межвузовской конференции молодых ученых. Сборник научных трудов.* // СПб: СПбГУ ИТМО, 2005. Т. 2. С. 207–212.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ФРАКТАЛЬНО-МАТРИЧНОГО РЕЗОНАТОРА НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДИСТИЛЛИРОВАННОЙ ВОДЫ

И.Е. Скалецкая

Научный руководитель – д.т.н., профессор В.Т. Прокопенко

Прямыми экспериментами с дистиллированной водой с использованием явления поляризации света обнаружена зависимость ее оптических свойств от нахождения или отсутствия в экспериментальной установке фрактально-матричного резонатора (ФМР). Обнаружено явление гистерезиса оптических свойств воды при введении и удалении ФМР. Наблюдения проведены с помощью поляризационного метода на приборе эллипсометрического типа.

Введение

Вода все еще таит в себе множество загадок. Благодаря особой конфигурации молекулы и наличию водородных связей вода может принимать сложную упорядоченную структуру и быть восприимчивой к внешним воздействиям и информации. Установлено, что вода из природных источников обычно структурирована, но по-разному.

В работе выполнен анализ принципов исследования аномальных свойств реструктуризации чистой воды, индуцированной информативными потоками психотропных генераторов электромагнитного смога (ЭМС). Рассмотрены возможности и способы использования эллипсометрических приборов в системах экологического мониторинга патологического действия ЭМС на медико-биологические объекты по коррелированным откликам на него некоторых аномальных характеристик воды, в том числе ее динамической реструктуризации.

Выполнены пробные эллипсометрические измерения состояния поляризации света в отраженных от водной поверхности световых полях. Проверена принципиальная возможность использования приборов эллипсометрического типа для изучения оптических параметров жидкостей.

Показана недостаточность теоретических представлений однослойного приближения при анализе оптических параметров (толщины эффективного слоя и составляющих его комплексного показателя преломления) приповерхностных структур самоорганизации воды в жидкой фазе. В соответствии с этим разработана программа физически более адекватного и математически корректного поиска оптимальной модели, описывающей поверхность воды. В качестве рабочей оптической модели приповерхностной структуры планарных водных зеркал выбран алгоритм трехслойной системы над изотропной подложкой объема чистой воды.

Объектом исследования в данной работе является вода – с одной стороны, хорошо изученное, широко распространенное в природе вещество с уникальным набором аномальных, но, с другой стороны, не всегда объяснимых свойств. На современном уровне знаний все больший интерес вызывают вторичные (кристаллоагрегатные) и третичные (полимерные) модификации структуры воды, отвечающие за ее поведение в слабых электромагнитных полях с эффектами реструктурирования и памяти к ним, имеющие чрезвычайно важное медико-биологическое значение для экозащиты человека в индустриально патогенной среде.

Наиболее поразительным является факт того, что «мысленное воздействие на воду в жидком состоянии регистрируемо научными методами посредством, например, контроля физических и химических свойств жидкости». Такое свойство может успешно применяться для хранения цифровой информации. Это удивительное свойство можно назвать «памятью» воды, очевидным проявлением которой может быть реструктуризация молекулярных образований, особенно на поверхностных, информационно значимых структурах. Таким образом, одними из наиболее перспективных методов изучения

аномального феномена «памяти» воды являются методы исследования поверхностного разнообразия ее структур.

Пассивные генераторы (Г) индуктивного реструктурирования воды представлены четырьмя образцами кремниевых пластин с нанесенными на них рисунками в виде регулярных Фурье-решеток (ФМР) для построения сложных интерференционных полей ЭМ волн отражения и переизлучения, часть из которых сведена на нет (в белый шум) грубой переполровкой (рис. 1).

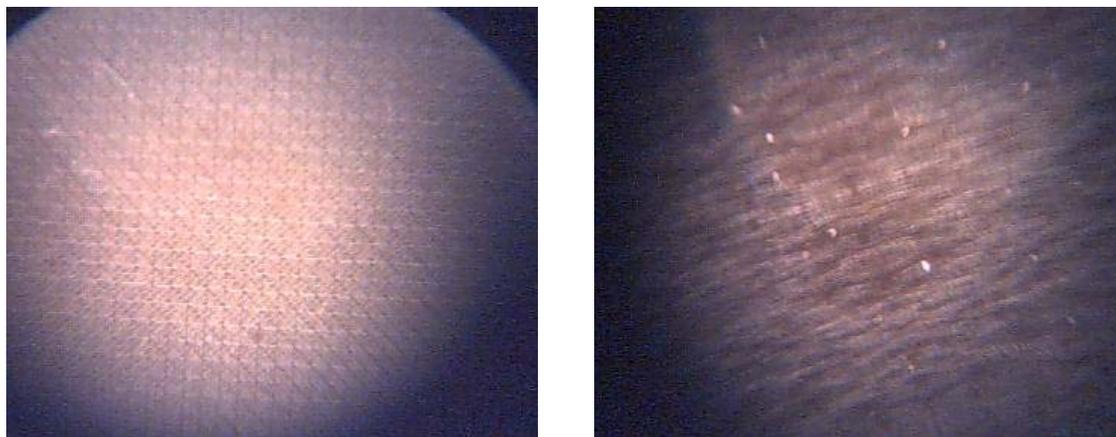


Рис. 1. Пассивные генераторы индуктивного реструктурирования воды

В рамках работы были проверены принципиальные возможности использования приборов эллипсометрического типа для изучения оптических констант жидкостей. Перспективность рассматриваемого метода исследования обусловлена высокой чувствительностью приборов эллипсометрического типа к амплитудно-фазовым характеристикам поля отраженной световой волны, определяемым приповерхностными структурами, отвечающими за многие свойства изучаемых объектов, в частности индуцированных их взаимодействиями с внешней средой и не обнаруживаемых прямыми энергетическими способами исследования.

Метод эллипсометрии

Метод эллипсометрии относится к наиболее прогрессивным нанотехнологиям в оптическом материаловедении благодаря физической простоте работы с простейшей формой когерентного поляризованного света при эллиптической аппроксимации его амплитудно-фазовых характеристик. Его принципиальное преимущество перед энергетическими методами состоит в уникально высокой чувствительности измерений амплитудно-фазовых соотношений полей световых волн, испытавших взаимодействие с исследуемым веществом.

В основе метода эллипсометрии лежит теория бесконечнократной интерференции поляризованного света в средах их распространения безотносительно к значениям размеров их толщин между границами раздела фаз от атомно малых (идеальных границ Френеля) до макроразмеров плоскопараллельных изделий.

Теория эллипсометрии восходит к решениям задач максвелловской электродинамики в краевой постановке для плоских волн, известным как граничные уравнения Френеля и удачно обобщенным Эри и Друде в виде основного уравнения эллипсометрии (ОУЭ). Эллипсометрические параметры ψ и Δ при заданных θ_i (угол падения) и λ (длина волны иницирующего излучения) являются характеристиками поверхности и определяются природой вещества, из которого состоит образец, структурой приповерхностного слоя, качеством поверхности (средней высотой шероховатостей, струк-

турными нарушениями, обусловленными полировкой, и т.д.), наличием на ней какой-либо пленки той или иной толщины, свойствами среды, в которой находится образец. Эти параметры ψ и Δ входят в основное уравнение эллипсометрии (ОУЭ) [1]:

$$\operatorname{tg}\psi \cdot e^{i\Delta} = R_p / R_s, \quad (1)$$

и описываются обобщенными комплексными коэффициентами Френеля $R(\varphi, n, k, d/\lambda)$. Их явный вид для формул (1) известен только для частных моделей взаимодействия ортогональных р- и s-компонент поля световой волны с веществом, оптические параметры которой задаются комплексными показателями преломления m и толщинами соответствующих слоев d . Это уравнение устанавливает связь между микроскопическими и макроскопическими характеристиками образца и эллипсометрическими параметрами поверхности.

Величину $\rho = \operatorname{tg}\psi \cdot e^{i\Delta}$ называют относительным коэффициентом отражения поляризованного излучения.

При исследовании отражающих систем методом эллипсометрии приходится решать следующие три основные задачи:

- 1) вычисление поляризационных углов ψ и Δ на основе той или иной модели отражающей системы, характеризующейся определенным набором параметров;
- 2) экспериментальное определение поляризационных углов ψ и Δ ;
- 3) сравнение вычисленных значений поляризационных углов ψ и Δ (для набора моделей отражающих систем при изменении одного или нескольких параметров этих моделей) с экспериментальными значениями углов ψ и Δ , полученными при изменении тех же параметров реальной отражающей системы, и установление модели, адекватной исследуемой отражаемой системе.

После того, как адекватная модель той или иной отражающей системы установлена, эллипсометрия может быть применена для контроля над параметрами этой системы, для исследования изменений этих параметров под влиянием тех или иных внешних воздействий и т.д. [2].

Приборное обеспечение

В качестве прецизионных приборов для определения оптических констант воды использовались эллипсометры серии ЛЭФ-2 и -3М.

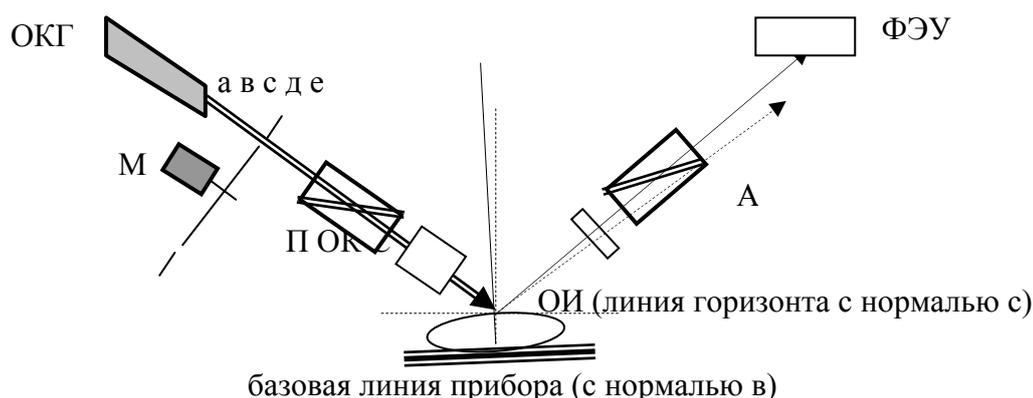


Рис. 1. Схема скрещенных поляризаторов при косом падении света на ОИ

На рис. 1 введены следующие обозначения: ОКГ – источник когерентного монохроматического излучения ($\lambda=632.8$ нм); М – низкочастотный модулятор-прерыватель светового пучка 1 мм апертуры; П, А – кристаллические поляризаторы Глана-Томсона; С – компенсатор ($\lambda/4$); а, е – реальные лучи падения и отражения на строго горизонтальном участке ОИ; в – базовая линия симметрии между плечами падения (а) и реги-

страции (д) ФЭУ; ОИ – объект исследования (зеркальная поверхность дисциллированной воды). ОК – расположение возможного коллиматора тонких пучков.

Источники неустранимых систематических погрешностей ЛЭФ-2:

- значительная апертура светового пучка для непланарных ОИ;
- конечная расходимость лучей светового пучка ОКГ;
- неполное совпадение базовой нормали (в) с линией отвеса (с);
- вибронезащищенность ОИ от промышленных помех;
- низкая частота селекции механического модулятора (М).

В простейшей модели плоской границы раздела фаз эти обобщенные коэффициенты переходят в классические коэффициенты Френеля для идеальных границ, из которых, в частном случае диэлектриков без поглощения, при углах $\varphi_{бр}$ выводится закон Брюстера:

$$n = \operatorname{tg}(\varphi_{бр}). \quad (2)$$

В более общем случае комплексного описания показателя преломления (2) теория обобщенных коэффициентов Френеля значительно усложняется и теряет аналитическую простоту интерпретации свойств решений прямой и обратной задач эллипсометрии. При этом только оптическая модель раздела сред в виде плоской математической границы раздела приводит к строгим аналитическим решениям обратной задачи при оценке оптических констант материала.

Предварительный эксперимент

В результате ряда предварительных установочных экспериментов были выполнены оценки значения показателя преломления чистой воды.

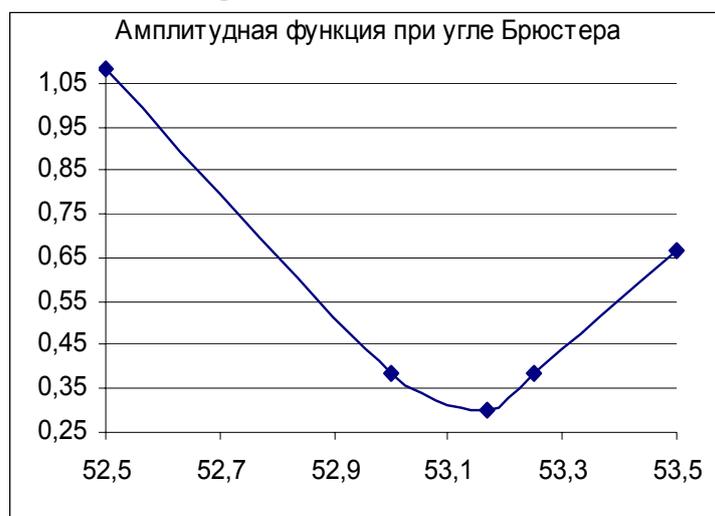


Рис. 2. Амплитудная функция эллипса поляризации светового поля, отраженного от воды

Здесь по поведению амплитудной функции графическим способом находим угол Брюстера и оцениваем показатель рефракции $\operatorname{tg}(53.13^\circ)=1.333328$, который с большой точностью воспроизводит значение $n = 4/3$, хотя сами измерения по модели идеальных границ Френеля варьируются уже с третьего знака после запятой.

Этот факт высокой точности оценки вещественной части показателя преломления до пяти знаков после запятой по методу Брюстера можно объяснить хорошей статистикой измерений (18 точек) вблизи угла Брюстера $\varphi_{бр} = 53.13^\circ$, при котором сами эллипсометрические измерения в принципе проводить невозможно из-за потери s-луча в компонентах поля. При этом статистический закон увеличения точности при многократных измерениях $1/\sqrt{18}$, более чем вчетверо, улучшает точность однократных измерений, разброс которых начинается с третьего знака после запятой.

Обоснование выбора физических моделей

При использовании модели идеальных границ Френеля для зеркально гладкой поверхности чистой воды получается, что среднее групповое значение показателя преломления для углов от 80° до 90° проявляет тенденцию к завышению их значений и как бы характеризует аномальную поляризуемость воды в верхнем слое сил поверхностного натяжения, который захватывают скользящие по поверхности лучи света.

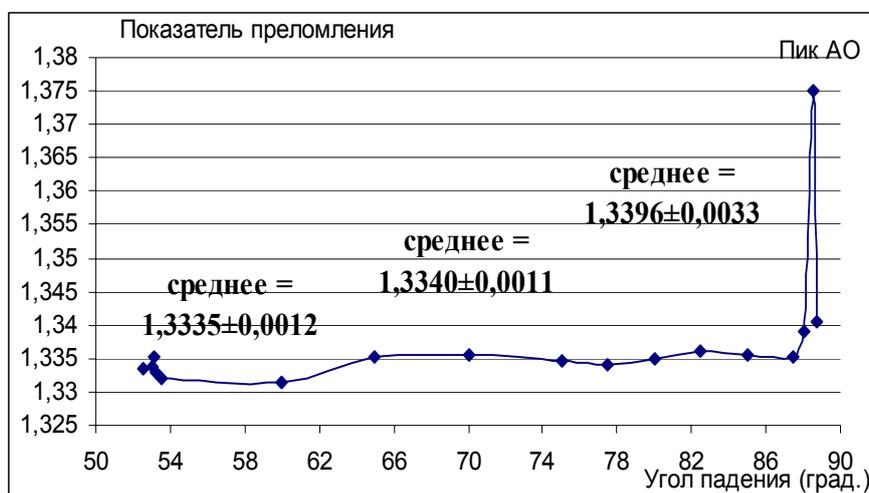


Рис. 3. Зависимость показателя преломления от угла падения света

На рис. 3 представлено поведение показателя преломления воды от углов падения. Ожидается, что материальные константы не должны зависеть от углов падения, однако на графике наблюдается 3 характерных зоны в окрестности угла Брюстера, до и после него. Усредненные для этих участков показатели преломления представляют значения, существенно отличные друг от друга в 3 знаке (1,3335; 1,3340; 1,3396). Эта возрастающая последовательность числовых значений n при переходе от добрюстеровских к послебрюстеровским углам отражает типичное явление эллипсометрии, известное как парадокс Васичека [3]: константы – регулярные функции углов. Более того, в скользящих лучах проявляется феномен аномального отражения (в рентгеновской оптике – эффект Ионеды). Отличие этих показателей в 3 знаке можно проинтерпретировать следующим образом:

- при малых углах падения световые лучи проникают в более глубокие слои жидкости и отражают информацию о как бы заниженных усредненных показателях преломления, т.е. отражают информацию о менее оптически плотном, разрыхленном переходном приповерхностном слое воды, что можно объяснить скоплением под слоем сил поверхностного натяжения, растворенных в воде газов.
- в противоположной зоне на скользящих лучах свет отражает информацию об известном более плотном ПП слое, так называемом слое проявления сил поверхностного натяжения, где естественно ожидать более плотной упаковки молекулярных кластеров воды.
- пик аномального отражения выходит за рамки обсуждения.

Возможность того, что это является измерительным артефактом, связанным с погрешностью измерений, исключается в силу оценки средней теоретически допустимой погрешности измерений путем дифференцирования формулы (2): $\Delta n = (1+n^2)\Delta\varphi$, при $\Delta\varphi \approx 10^{-5}$ для ЛЭФ2, которая более чем на порядок ниже, чем размахи приведенных средних значений. Следовательно, высказанная гипотеза является правомочной – на скользящих лучах доминирует информация о слоях сил поверхностного натяжения, на

малых же углах падения – о более глубоких аномальных структурах типа конденсаторного слоя с газовой диэлектрической прослойкой.

В представленных данных, рассчитанных по модели идеальных границ Френеля для зеркально гладкой поверхности чистой воды, нет информации о толщинах возможных приповерхностных слоев чистой воды, которые можно получить усложнением оптической модели системы путем введения эффективного однородного слоя. Чистая вода на поверхности раздела фаз (на воздухе) должна обладать значительными по толщине переходными приповерхностными слоями d_0 (ППС) в силу аномально высокой электрической поляризуемости ее молекул и наличия газовых накоплений. Следовательно, в первом приближении оптическая модель зеркала воды может представлять собой некий однородный слой (d_0) с известным средним для него значением показателя преломления n_0 или эффективным значением, которые можно оценить по амплитудно-фазовым параметрам (Ψ , Δ) эллипса поляризации отраженного под произвольным углом (φ) монохроматического света путем решения соответствующего основного уравнения эллипсометрии (ОУЭ) Эйри-Друде.

Возникает вопрос об адекватности модели однородного слоя.

Авторы склоняются к мысли, что данная модель будет недостаточной для корректного описания полученных экспериментальных данных. Требуется еще более глубокое усложнение оптической модели отражающей системы.

В жидком состоянии вода доступна для проникновения в дефекты ее структуры газов внешней среды, равно как и наоборот – испарению молекул (даже на морозе). Эти обстоятельства важно учитывать при построении оптической модели поверхностных слоев воды, определяющих ее отражательную способность для монохроматического ($\lambda=632.8$ нм) поляризованного света, по которой обычно и проводится диагностика ее транспортных и информационно значимых свойств.

Анализ физико-химических свойств воды показывает, что оптической моделью ее приповерхностных структур на воздухе может служить оптимальная и наиболее адекватная трехслойная система в пяти средах – от полубесконечной воздушной до полубесконечной чистой водной подложки:

- внешний – паровой молекулярный слой;
- средний – слой сил поверхностного натяжения воды;
- внутренний – тонкий газовый слой аут-диффузии растворенных в воде газов.

Таким образом, оценка оптических констант этих образцов воды по модели идеальной границы Френеля отражает только рассмотренную выше тенденцию роста показателя преломления на скользких лучах и наблюдение оптической плотности разреженной среды при более глубоко проникающих относительно небольших углах падения.

Эксперименты с системой кремниевых экранов

Задача экспериментального исследования принципиального факта реструктуризации воды в присутствии внешних генераторов или пассивных индукторов (Γ) состоит в том, чтобы обнаружить статистически значимые различия параметров переходных приповерхностных структур (ППС) чистой воды в отсутствии и присутствии этих индукторов при прочих равных условиях измерений (температуре, давлении, углах падения света и пр.) и единой методологии анализа экспериментальных данных.

Была проведена серия измерений с выбранными объектами исследования – кремниевыми пластинами, помещенными внутрь водной среды, с Фурье-трансформаторными покрытиями (и без), служащих для компенсации внешних информационно-значимых воздействий электромагнитных полей на объект исследований. Была исследована пространственная зависимость индукции реструктуризации отражающего слоя воды путем погружения экрана на разную глубину под отражающей поверхностью воды.

Полученные предварительные данные измерений на приборе ЛЭФ-2 со значительной неустранимой систематической составляющей погрешности юстировки совпадения нормали к линии горизонта в вершине капли и оси симметрии угла падения и отражения позволяют оценить относительные вклады на вариации оптических параметров поверхностных слоев в зависимости от глубины погружения фрактально-матричных резонаторов. Сравнение разностей оптических параметров воды в присутствии и отсутствии переизлучателей на разных глубинах позволяет сделать вывод о том, что структурирование поверхности ослабляется по мере удаления генерирующего их экрана. Убедительной проверкой этой гипотезы были измерения на микрокапле воды на экране.

Наиболее резонным способом минимизации рассмотренной систематической неустранимой составляющей погрешности является помещение воды под прозрачную призму (например, из стекла марки К8). В этом случае юстировка осуществляется перемещением трехкоординатного стола. Такая схема эксперимента обеспечивает адекватность описания трехслойной модели оптической системы приповерхностных слоев воды и исследования воздействия резонатора. Кварцевая призма позволяет устранить паровой слой, уменьшить слой адгезионного контакта сил поверхностного натяжения на границе вода–стекло и вывести газы третьего слоя вне зоны контакта призмы с водой. Таким образом, оптическая система переходит в однослойную структуру с оптическим доступом контроля ее оптических параметров при падении света под углом призмы ($\varphi=65^\circ$) при нормальном входе и выходе лучей через ее боковые грани.

На длине волны He-Ne-лазера ($\lambda=632.8$ нм) вода [4] имеет показатель преломления порядка $n=4/3=1.333$ и поглощения $k=\frac{\lambda}{4\pi} \kappa \approx 0.00304(6.328/12.56)10^{-5}=1.5 \cdot 10^{-8}$. Показатель преломления столь же прозрачного, как и вода, оптического стекла марки К-8 близок к $3/2$ $n = 1.514$.

На рис. 4, а, б представлены аналитические решения для (1) в воздушной и водной средах под призмой из кварцевого стекла К-8. Эти решения не противоречат эксперименту при $k_{SiO_2} > k_{H_2O}$ и полностью подтверждают теоретическую гипотезу [5] о расположении аномальной части фазовой функции под углами 2π , а не 0, как это предполагалось в [1].

Согласно расчетным данным (см. рис. 6а), фазовые функции Δ эллипса поляризации отраженного света при угле падения $\varphi=65^\circ$ для воды и воздуха по методу НПВО отличаются более, чем на 20° , тогда как амплитудные функции Ψ при этих углах ПВО практически неразличимы.

Эксперимент хорошо согласуется с этим теоретическим положением.

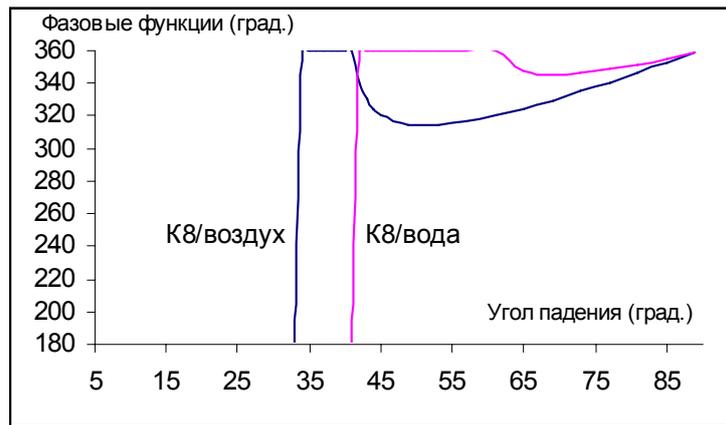
Действительно, по данным измерений в п. 1, 2 (табл. 1) эта разность «фаз» составляет $22^\circ 45'$. При повторных измерениях (п. 17, 18) на свежей порции воды для исследования образца №4 в дополнительных эллипсометрических зонах, эта разность оказалась равной $22^\circ 52'$. Семь минут разницы между ними можно объяснить разницей объемов этих порций воды.

№	Объект измерения	P_1	A_1	P_2	A_2	Примечания
1	контроль воздуха	$71^0 40' 0''$	$180^0 4' 0''$	$341^0 46' 0''$	$92^0 1' 0''$	$\Psi_0 \approx 45^0, \Delta_0 = 325^0$
2	контроль воды	$70^0 47'$	$169^0 30'$	$341^0 05'$	$79^0 50'$	$\Psi^0 \approx 45^0, \Delta^0 = 347^0$ $\Delta = 596^0 41' - A_1 - A_2$
3	пластина № 6 в воде	$70^0 46' 30''$	$169^0 45'$	$340^0 48'$	$79^0 35'$	$A_1 + A_2 = 249^0 20'$

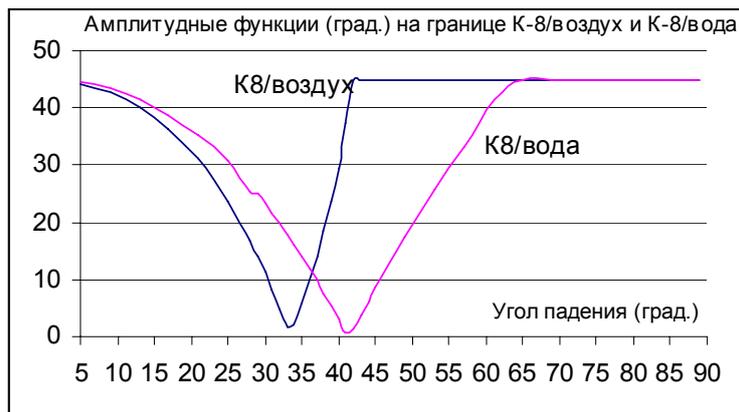
Таблица 1. Протокол первичных азимутальных измерений на 65^0 призме К-8

№	Объект измерения	P ₁	A ₁	P ₂	A ₂	Примечания
4	вода без пласт. №6	70 ⁰ 46' 70 ⁰ 43'30" 70 ⁰ 44'30"	169 ⁰ 47' 169 ⁰ 41'15" 169 ⁰ 42'30"	340 ⁰ 45' 340 ⁰ 49' 340 ⁰ 40'	79 ⁰ 31' 79 ⁰ 24' 79 ⁰ 25'	юстировка юстировка юстировка юстировка A ₁ +A ₂ =249 ⁰ 07'
5	модификация воды пласт. №1 вне К-8	70 ⁰ 40'30"	169 ⁰ 49'0"	340 ⁰ 32'	79 ⁰ 15'	A ₁ +A ₂ =249 ⁰ 04'
6	вода+пласт. №1 под К8	70 ⁰ 35'15"	169 ⁰ 55'0"	341 ⁰ 34'	79 ⁰ 14'30"	A ₁ +A ₂ =249 ⁰ 09'
7	пласт. №1 снова вне К-8	70 ⁰ 36'30"	169 ⁰ 49'	340 ⁰ 31'30"	79 ⁰ 12'	A ₁ +A ₂ =249 ⁰ 01'
8	вода без пласт. № 1			340 ⁰ 30'	79 ⁰ 08'	переюстировка
9	вода с №2 вне К-8	70 ⁰ 37'	169 ⁰ 49'	340 ⁰ 40'	79 ⁰ 03'30"	A ₁ +A ₂ =248 ⁰ 53'
10	вода+пласт. №2 под К8	70 ⁰ 36'	169 ⁰ 48'	340 ⁰ 38'	79 ⁰ 05'15"	A ₁ +A ₂ =248 ⁰ 53'
11	контроль воды без №2	70 ⁰ 38'45"	169 ⁰ 50'30"	340 ⁰ 39'	79 ⁰ 12'15"	A ₁ +A ₂ =249 ⁰ 03'
12	пластинка №3 вне К-8	70 ⁰ 39'30"	169 ⁰ 52'	340 ⁰ 42'	79 ⁰ 02'	№3 плавает A ₁ +A ₂ =248 ⁰ 54'
13	пластинка №3 под К-8	70 ⁰ 43'	169 ⁰ 51'	340 ⁰ 38'30"	79 ⁰ 11'	A ₁ +A ₂ =249 ⁰ 02'
14	контроль воды без №3	70 ⁰ 44'30"	169 ⁰ 53'	340 ⁰ 48'	79 ⁰ 04'	A ₁ +A ₂ =248 ⁰ 57'
15	пластинка №5 вне К-8	70 ⁰ 47'	169 ⁰ 56'30"	340 ⁰ 49'	79 ⁰ 08'	№5 плавает A ₁ +A ₂ =249 ⁰ 04'
16	пластинка №5 под К-8	70 ⁰ 35'	169 ⁰ 56'30"	340 ⁰ 47'	79 ⁰ 09'	A ₁ +A ₂ =249 ⁰ 05'
17	контроль воздуха в смежных зонах	71 ⁰ 18'	182 ⁰ 08'	161 ⁰ 09'	90 ⁰ 56'30"	смена зон измерений Δ ₀ =323 ⁰ 37'
18	контроль воды	70 ⁰ 41'	170 ⁰ 27'	160 ⁰ 39'	79 ⁰ 45'	Δ ⁰ =346 ⁰ 29'
19	пластинка №4 вне К-8	70 ⁰ 47'	170 ⁰ 24'	160 ⁰ 41'	79 ⁰ 30'30"	A ₁ +A ₂ =249 ⁰ 54'
20	пластинка №4 под К-8	70 ⁰ 41'	170 ⁰ 21'	160 ⁰ 45'	79 ⁰ 35'	A ₁ +A ₂ =249 ⁰ 52'

Таблица 1 (продолжение). Протокол первичных азимутальных измерений на 65⁰ призме К-8



а)



б)

Рис. 4. Машинные решения прямой задачи эллипсометрии НПВО на призме К-8

Интерпретация данных эксперимента

Введение чистой кремниевой пластины (п. 3) не изменило стартовое значение фазовой характеристики чистой воды ($A_1 + A_2 = 249^\circ 20'$), хотя азимуты анализатора сильно перестроились ($\pm 15'$).

Выведение этой пластины (п. 4 измерений в сводной таблице №2) незначительно изменило азимуты (до момента переюстировки луча на диафрагме ФЭУ) – около $6'$, однако это отразилось и на сдвиге фазовой функции, которая после переюстировки все-таки изменилась на $13'$. Скорее всего, неустойчивость этих измерений связана с кинетикой (за время около 3 мин) перестройки внутренних конденсаторов системы после удаления пассивного экрана.

Введение (п. 5) новой пластины №1 с затертым (шероховатым) Фурье-узором существенно модифицировало фазовую функцию на $3'$. Шаги по п. 6 и п. 7 показывают реактивность системы на движение экрана (пластины №1) в воде с размахами перестройки и восстановления до $7'$, причем наибольшая амплитудная перестройка возникает при расположении диэлектрического и полупроводникового экранов друг против друга. Боковые модификации слабее – до $4'$, но они говорят о проявлении коллективного дальнего действия в воде даже при нахождении кремниевого экрана на плаву (на слое аномально высоких сил поверхностного натяжения воды).

Пункты 9 и 10 показывают, что вода насытилась воздействиями родственных экранов, на объекте №2 фаза минимизировалась, упав на очередные $8'$, и не менялась в зависимости от положения его в воде.

Общее свойство, которое следует из количественного анализа всех вариаций наиболее информативной здесь фазовой функции с шестью экранами, включая пп.11–16, состоит в том, что среднее значение 10.4 ± 3.6 размахов ее вариаций (максимум до 18') при введении экранов вдвое выше средних значений 5 ± 1 размахов ее вариаций при выведении этих экранов. Исходя из этого можно сделать статистически значимый вывод о том, что в воде существует гистерезис восстановления оптических свойств приповерхностных слоев воды на границе с кварцевой призмой при удалении индуцирующих их вариации кремниевых экранов.

Дальнейшие исследования и перспективы

Дальнейшая работа по данному направлению предполагает проведение температурно-зависимых измерений вариаций свойств воды. Из известных аномалий достаточно отметить тот факт, что свойства воды четко специфицируются по ряду температурных интервалов.

Планируется более тщательное исследование обнаруженного феномена «памяти» воды, в основе которого может лежать физико-химический механизм гистерезиса, и более глубокая интерпретация на основе оптико-физических данных эксперимента на примере сравнения действия различных переизлучателей, способных резонансно переизлучать (отражать) в противофазе информационно значимые волновые поля, способные по механизму интерференции погасить внешние волны слабых электромагнитных полей.

Рассмотренные выше экспериментальные данные позволяют предположить, что проведение работы с прямым «раздавливанием» капли воды на фрактально-матричных элементах окажется наиболее информативным и целесообразным исследованием аномальных свойств воды.

Выполненные первые постановочные эксперименты с водой в поляризованном свете при нормальных условиях раскрывают сложную картину динамических свойств воды, детальное изучение которых требует более тщательного планирования кинетического, термодинамического и поляризационно-оптического комплексного эксперимента.

Заключение

Рассмотренная в работе проблема включает в себя ряд последовательных задач, таких как выяснение принципиальной возможности использования поляризационных методик для изучения свойств и оптических параметров (комплексных показателей преломления и толщин структурирования) слоев жидких сред; исследование динамики изменения свойств воды под действием внешних факторов, электромагнитных полей и реструктурирующих объектов; обнаружение и объяснение таких аномальных свойств воды, как «память» и способность к перестройкам под действием различных причин; изучение транспортно-информационных свойств воды посредством высокочувствительных поляризационно-оптических методик современной нанотехнологической диагностики.

На данный момент получены удовлетворительные результаты в пользу использования поляризационно-оптической диагностики для изучения оптических свойств жидкостей:

- выполнены пробные эллипсометрические измерения состояния поляризации света в отраженных от водной поверхности световых полях;
- рассчитаны характеристики эллипсометрических параметров в поле отраженной световой монохроматической волны на длине 632,8 нм для модели сверхтонкого

слоя сил поверхностного натяжения и показана недостаточность подобного моделирования приповерхностных структур чистой воды;

- разработан алгоритм многослойного моделирования оптических слоев для воды.

Литература

1. Горшков М.М. Эллипсометрия. М.: Сов. радио, 1974. 200 с.
2. Ржанов А.В., Свиташев К.К., Семенов А.И., Семенов Л.В., Соколов В.К. Основы эллипсометрии. Новосибирск: Наука, 1978.
3. Алексеев С.А., Прокопенко И.Т., Скалецкий Е.К. и др. Введение в прикладную эллипсометрию. СПб: СПбГУ ИТМО, 2005. 196 с.
4. Алексейцев А.В., Серов И.Н., Слесарев В.И., Шабров А.В. Структурно-информационное состояние воды и воздействие на него фрактально-матричных структуризаторов «Айрэс». // Вестник СПбГМА им. Мечникова. 2002. № 3. С. 124–131.
5. Скалецкая М.И., Петровский Г.Т. и др. О нетрадиционной интерпретации решений прямой задачи эллипсометрии для двух простейших моделей. // ДАН СССР. 1979. Т.249. № 2. С. 355–358,

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФРАКЦИОННОГО ПОЛЯ, ФОРМИРУЕМОГО ФРАКТАЛЬНЫМИ ДИФРАКЦИОННЫМИ СТРУКТУРАМИ

А.В. Нелепец

Научный руководитель – д.т.н., профессор В.А. Тарлыков

Рассмотрены особенности формирования дифракционного поля для фрактальных дифракционных элементов. Предложен аналитический метод расчета дифракционных спектров самоподобных фрактальных узоров. Проведен анализ структуры ДК. Приведено сопоставление фрактальных размерностей узоров и их дифракционных спектров.

Введение

В последние годы идет активное исследование фрактальных структур в различных областях науки и техники. С момента опубликования первой книги Мандельброта, посвященной фракталам [1], установлено, что фрактальный характер имеет большинство объектов естественного происхождения – от облаков и береговых линий до мхов, нейронов головного мозга и костных тканей человека. Установлена также и фрактальность динамики многих процессов – от цикличности разливов Нила до динамики изменения стоимости ценных бумаг [2, 3].

В настоящее время проявляется большой интерес к исследованию и применению фрактальных структур в оптике. Активно исследуется фрактальная структура мод неустойчивых лазерных резонаторов [4–7], разрабатываются фрактальные интерференционные зеркала [8], методы оптической диагностики структуры костной ткани как биофрактала [9, 10]. В ряде работ [11–15] исследована дифракция Фраунгофера на амплитудных экранах, функция пропускания которых соответствует фракталам Кантора [12, 13] и фракталу, известному под названием ковра Серпинского [40, 15]. Такие узоры можно представить в виде суперпозиции периодических составляющих на плоскости. На этом представлении основан и метод расчета дифракционных картин от этого узора.

Для установления связи между геометрией фрактального узора и свойствами дифракционных картин в работах [14, 15] приведен анализ самоподобия дифракционных картин. Для этого авторы используют функцию самоподобия, определяемую как корреляция между распределением интенсивности дифрагированного поля и распределением интенсивности в дифракционной картине, увеличенной в R раз. В работах [12–15] приведены результаты расчетов дифракционных спектров и результаты экспериментального исследования фрактальных дифракционных структур, однако не приведен анализ основных закономерностей формирования структуры дифрагированного поля, не прослежены закономерности его изменения при переходе к более высоким поколениям предфракталов.

В настоящей работе использован аналитический метод расчета дифракционных спектров фрактальных узоров, основанный на свойствах линейности и интерференции Фурье-преобразования. Исследованы фрактальные структуры двух видов: ковер Серпинского и узор, составленный из пересекающихся окружностей. Проанализирована структура дифракционных картин и основные механизмы, влияющие на эту структуру. Произведено сопоставление фрактальных размерностей узоров и дифракционных картин. Для определения фрактальной размерности узоров использован метод подсчета «сеточной» размерности, размерность дифракционных картин определена по методу, предложенному в работе [16].

Исследуемые фрактальные узоры

Исследованы два вида фрактальных узоров. Узоры первого типа представляют собой совокупности пересекающихся окружностей (рис. 1а). На каждом этапе форми-

рования такие структуры строятся из самоподобных элементов изменяющегося масштаба, что позволяет говорить о фрактальности геометрической структуры узора.

Основным (базовым) элементом, из которого строятся все последующие уровни, является кольцо. Предфрактал первого поколения представляет собой совокупность 5 исходных колец. При его построении базовое кольцо помещается в центре, и к нему добавляются четыре кольца, смещенные вправо, влево, вверх и вниз относительно центра на величину радиуса кольца. Полученная фигура обводится еще одним кольцом, радиус которого вдвое превышает радиус исходного кольца. Предфрактал второго поколения строится по той же схеме, но вместо исходного кольца берется предфрактал первого поколения. В данной работе расчеты проведены для фрактального узора третьего поколения, который и является полной картиной узора.

Выбор таких фрактальных структур для исследования обусловлен возможностью построения узоров в различном количестве направлений. На рис. 1а представлены первые два поколения фрактала, построенного в четырех направлениях. Возможно построение такого фрактала также и в 2, 8, 16 и т.д. направлениях. В этом случае возможно проследить изменение свойств дифракционного распределения интенсивности в зависимости от фрактальности узора.

Второй вид узора – хорошо известный и описанный в литературе [1, 2] фрактал, имеющий название ковра Серпинского (рис. 1б). Здесь базовым элементом построения является квадрат, и процесс формирования рисунка может быть сведен к схеме, подобной описанной выше.

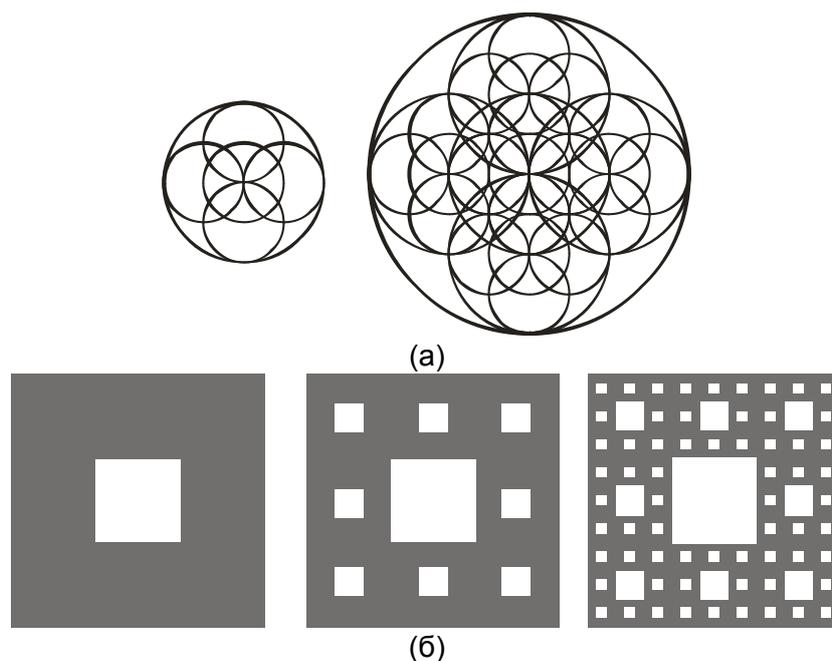


Рис. 1. Исследуемые фрактальные узоры: (а) первые два поколения фрактального узора, построенного в 4 направлениях; (б) первые три поколения Ковра Серпинского

Расчет дифракционных картин от узоров

Расчет ДК можно выполнить с помощью быстрого преобразования Фурье изображения узора. Но в этом случае построить тонкую структуру дифракционного спектра практически не представляется возможным в силу необходимости задания очень мелкого шага разбиения исходного изображения. Кроме того, затруднительным представляется и анализ вклада в дифракционную картину от различных элементов узора. Поэтому для расчета ДК выбран аналитический метод расчета.

Для расчета ДК от узоров, построенных из пересекающихся колец, использован Фурье-спектр кольца и теорема о переносе [17]. Математически узкую кольцевую щель в полярных координатах можно записать, используя понятие дельта-функции $F(\rho) = \delta(r - a_0)$. Это радиально-симметричная функция, и ее Фурье-образ можно получить, осуществляя преобразование Фурье-Бесселя по переменной r :

$$F(\rho) = 2\pi \int_0^{\infty} r f(r) J_0(2\pi r \rho) dr = 2\pi \int_0^{\infty} r \delta(r - a_0) J_0(2\pi r \rho) dr = 2\pi a_0 J_0(2\pi a_0 \rho) = \alpha J_0(\alpha \rho),$$

где J_0 – функция Бесселя первого рода нулевого порядка, α – параметр, характеризующий размер объекта (радиус кольца).

Численные расчеты показали, что формула, полученная с использованием δ -функции, дает точное положение первого минимума в предельном случае нулевой толщины линии $h=0$. Если принять как допустимую ошибку в 1%, то можно считать, что полученная формула применима при отношении толщины линии к размеру кольца, равном 0,02 и менее.

Для расчета ДК от ковра Серпинского использована известная формула Фурье-спектра прямоугольника.

Расчет Фурье-спектра всего узора производится поэтапно, в соответствии со схемой построения узора. При расчете используются такие свойства Фурье-преобразования, как линейность и теорема переноса. Для получения Фурье-образа первого поколения предфрактала образ его базового элемента (кольца или квадрата) умножается на сумму фазовых множителей, соответствующих сдвигу базовых элементов относительно центра узора. Дифракционные спектры следующих поколений фрактальных узоров получаются домножением спектров первого поколения на сумму фазовых множителей, соответствующих сдвигу элементов предыдущих поколений.

Для получения распределения интенсивности дифракционной картины необходимо значение соответствующей функции в каждой точке помножить на комплексно сопряженное число.

Распределения интенсивности ДК, получившиеся в результате расчетов, приведены на рис. 2. Наблюдаемые ДК имеют ярко выраженную симметрию и наличие фрактальных элементов.

Анализ структуры дифракционного поля

Рассмотрим структуру дифракционной картины от фрактального узора первого типа, построенного в четырех направлениях. Учитывая свойства линейности и интерференции Фурье-преобразования, очевидно, что вид и структура ДК определяются, в основном, двумя явлениями:

- (1) взаимодействие излучения, дифрагированного кольцами различного диаметра, приводит к модуляции интенсивности колец ДК;
- (2) смещение колец из центра узора и образование периодических структур из колец приводит к модуляции ДК в виде полос Юнга.

Дифракционный спектр каждого кольца в отдельности, описываемый функцией Бесселя первого рода нулевого порядка, представляет собой совокупность концентрических колец, ширина и период которых в радиальном направлении зависит от размера кольца. В рассматриваемом случае дифракция происходит на кольцах различного диаметра. Число колец зависит от их диаметра. Интенсивность света, дифрагированного каждым кольцом, является функцией его диаметра. В результате происходит модуляция интенсивности колец и сбой периода их следования.

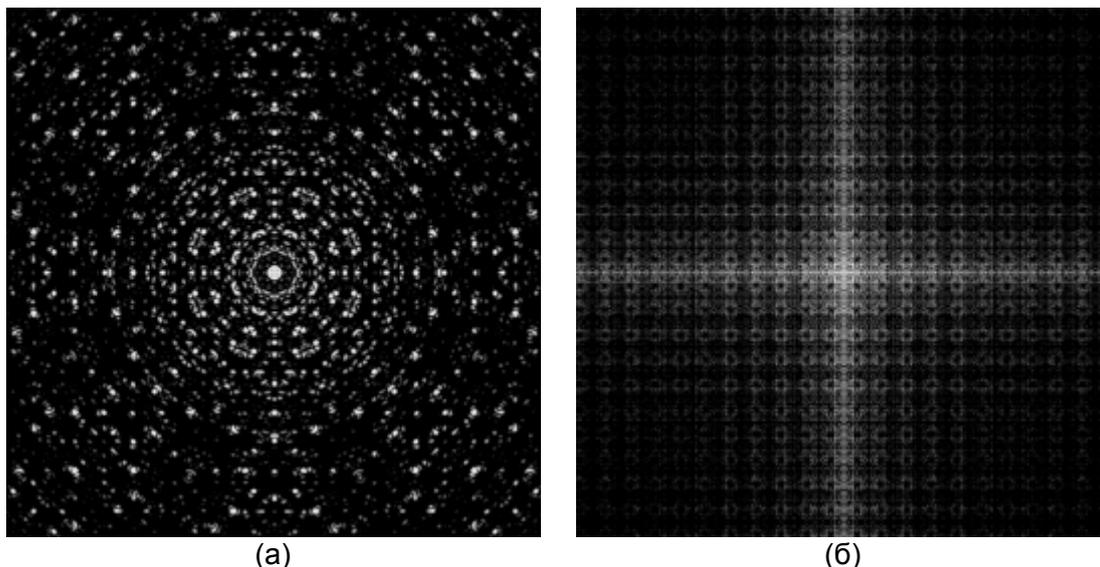


Рис. 2. Распределения интенсивности в ДК от третьего поколения фрактала, построенного из колец в 8 направлениях (а) и ковра Серпинского 5 поколения (б)

Проявление модуляции интенсивности в виде полос Юнга удобно проследить, последовательно добавляя элементы в рассчитываемую структуру (рис. 3). Дифракционная картина от двух колец (рис. 3а) представляет собой дифракционную картину от окружности, промодулированную полосами Юнга в соответствии со свойством интерференции Фурье-спектра. Полосы Юнга ориентированы перпендикулярно линии, соединяющей центры окружностей.

Добавим еще два кольца. Такой элемент можно рассматривать как две пары колец, смещенных друг относительно друга в направлении, перпендикулярном линии, соединяющей центры окружностей (рис. 3б). Таким образом, в структуре ДК возникает еще одна система полос Юнга, перпендикулярная уже существующей, с тем же периодом. Две системы полос с равными периодами, наклоненные на углы $+45^\circ$ и -45° к вертикали, создают сетку, ячейками которой являются квадраты.

Добавление к получившейся еще одной окружности того же размера, помещенной в центре, приводит к появлению еще одной сетки, образованной двумя системами полос Юнга, ориентированными горизонтально и вертикально. Эти системы полос возникают вследствие взаимодействия окружностей, смещенных от центра узора, с центральной окружностью. В каждом из направлений (в вертикальном и горизонтальном) полосы возникают в результате интерференции излучения, отклоненного при дифракции на трех кольцах, т. е. наблюдается многолучевая интерференция.

Последним этапом построения узора первого поколения с 4 направлениями является добавление окружности с удвоенным радиусом, помещенной в центре узора (рис. 3в). При этом в структуре ДК появляется модуляция интенсивности колец в результате интерференции световых полей, дифрагированных кольцами разного диаметра.

При переходе ко второму и третьему уровням построения все изменения структуры узора сводятся к тому, что увеличивается количество взаимодействующих элементов в каждом направлении. Новых направлений и новых пар взаимодействующих элементов не появляется. Периоды (минимальные расстояния между взаимодействующими одинаковыми элементами) не изменяются, поэтому и периоды модуляции ДК остаются прежними. Однако структура ДК становится более тонкой, выделяются практически точечные (малого размера) максимумы интенсивности на фоне узора из большого количества вторичных максимумов интенсивности. Причем при переходе от первого ко второму и от второго к третьему этапу построения узора главные максимумы интенсивности обостряются, число побочных максимумов возрастает, интенсивность побоч-

ных максимумов уменьшается. В итоге, на третьем этапе построения, ДК от всего узора представляет собой фактически набор изолированных точек.

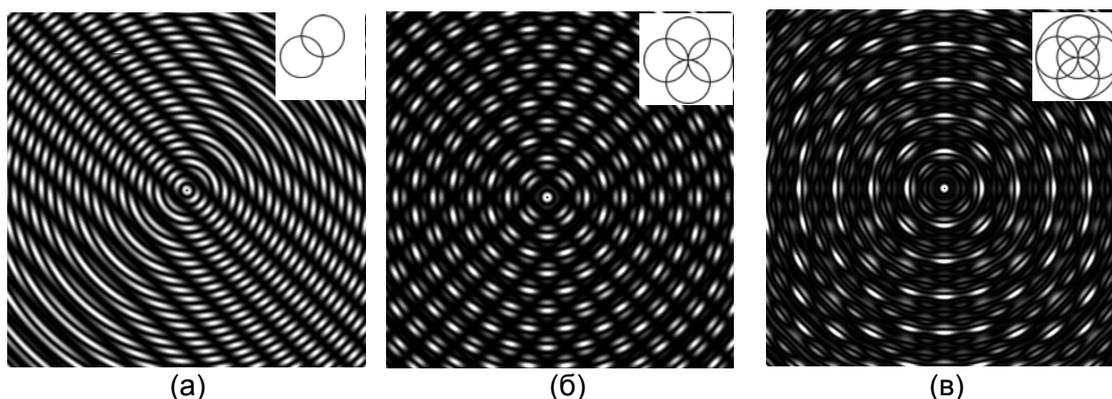


Рис. 3. Последовательное формирование структуры ДК: (а) от двух колец; (б) от четырех колец; (в) от первого поколения предфрактала

Исходя из способа построения узоров и рассмотрения механизмов формирования структуры ДК, очевидно, что и дифракционная картина от ковра Серпинского определяется теми же явлениями.

Оценка фрактальной размерности узоров и их ДК

Размерность Хаусдорфа-Безиковича является важной характеристикой фрактальных структур. Она служит показателем заполнения пространства структурой и, в отличие от топологической размерности, она может принимать дробные значения [1, 2]. Существуют различные определения размерностей, значения которых совпадают с размерностью Хаусдорфа-Безиковича для самоподобных фракталов. К ним относятся размерность подобия, кубическая размерность, информационная размерность и другие, описанные в [3, 18].

Выбор метода оценки фрактальной размерности объекта определяется, прежде всего, характером объекта.

Фрактальная размерность узоров

Изображения узоров дифракционных элементов являются битовыми, состоящими из отдельных линий. Для таких объектов можно ожидать, что фрактальная размерность должна принимать значения в интервале [1; 2). Наиболее распространенным подходом для определения фрактальной размерности объектов такого рода является подсчет сеточной размерности [19]. Кроме того, этот метод является достаточно простым в реализации.

Изображение разбивается сеткой на 4, 16, 64, ..., $2m$ прямоугольников. При каждом разбиении подсчитывается количество прямоугольников, внутри которых оказался хотя бы один «черный» пиксель, принадлежащий изображению узора. После этого строится график зависимости числа ячеек, содержащих «черные» пиксели от длины стороны ячейки (от шага разбиения). График строится в двойном логарифмическом масштабе.

Точки графика аппроксимируются прямой, имеющей некий угол наклона к оси абсцисс. Зная тангенс угла наклона прямой, значение фрактальной размерности можно определить по формуле $D=1+tg(\alpha)$. Полученное таким способом значение фрактальной размерности ковра Серпинского $D=1,88$ и хорошо совпадает со значением размерности подобия для этого узора $D_n=1,89$. Полученные значения для узоров, построенных по первой схеме, приведены в табл. 2.

При переходе от узора с 4 направлениями к узору с 8 направлениями и, далее, к узору с 16 направлениями, дробная часть фрактальной размерности увеличивается приблизительно на одинаковые значения $\Delta D \sim 0,3$.

С увеличением количества направлений в узоре рост фрактальной размерности замедляется. Если при переходе от 4 направлений к 8 дробная часть фрактальной размерности увеличивается приблизительно в два раза, то при переходе от 8 направлений к 16 дробная часть размерности увеличивается уже только приблизительно в 1,5 раза. При дальнейшем росте числа направлений фрактальная размерность, очевидно, должна стремиться к 2,0.

Размерность дифракционных картин

Дифракционный спектр представляется в виде полутонового изображения. В трехмерном пространстве профилю интенсивности соответствует некая поверхность. Для объектов такого типа можно ожидать фрактальную размерность, находящуюся в интервале [2; 3).

Методы определения фрактальной размерности объектов такого типа разработаны менее хорошо, чем методы определения размерности плоских объектов [16, 19].

В основном, эти методы сводятся к отображению поверхности на плоскость и определению фрактальной размерности результата этого отображения, обычно – методом сеточной размерности. Понятно, что в этом случае полученная размерность d находится в интервале [1; 2). Затем, в соответствии с эмпирическим правилом Мандельброта [1], фрактальная размерность поверхности определяется из соотношения $D = d + 1$.

Недостатком таких методов является зависимость результата измерения от способа отображения поверхности на плоскость. Лишен указанного недостатка метод непосредственного определения фрактальной размерности поверхности, предложенный в [16]. Этот метод называется Projective Covering Method (PCM). Он заключается в подсчете площади фрактальной поверхности путем аппроксимации поверхности совокупностью плоских фигур при изменении масштабов этих фигур.

Были произведены измерения фрактальной размерности дифракционных картин от узоров, построенных по первой схеме, с 4 и 8 направлениями каждым из описанных методов. Результаты приведены в табл. 1.

В среднем оценки, сделанные по разным методам, дают приблизительно одинаковый результат. Разброс не превышает 9 % от среднего значения.

Значение фрактальной размерности, наиболее близкое к среднему, дает метод PCM, поэтому именно он был использован для оценки фрактальной размерности ДК от различных элементов.

	Метод оценки	Количество направлений		Примечания
		4	8	
1	Сеточный	2,62	2,27	Подсчет количества ячеек, содержащих узор [20]
2	Сеточный	2,59	2,32	Подсчет количества ячеек, средняя интенсивность внутри которых $\geq 0,1$ [21]
3	Сеточный	2,27	2,11	Фрактальная размерность изолинии по уровню 0,1 [22]
4	PCM	2,50	2,26	Projective covering method [16]
	Среднее	2,495	2,24	

Таблица 1. Методы оценки фрактальной размерности ДК

Величины фрактальной размерности узоров дифракционных элементов дифракционных картин от них приведены в табл. 2.

Количество направлений в узоре	Фрактальная размерность	
	узора	ДК
2	1,24	2,82
4	1,33	2,50
8	1,64	2,26
16	1,92	2,15
Ковер Серпинского	1,88	2,13

Таблица 2. Фрактальная размерность узоров и ДК от них

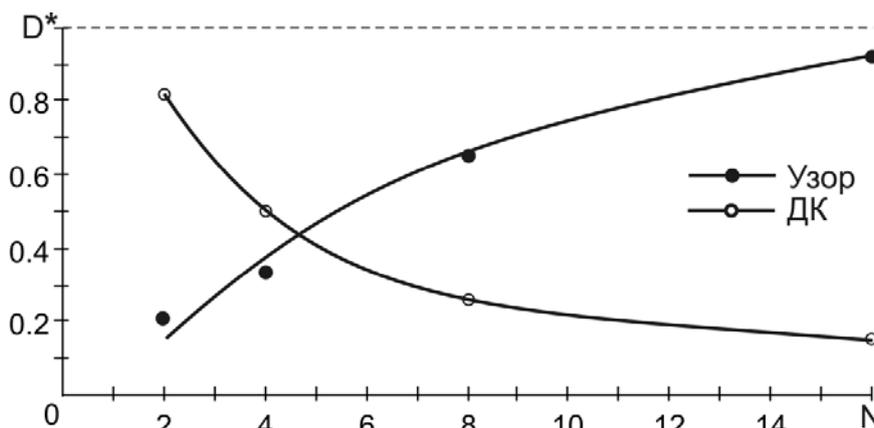


Рис. 4. Зависимость дробной части фрактальной размерности узоров от числа направлений

Отметим, что непосредственно фрактальные свойства объекта характеризует дробная часть (после запятой) фрактальной размерности. Целая часть соответствует топологической размерности объекта, на основе которого строится фрактал: 1 – для линии, 2 – для поверхности. В связи с этим на рис. 4 приведены графики зависимостей дробных частей размерности D^* от количества направлений в узоре.

Из графика видно, что дробная часть фрактальной размерности дифракционной картины падает с ростом фрактальной размерности узора дифракционного элемента. Кроме того, с увеличением количества направлений в узоре скорость роста дробной части фрактальной размерности узора уменьшается, как и скорость падения дробной части размерности ДК. При дальнейшем увеличении количества направлений в узоре фрактальная размерность узора, так же, как и фрактальная размерность ДК от такого узора, стремятся к одному значению – к 2, при этом фрактальность узора растет, а ДК – падает. При этом сумма дробных значений размерностей узоров и ДК близка к 1 как для фракталов, построенных из пересекающихся узоров, так и для ковра Серпинского.

Заключение

В работе исследованы дифракционные спектры двух видов фракталов: ковра Серпинского и фракталов, построенных из пересекающихся окружностей. Описан аналитический метод расчета дифракционных картин. Расчет производится поэтапно, в соответствии со схемой построения узора. Это позволяет выявлять основные закономерности и механизмы формирования структуры дифракционных спектров.

В качестве параметра, характеризующего как фрактальные узоры, так и ДК от них, использована величина фрактальной размерности. Для определения фрактальной размерности узоров использован сеточный метод. Проведено сравнение различных ме-

тодов оценки фрактальной размерности объектов с ожидаемой размерностью в пределах (2; 3).

Рассмотрена взаимосвязь фрактальной размерности узора и дифракционной картины от него. Важным результатом является установление следующей закономерности: фрактальная размерность ДК тем меньше, чем больше фрактальная размерность узора, на котором происходит дифракция, причем их сумма близка к 1 для всех видов рассматриваемых узоров.

Литература

1. Мандельброт Б. Фрактальная геометрия природы: Пер. с англ. М.: Институт компьютерных исследований, 2002.
2. Федер Е. Фракталы: Пер. с англ. М.: Мир, 1991.
3. Морозов А.Д. Введение в теорию фракталов: Уч. пособие. Н. Новгород: Издательство Нижегородского государственного университета, 1999.
4. Berry M. Fractal modes of unstable lasers with polygonal and circular mirrors. // *Optics Communications*. 2001. V. 200. №1–6. P. 321–330.
5. Berry M., Storm C., Saarloos W. Theory of unstable laser modes: edge waves and fractality. // *Optics Communications*. 2001. V. 197. №4–6. P. 393–402.
6. New G.H.C., Yates M.A., Woerdman J.P., McDonald G.S. Diffractive origin of fractal resonator modes. // *Optics Communications*. 2001. V. 193. P. 261–266.
7. Yates M.A., New G.H.C. Fractal dimension of unstable resonator modes. // *Optics Communications*. 2002. V. 208. P. 377–380.
8. Megademini T., Pardo B., Jullien R. Fourier transform and theory of fractal multilayer mirrors. // *Optics Communications*. 1991. V. 80. №5–6. P. 312–316.
9. Ангельский О.В., Ушенко А.Г., Архелюк А.Д., Ермоленко С.Б., Бурковец Д.Н. О структуре матриц преобразования лазерного излучения биофракталами. // *Квантовая электроника*. 1999. Т. 29. №3. С. 235–238.
10. Ушенко А.Г. Лазерная диагностика биофракталов // *Квантовая электроника*, 1999, т. 29, №3, с. 239–245.
11. Lehman M. Fractal diffraction gratings built through rectangular domains. // *Optics Communications*, 2001. V. 195. №1–4. P. 11–26.
12. Lehman M. Superposition of Cantor gratings II: Fractality of the moiré profiles. // *Optik – International Journal for Light and Electron Optics*. 2005. V. 116. №6. P. 281–287.
13. Lehman M. Superposition of planar Cantor gratings and directional self-similarity I: General considerations. // *Optik – International Journal for Light and Electron Optics*. 2002. V. 113. №1. P. 13–24.
14. Lehman M., Patrignani D., Pasquale L., Pombo J. Properties of in-order self-similarity function in the Fresnel region for the Sierpinski carpet grating. // *Proc. SPIE*. 1997. V. 3159. P. 261–268.
15. Velez C., Lehman M., Garavaglia M. Two-dimensional fractal gratings with variable structure and their diffraction // *Optik – International Journal for Light and Electron Optics*. 2001. V. 112. №5. P. 209–217.
16. Xie H., Wang J. Direct fractal measurement of fracture surfaces // *International Journal of Solids and Structures*. 1999. V. 36. №20. P. 3073–3084.
17. Гудмэн Дж. Введение в Фурье-оптику. М.: Мир, 1970.
18. Falconer K. *Fractal Geometry – Mathematical Foundations and Applications*. J. Wiley&Sons: N. Y., 2003.
19. География и мониторинг биоразнообразия / Колл. авторов. М.: Издательство Научного и учебно-методического центра, 2002.

20. Учаев А.Я., Пунин В.Т., Завада Н.И. О количественных характеристиках процесса динамического разрушения металлов, диэлектриков, взрывчатых веществ // Труды VI Забабахинских научных чтений: сб. науч. тр. Снежинск, 2001.
21. Александров В.В., Уставников Д.А., Коровкин Н.В. Действие магнитного поля на поведение и двигательную активность гидробионтов. / Труды IV Международного симпозиума по электромагнитной совместимости и электромагнитной экологии ЭМС: сб. науч. тр. СПб, 2001.
22. Коровкин Н.В., Кочетов С.В., Селина Е.Е. Фрактальный подход к регистрации слабого влияния низкочастотных электромагнитных полей на развитие мхов. / Труды IV Международного симпозиума по электромагнитной совместимости и электромагнитной экологии ЭМС: сб. науч. тр. СПб, 2001.

УРАВНЕНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ДЛЯ ВСПУЧИВАЮЩЕГОСЯ МАТЕРИАЛА В МНОГОСЛОЙНОЙ ТЕПЛОВОЙ ЗАЩИТЕ

В.Ю. Сушко

Научный руководитель – к.т.н., с.н.с., В.А. Кораблев

В статье предложено уравнение теплопроводности для вспучивающегося материала, учитывающее изменение его плотности, выделение или поглощение теплоты при вспучивании, а также его разрушение. Предложенное уравнение проверено экспериментально применительно к многослойной тепловой защите со вспучивающимся материалом.

Введение

Огнезащитные вспучивающиеся материалы (ОВМ) применяются для защиты от пожара в различных областях техники: на летательных аппаратах, кораблях, подводных лодках, автомобилях, морских нефтяных платформах, в строительстве [1]. Обычно такие материалы наносятся на защищаемую поверхность в виде покрытия, краски, эмали или шпаклевки. Толщина наносимого слоя не превышает нескольких миллиметров, что практически не увеличивает размеров защищаемой конструкции.

При пожаре или воздействии высокой температуры ОВМ увеличивается в объеме в несколько десятков раз. Этот процесс обычно называют вспучиванием. В результате образуется слой с низкой теплопроводностью, который препятствует распространению теплового потока. ОВМ является многокомпонентной системой. Процесс вспучивания осуществляется посредством происходящих в специально подобранных компонентах химических превращений и фазовых переходов в определенном диапазоне температур [2].

Математические модели, позволяющие находить температуры вспучивающихся покрытий в процессе их нагрева, приведены в [3–4]. Модели разрабатывались для расчета температурных полей в огнезащитных покрытиях строительных конструкций, где необходимо, как правило, находить температурные поля в двухслойной системе: защищаемый материал – вспучивающееся покрытие. Модели учитывают множество процессов: изменение объема, выделение и поглощение теплоты при вспучивании, разрушение материала. В результате математическая модель только для слоя вспучивающегося покрытия включает несколько нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных. Для численного решения задачи приходится разрабатывать специальные компьютерные программы, использующие сложные алгоритмы решения [5].

Однако при защите электронных приборов, например, бортовых накопителей информации, от аварийного воздействия пожара, ОВМ применяется в составе многослойной защиты, каждый из слоев которой реализует тот или иной метод тепловой защиты [6], что повышает ее общую эффективность. В некоторых из таких слоев происходит эндотермическое превращение материала.

При расчете температурных полей в ОВМ в многослойной тепловой защите приходится учитывать влияние соседних слоев. Это приводит к увеличению числа дифференциальных уравнений, входящих в математическую модель. Цель данной работы заключалась в разработке такой модели для ОВМ, которая, с одной стороны учитывала бы все основные тепловые процессы в нем, а с другой стороны, допускала бы численную реализацию при помощи стандартных программ для расчета температурных полей в тепловой защите.

Вывод уравнения теплопроводности для вспучивающегося материала

ОВМ является твердым телом, но при вспучивании происходит многократное увеличение его объема, которое сопровождается перемещением вещества под действием изменения плотности. При перемещении разрыва слоя покрытия обычно не происходит, поэтому для него справедливы уравнения механики сплошных сред: уравнение неразрывности [7]

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} = -\operatorname{div}(\rho \vec{v}) \quad (1)$$

и уравнение энергии [7]

$$\operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad}(t)) - \operatorname{div}(c_p \rho t \vec{v}) + W = c_p \rho \frac{\partial t}{\partial \tau}. \quad (2)$$

Здесь t – температура ОВМ, $\rho(t)$ – его плотность, τ – время, \vec{v} – скорость движения вспучивающейся массы, $\lambda(t)$ – коэффициент теплопроводности, $c_p(t)$ – удельная теплоемкость, $W(t)$ – объемная плотность мощности, выделяющаяся или поглощающаяся в материале.

Обычно вспучивание ОВМ происходит лишь в одном направлении – от защищаемой поверхности. Поэтому возможно расположить координатную ось в выбранной системе координат так, чтобы вспучивание материала происходило вдоль нее. Также полагается, что граница защищаемой поверхности является неподвижной. Для примера рассматривается случай, когда материал вспучивается вдоль оси x в декартовой системе координат (x, y, z) . Тогда, если обозначить $|\vec{v}| = v$, то проекции вектора скорости на координатные оси равны

$$v_x = v, \quad v_y = v_z = 0. \quad (3)$$

После подстановки выражений для градиента и дивергенции в декартовой системе координат в уравнение (1) и (2) с учетом (3) получается уравнение теплопроводности для ОВМ:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial t}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial t}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial t}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(c_p t \frac{\partial}{\partial \tau} \int_{x_{\text{фикс}}}^x \rho dx \right) + W = c_p \rho \frac{\partial t}{\partial \tau}, \quad (4)$$

где $x_{\text{фикс}}$ – координата неподвижной границы слоя ОВМ. Уравнение (4) является интегро-дифференциальным. При решении таких уравнений обычно переходят к координатам Лагранжа [7, 8]. Веществу, находящемуся в момент времени τ в точке с координатой (x, y, z) , сопоставляется его начальное положение (ξ, y, z) , где координаты y и z остаются неизменными, так как вспучивание происходит только вдоль оси x .

Поскольку выбор начала координатной оси ξ в принципе произволен, то для удобства дальнейшего численного решения полагается, что $\xi_{\text{фикс}} = x_{\text{фикс}}$. Тогда переход к координатам Лагранжа, следующий из закона сохранения массы, имеет вид

$$\xi = x_{\text{фикс}} + \int_{x_{\text{фикс}}}^x \frac{\rho}{\rho_0} dx, \quad (5)$$

где ρ_0 – плотность невспученного слоя. После подстановки (5) в (4) в предположении, что градиент температур вдоль осей y и z мал, получается уравнение теплопроводности для ОВМ в координатах Лагранжа

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\lambda_{\text{эфф}x} \frac{\partial t}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda_{\text{эфф}y} \frac{\partial t}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda_{\text{эфф}z} \frac{\partial t}{\partial z} \right) + W_0 = c_p \rho_0 \frac{\partial t}{\partial \tau}, \quad (6)$$

где эффективные теплопроводности в направлении каждой из осей имеют вид

$$\lambda_{эффх} = \lambda \frac{\rho}{\rho_0}, \quad \lambda_{эффу} = \lambda \frac{\rho_0}{\rho}, \quad \lambda_{эффz} = \lambda \frac{\rho_0}{\rho}. \quad (7)$$

Уравнение (6) имеет тот же вид, что уравнение теплопроводности для анизотропного тела со свойствами, зависящими от температуры. Только оно записано в координатах Лагранжа, и коэффициенты этого уравнения имеют другие значения. Плотность считается постоянной и равной плотности до вспучивания. Коэффициент теплопроводности по оси, вдоль которой происходит вспучивание, уменьшается пропорционально уменьшению плотности, а коэффициенты вдоль остальных осей соответственно увеличиваются.

Аналогично показывается, что это утверждение верно и для вспучивания по радиусу в цилиндрической или сферической системе координат, если внутренний радиус вспучивающегося слоя $r_{фикс}$ в несколько раз больше толщины этого слоя.

В уравнении (6) тепловые эффекты в процессе расширения покрытия учитываются в величине $W_0 = \frac{W\rho_0}{\rho(t)}$.

Если удельная теплота вспучивания $L_{вс}$ поглощается равномерно в интервале температур $(t_{нвс}, t_{квс})$, то

$$W_0 = \begin{cases} 0, & t < t_{нвс} \\ \frac{L_{вс}\rho_0}{t_{квс} - t_{нвс}} \frac{\partial t}{\partial \tau}, & t_{нвс} \leq t \leq t_{квс} \\ 0, & t > t_{квс} \end{cases}. \quad (8)$$

Однако, в зависимости от характера вспучивания материала, выражение для W_0 может включать несколько участков с различными теплотами вспучивания, других фазовых переходов или химических превращений. При решении уравнение (6) удобнее записывать не через температуру, а через энтальпию, в которую включается значение W_0 , что позволяет получить уравнение в более простом виде, используя так называемый энтальпийный подход [9].

В уравнении (6) желательно учесть разрушение ОБМ при дальнейшем повышении температуры. В [9] задача разрушения твердого материала на его внешней границе рассматривается как однофазная задача Стефана, т.е. температура газа, полученного в результате разрушения материала, тождественна температуре среды. В этом случае предполагается, что теплопроводность разрушенного слоя материала велика, а удельная теплоемкость стремится к нулю.

Таким образом, теплота разрушения материала включается в величину W_0 , а удельная теплоемкость и теплопроводность модифицируются с учетом того, что его разрушение происходит постепенно в некотором диапазоне температур, и с учетом перехода к координатам Лагранжа.

Преимущество предложенного уравнения для ОБМ над моделями [3, 4] состоит в простоте его численного решения, которое не требует написания специальных программ. В то же время уравнение (6) учитывает как изменение объема слоя и выделения теплоты при этом, так и разрушение материала.

Результаты экспериментов и расчетов

Предложенное уравнение для ОБМ включается в общую тепловую модель многослойной тепловой защиты с соответствующими начальными и граничными условиями.

При этом расчет температур ОВМ проводится в координатах Лагранжа, а для остальных слоев – в координатах Эйлера. Последнее возможно вследствие того, что в уравнении теплопроводности для ОВМ и в граничных условиях координата Лагранжа входит только как переменная, по которой производится дифференцирование. В таких случаях на результат решения уравнения не влияет формальная замена ξ на x , хотя физический смысл такой координаты меняется. Более того, сделанное ранее предположение, что $x_{фикс} = \xi_{фикс}$, позволяет рассматривать координату слоев покрытия как непрерывную величину, что удобно для численного решения.

В качестве примера была рассмотрена многослойная тепловая защита в виде стального цилиндра высотой 82 мм и диаметром 58 мм, покрытого огнезащитным вспучивающимся покрытием СГК-1 толщиной 3–3,5 мм. Внутри защиты находился теплоизоляционный материал, окружающий пространство, заполненное воздухом. Расчет проводился в программе ANSYS, позволяющей моделировать сложную геометрию модели и задавать свойства материалов, зависящие от температуры. Рассчитывалась температура на внутренней поверхности тепловой защиты при помещении ее в воздушную среду с температурой 1100 °С, что соответствует пожару при горении авиационного топлива. Для расчета использовалось уравнение в цилиндрической системе координат. Покрытие на торцах цилиндра вспучивалось вдоль его оси, на боковых поверхностях – по радиусу.

Необходимые для расчета свойства покрытия СГК-1 брались по данным работ [4, 10]. Расчеты проводились как с учетом, так и без учета разрушения покрытия. Результаты расчетов температуры внутренней поверхности тепловой защиты приведены на рисунке. Там же приведены результаты экспериментального исследования многослойной тепловой защиты. В экспериментах образец со вспучивающимся покрытием, выдержанный при температуре 28 °С, помещался в муфельную печь, температура которой поддерживалась близкой к 1100 °С.

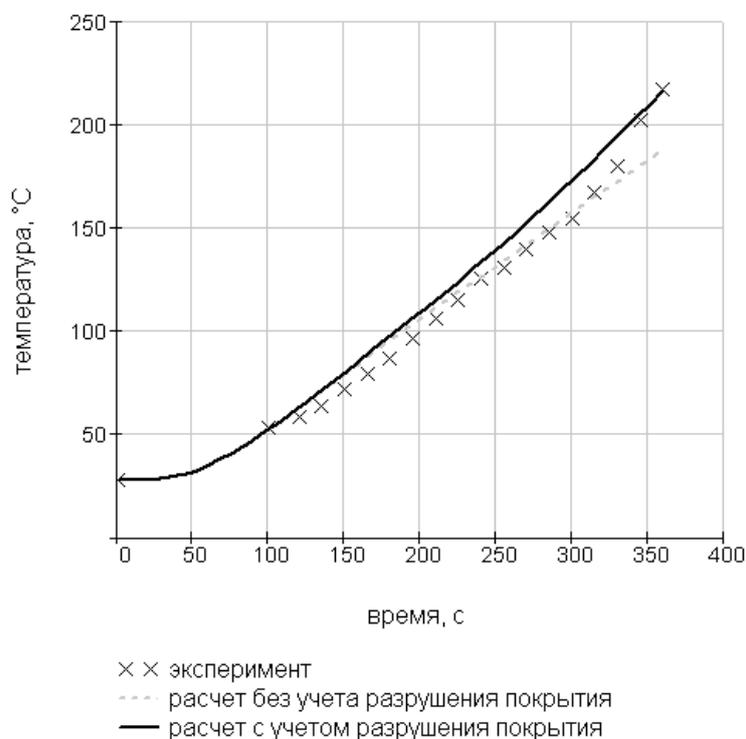


Рис. Сравнение результатов эксперимента и расчета с учетом и без учета разрушения покрытия

Из рисунка видно, что в течение первых пяти минут с начала воздействия результаты эксперимента хорошо совпадают с результатами расчета, даже если при расчетах

разрушение покрытия не учитывается. Но затем результаты расчетов по модели, не учитывающей разрушение, расходятся с экспериментом. В целом расхождение результатов, возможно, вызвано тем, что некоторые свойства покрытия заданы приближенно из-за недостатка информации о них. В силу этого даже модель, не учитывающую разрушение покрытия, следует признать удовлетворительной, если рассматривается участок разогрева до начала его разрушения.

Заключение

Приведенное в статье уравнение теплопроводности для ОВМ учитывает основные физические процессы, протекающие в таких материалах. В отличие от ранее известных моделей, данное уравнение является относительно простым. В результате оно допускает численное решение без написания специальных программ, а также решение совместно с другими слоями тепловой защиты. Последнее свойство особенно важно при расчетах, необходимых для выбора соответствующей требованиям стандартов тепловой защиты бортовых накопителей информации. Для решения применим любой доступный пакет программ, позволяющий решать уравнение теплопроводности для анизотропного тела, коэффициент теплопроводности и удельная теплоемкость или энтальпия которого зависят от температуры.

Литература

1. Bennet G. Examining the feasibility of extinguishing engine nacelle fires by strategic placement of intumescent materials // Proceedings of Halon Options Technical Working Conference. Albuquerque. 2001. P. 31–40.
2. Машляковский Л. Н. Органические покрытия пониженной горючести. / Л. Н. Машляковский, А. Д. Лыков, В. Ю. Репкин. Л.: Химия, 1989. 184 с.
3. Решетников И.С., Антонов А.В., Халтуринский Н.А. Математическое описание горения вспучивающихся полимерных систем // Физика горения и взрыва, 1997. Т. 33. № 6. С. 48–67.
4. Страхов В.Л., Крутов А.М., Давыдкин Н.Ф. Огнезащита строительных конструкций / под ред. Ю. А. Кошмарова. М.: Информационно-издательский центр «ТИМР», 2000. 433 с.
5. Страхов В.Л., Гаращенко А.Н., Кузнецов Г.В., Рудзинский В.П. Тепломассообмен в тепло- и огнезащите с учетом процессов термического разложения, испарения-конденсации, уноса массы и вспучивания-усадки. // Математическое моделирование, 2000. Т. 12. № 5. С. 107–113.
6. Попов Ю.В. Комплексная защита зарегистрированной информации в бортовых устройствах регистрации. Средства защиты информации от теплового воздействия пожара. // Проблемы безопасности полетов, 1995. Вып. 12. С. 28–36.
7. Валландер С.В. Лекции по гидроаэромеханике. Учеб. пособие. Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1978. 256 с.
8. Христианович С.А., Михлин С.Г., Девисон Б.Б. Некоторые новые вопросы механики сплошной среды: Неустановившееся движение в каналах и реках. Математическая теория пластичности. Движение грунтовых вод / под. ред. Н.Е. Кочина. М.; Л.: Изд-во АН СССР, 1938. 407 с.
9. Мейрманов А.М. Задача Стефана. Новосибирск: Наука. Сиб. Отделение, 1986. 238 с.
10. Зверев В.Г., Назаренко В.А., Цимбалюк А.Ф. Теплоогнезащита конструкций на основе применения вспениваемых покрытий. // Материалы V Минского международного форума по тепло- и массопереносу. Минск. 2004.

СИСТЕМА РЕГУЛИРОВАНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ В СУШИЛЬНЫХ КАМЕРАХ

Д.С. Макаров

Научный руководитель – к.т.н., с.н.с. В.А. Кораблев

Рассматривается система регулирования температуры сушильной камеры, обеспечивающая минимальный перепад температур по ее объему, и результаты экспериментальных исследований процессов конвективного теплообмена в камере.

Введение

Как известно, после окраски деталей требуется произвести их сушку. Процедура сушки подразумевает выдержку окрашенных объектов при определенной температуре в течение заданного времени, и эти параметры обычно определяются производителями красок. При нарушении этих условий не обеспечивается высокое качество покрытий.

Как правило, сушильные камеры довольно велики по размерам, что приводит к появлению неизбежного перепада температур по высоте камеры вследствие естественной конвекции в воздухе. Этот перепад может составлять единицы, десятки и даже сотни градусов в зависимости от размера камеры и абсолютной величины среднеобъемной температуры воздуха в камере, следовательно, необходим контроль этого перепада и поддержание его в некоторых допустимых пределах.

Обычно минимизация перепадов температуры достигается путем интенсивного перемешивания воздуха в камере, однако это приводит к оседанию пыли на окрашиваемых поверхностях объектов и сдуванию краски с деталей или ее оплыванию, а также может оказывать негативное влияние на регулирование среднеобъемной температуры за счет изменения температуры воздуха в области установки измерительного датчика.

Целью разработки системы регулирования температуры является поддержание среднеобъемной температуры и перепада температур по высоте камеры в допустимых пределах при минимизации негативного влияния работающего вентилятора путем отдельного регулирования температуры воздуха и градиента температуры по высоте камеры.

Регулятор температуры

Схема регулятора температуры приведена на рис. 1. В камере 1 установлен электрический нагреватель 2, вентилятор 7, датчик температуры воздуха 3 и дифференциальная термопара 4. Регулятор 5 поддерживает заданную среднеобъемную температуру по сигналам датчика 3 при помощи нагревателя 2, а регулятор 6 предназначен для устранения перепада температур, измеряемого датчиком 4 при помощи вентилятора 7. Регулятор 5 реализует пропорциональный, а регулятор 6 – двухпозиционный закон регулирования [1].

При перемешивании воздуха происходит изменение поля температур, т.е. изменение температур локальных областей. При этом существует область, температура которой остается практически неизменной. Разместив в этой области датчик регулятора температуры воздуха 3, возможно минимизировать влияние, оказываемое работающим вентилятором.

В литературных источниках [2, 3] приводится теоретический расчет распределения температуры воздуха по высоте в вертикальных полостях при естественной конвекции, однако не приводятся практические рекомендации по месту установки датчика, поэтому необходимо проведение экспериментальных исследований. Следует отметить, что проведение эксперимента целесообразно проводить для камер различной конфигурации, так как распределение температур может существенно отличаться от расчетного.

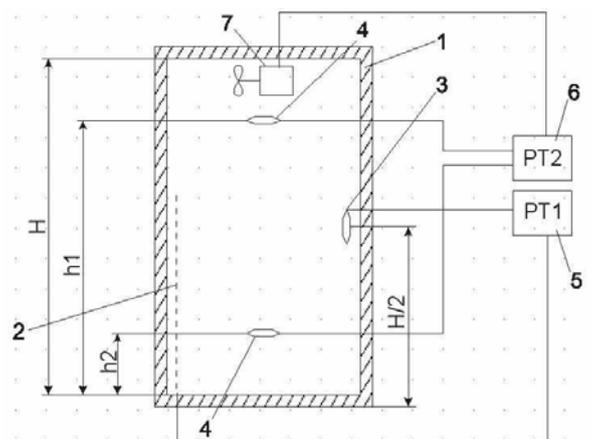


Рис. 1. Система регулирования температуры в камере

Описание эксперимента

Целью эксперимента было изучение распределения температуры воздуха по высоте камеры при естественной конвекции и при работающем вентиляторе в центре и вблизи стенок камеры. Экспериментальная установка состоит из вертикальной опоры с низкой теплопроводностью, на которой на определенном расстоянии друг от друга установлены датчики температуры, а также многоканальной измерительной системы, подключенной к ПЭВМ. В качестве датчиков использовались термопары типа «медь-константан». Погрешность используемой измерительной системы составляет приблизительно 1 %.

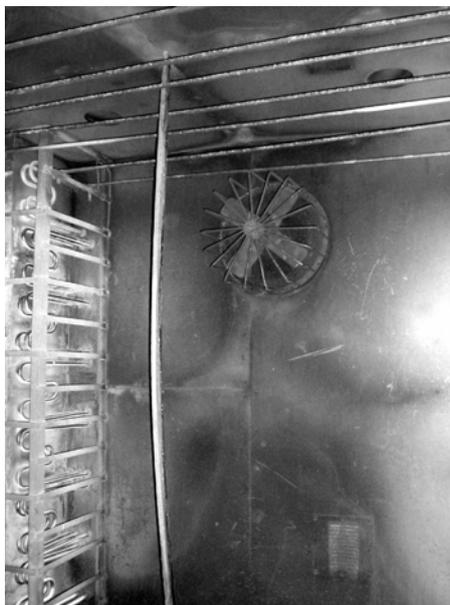


Рис. 2. Сушильная камера с установленными датчиками температуры

График на рис. 3 отображает результаты измерения распределения температуры воздуха по высоте в стационарном режиме при естественной конвекции (до 90-й секунды) и при включенном вентиляторе (после 90-й секунды). Как видно из приведенного графика, через 10 секунд после включения вентилятора поле температур перестает заметно изменяться, т.е. дальнейшая работа вентилятора нецелесообразна. Время, необходимое для восстановления исходного распределения, составляет несколько минут, что существенно больше длительности перемешивания.

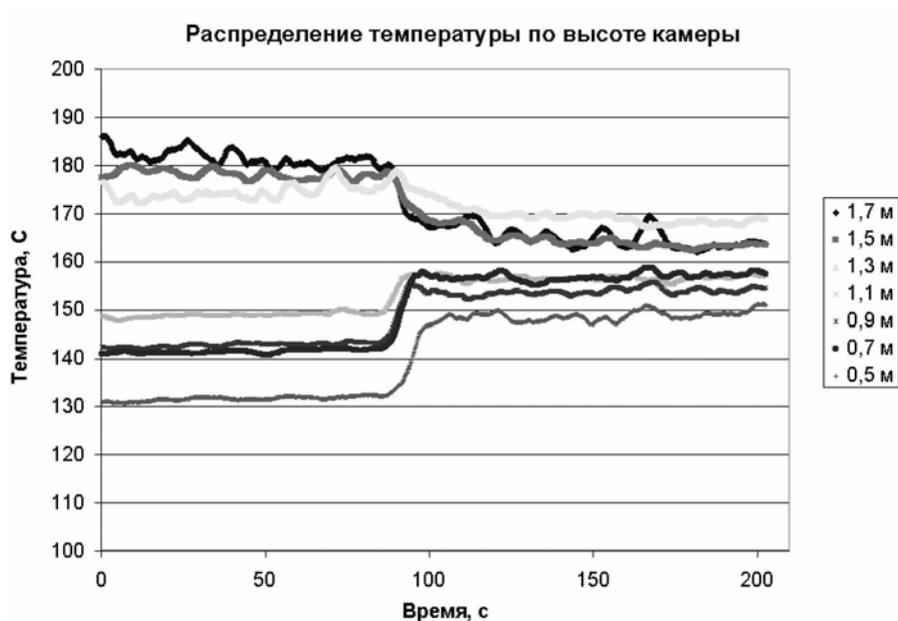


Рис. 3. Результаты эксперимента

Из приведенного графика можно сделать вывод, что температура в слое, расположенном на высоте от 1,1 м до 1,3 м, претерпевает минимальное изменение. На основании представленных данных был выполнен теоретический расчет среднеобъемной температуры камеры T_{cp} по формуле

$$T_{cp} = \int_0^H T(h)dh, \quad (1)$$

где $T(h)$ – зависимость температуры воздуха в камере от высоты. Расчетное значение T_{cp} приблизительно равно 164 °С, оно соответствует локальной температуре воздуха на высоте 1,1 м. Так как имеет место небольшое расхождение расчета и эксперимента, предпочтение отдается измерению, поэтому место размещения датчика температуры было выбрано на высоте 1,2 м.



Рис. 4. Регулятор температуры для сушильной камеры

На основании этих рекомендаций был разработан регулятор температуры, состоящий из 2-х независимых каналов регулирования средней температуры воздуха в камере и перепадов температур по высоте. При испытаниях было установлено, что работа вентилятора практически не сказывается на работе канала регулирования средней температуры. Общий вид регулятора представлен на рис. 4.

Заключение

На основе проведенных исследований разработано термостатирующее устройство, которое позволило автоматизировать процесс сушки окрашиваемых деталей, облегчить реализацию этого процесса, а также значительно улучшить качество окраски.

Литература

1. Мирошник И.В. Теория автоматического управления. Линейные системы. СПб: Питер, 2005. С. 201–209.
2. Шинкель, Линтхорст, Хогендорн (W. M. M. Schinkel, S. J. M. Linthorst, C. J. Hoogendoorn). Стратификация при свободной конвекции в вертикальных полостях // Тр. Американо-ва инж.-мех. Сер. С. Теплопередача, 1983. Т. 105. №2. С. 57–63.
3. Ostrach S., Natural Convection in Enclosures. // Advances in Heat Transfer. 1972. Vol. 8. P. 161–227.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЛИНЕЙНЫХ РАЗДЕЛЯЮЩИХ ФУНКЦИЙ В БИОМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ

А.И. Кальянова

Научный руководитель – д.т.н., профессор А.В. Демин

В статье рассмотрен алгоритм биометрической идентификации объектов. Предложен алгоритм формирования вектора биометрических параметров и метод его классификации на «свой» и «чужой», использующий линейные разделяющие функции.

Биометрическую аутентификацию пользователя компьютерной системы во многих случаях можно рассматривать как задачу классификации некоторого N -мерного вектора информативных биометрических параметров

$$V = \{v_1, v_2, \dots, v_j, \dots, v_N\}, j = \overline{1, N}, \quad (1)$$

который содержит особенности биометрии данного пользователя.

Способ формирования вектора V и его характеристики определяются типом биометрических данных. Для динамических методов аутентификации личности по рукописному и клавиатурному почеркам компоненты вектора V можно формировать в результате вычисления линейных ортогональных функционалов Фурье, Уолша, Хаара по полной реализации вводимой пользователем парольной фразы [1]. Компоненты вектора V в общем случае обладают внутренней корреляцией. Если биометрическая система находится в режиме обучения, векторы параметров v поступают в блок правил обучения, который формирует биометрический эталон личности. В простейшем случае биометрический эталон может формироваться в виде двух векторов: вектора математических ожиданий контролируемых параметров – $m(v)$ и вектора дисперсий этих параметров $s(v)$.

В режиме аутентификации вектор контролируемых параметров v , полученный из предъявленного образа, сравнивается решающим правилом с биометрическим эталоном. Если предъявленный вектор оказывается близок к биометрическому эталону, принимается положительное аутентификационное решение. При значительных отличиях предъявленного вектора и его биометрического эталона осуществляется отказ в аутентификации. Если протокол аутентификации не слишком жесткий, то пользователю предоставляются дополнительные попытки повторной аутентификации [1].

Процедура аутентификации пользователя, т.е. классификации предъявляемого вектора V на «свой» – V_c или «чужой» – V_u , может быть реализована с применением решающего правила, использующего линейные разделяющие функции. Популярность этого класса решающих правил обусловлена пионерскими работами Маккалока и Питтсона, вышедшими в 1943–1947 годах, и активной поддержкой Винером этого научного направления. Позднее Розенблатт дал доказательство теоремы о возможности обучения перцептронов, осуществляющих деление многомерного пространства значений признаков некоторой гиперплоскостью. Перцептрон описывается следующими уравнениями:

$$\text{свой при } \left\{ \sum_{i=1}^n \mu_i \cdot v_i - C \right\} > 0, \quad (2)$$

$$\text{чужой при } \left\{ \sum_{i=1}^n \mu_i \cdot v_i - C \right\} > 0, \quad (3)$$

где μ_i – весовые коэффициенты, подбираемые при настройке перцептрона (при его обучении на примерах), C – смещающая гиперплоскость постоянная составляющая (подбирается при настройке) [2].

Перцептрон или искусственный нейрон может быть представлен как сумматор входных сигналов и некоторый нелинейный элемент (пороговый элемент – компаратор). Отклик сумматора (линейная часть перцептрона) может быть записан в обычной форме:

$$y = \left\{ \sum_{i=1}^n \mu_i \cdot v_i - C \right\}. \quad (4)$$

Аналогично отклик линейной части персептрона может быть записан в векторной форме:

$$y = \mu^T \cdot V - C, \quad (5)$$

где μ^T – вектор-строка из n коэффициентов весового суммирования, V – вектор-столбец из n измеренных биометрических параметров.

Удобнее всего рассматривать суть персептронов, реализующих линейные разделяющие правила, на их простейшем варианте с двумя входами. В этом случае задача синтеза оптимального решающего правила сводится к проведению на плоскости прямой, наилучшим образом разделяющей множества биометрических параметров «свой» и «чужой». Пример решения этой задачи приведен на рис. 1.

Рис. 1 иллюстрирует тот факт, что путем вращения и сдвига исходной системы координат иногда удается добиться полного разделения областей «свой» и «чужой», разместив их в разных четвертях новой системы координат. Следует подчеркнуть, что на рис. 1 изображена достаточно простая ситуация с одинаковыми корреляционными связями параметров областей «свой» и «чужой», последнее несколько упрощает задачу в силу параллельности главных осей эллипса «свой» и «чужой». Для ситуации равных корреляционных связей внутри вектора биометрических параметров,

$$r_{ij}^{\text{Свой}} = r_{ij}^{\text{Чужой}}, \quad (6)$$

поиск оптимального поворота системы координат совпадает с решением задачи декорреляции биометрических параметров. Фактически, для получения оптимального преобразования системы координат необходимо домножить вектор входных параметров на соответствующую декорреляционную матрицу D^{-1} , ослабляя, насколько это возможно, взаимное влияние биометрических параметров:

$$y = e^T \cdot D^{-1} \cdot V - C, \quad (7)$$

где e^T – вектор-строка единичных весовых коэффициентов.

Соотношение (7) эквивалентно получению весовых коэффициентов персептрона (нейрона) суммированием элементов декоррелирующей матрицы:

$$\mu_j = \sum_{i=1}^n d_{ij}, \quad (8)$$

где d_{ij} – элементы декоррелирующей матрицы D^{-1} , i – номер строки элемента матрицы, j – номер столбца соответствующего элемента матрицы D^{-1} .

Следует подчеркнуть, что основным достоинством процедуры вычисления весовых коэффициентов персептрона (нейрона) вида (8) является ее детерминированность. Детерминированность вычислительных процедур является весьма важным свойством для биометрических систем, так как эти системы должны гарантированно обучаться на нескольких предъявленных примерах, а поиск весовых коэффициентов должен быть осуществлен за достаточно малый интервал времени (от 5 до 60 секунд). Процедуры декорреляции, построенные на обращении матриц или их ортогональном разложении, имеют квадратичную сложность, в то время как другие известные алгоритмы, построенные на подборе параметров, имеют экспоненциальную сложность по отношению к числу входов нейрона [3].

В настоящее время известно более сотни алгоритмов стохастического итерационного подбора значений весовых коэффициентов, однако каждый из них следует применять в биометрии с определенной осторожностью. Применение итерационных методов случайного подбора весовых коэффициентов линейной части нейрона (персептрона), во-первых, может длиться неограниченное время (зацикливание), во-вторых, могут быть получены ошибочные значения коэффициентов, соответствующие одному из локаль-

ных минимумов функции настройки. Все это делает случайные методы настройки (подбора) нейровесов μ_j нежелательными в биометрических системах, так как они достаточно часто приводят систему в один из возможных тупиков настройки.

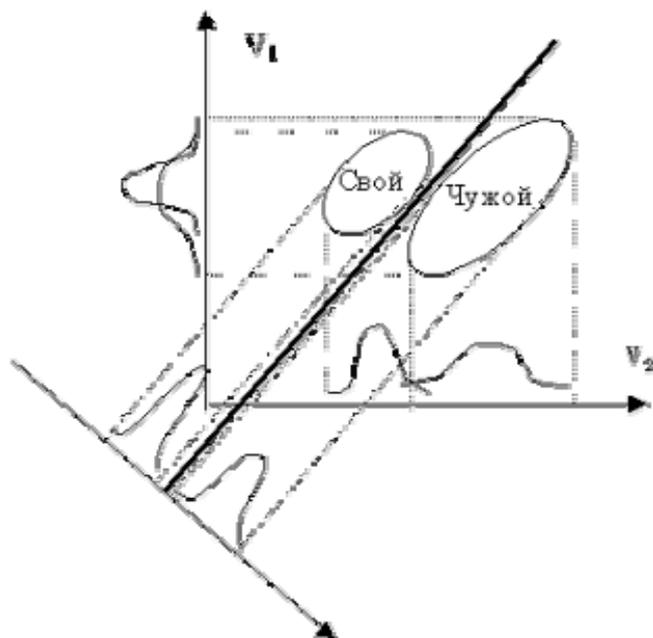


Рис. 1. Декоррелирующий поворот системы координат, позволяющий добиться линейной разделяемости множеств

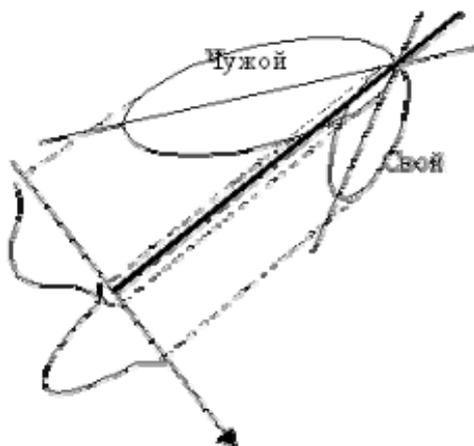


Рис. 2. Оптимальное декоррелирующее преобразование системы с учетом внутренних корреляций разделяемых множеств

Кроме того, различные методы случайного подбора (поиска) коэффициентов μ_j следует рассматривать лишь как способы некоторого сокращения времени полного перебора всех возможных комбинаций значений нейровесов. С этой точки зрения детерминированные процедуры вычисления нейровесов через синтез декоррелирующей матрицы и суммирование ее элементов всегда будут иметь максимально возможную скорость поиска решения.

Следует обратить особое внимание на то, что все проведенные выше рассуждения относятся к достаточно простой ситуации, когда область «свой» и область «чужой» имеют одинаковые коэффициенты внутренней корреляции между параметрами (главные оси эллипсов обеих областей параллельны (см. рис. 1). Эта простейшая ситуация

не приводит к неопределенности при синтезе матрицы декорреляции D^{-1} по исходным корреляционным матрицам $R^{свой}$ и $R^{чужой}$ в силу их полной тождественности.

Неопределенность возникает только в том случае, когда $R^{свой} \neq R^{чужой}$. В этом случае преобразование системы координат для устранения корреляционных связей биометрических параметров подлинного пользователя не может привести к аналогичному результату для других пользователей. Выход из этой неоднозначной ситуации состоит в усреднении корреляционных матриц областей «свой» и «чужой», отраженном на рис. 2.

Можно показать, что для областей «свой» и «чужой», соответствующих многомерному нормальному закону распределения значений и имеющих разные коэффициенты корреляции между одноименными параметрами, оптимальным является преобразование системы координат, диагонализующее корреляционную матрицу

$$R = (R^{свой} + R^{чужой})/2. \quad (9)$$

При диагонализации матрицы (9) получается новая система координат $\perp v$, в которой коэффициенты корреляции между параметрами в двух разделяемых областях совпадают по модулю, но имеют разные знаки:

$$\perp r_{ij}^{свой} = - \perp r_{ij}^{чужой}. \quad (10)$$

Естественно, что стартовые условия для синтеза декоррелирующей матрицы в виде (10) оказываются достаточно точны только для нормального многомерного закона распределения значений. Однако с ростом размерности матриц необходимость в гипотезе о нормальном распределении ослабевает, так как сказывается эффект нормализации суммы большого числа случайных отклонений. Сказывается то, что диагонализация корреляционной матрицы выполняется не сама по себе, а только с целью последующего суммирования линейной частью персептрона.

Кроме подбора весовых коэффициентов искусственного нейрона (персептрона), еще одной важной задачей является правильный выбор смещающей постоянной составляющей. Глядя на рис. 1 и 2, нетрудно убедиться в том, что произвольное изменение значения постоянной составляющей C приводит к появлению множества параллельных разделяющих прямых. Необходимо, исходя из некоторых соображений, выбрать одну из множества разделяющих прямых. В общем случае эта задача оказывается неоднозначной и достаточно сложной, но она имеет простое точное решение в рамках гипотезы нормального закона распределения плотностей $\{p(y)\}^{свой}$ и $\{p(y)\}^{чужой}$. Если гипотеза нормального закона хорошо выполняется, то постоянная C может быть найдена путем проведения разделяющей линии через точку равновероятных ошибок первого и второго рода. Эта ситуация отображена на рис. 3.

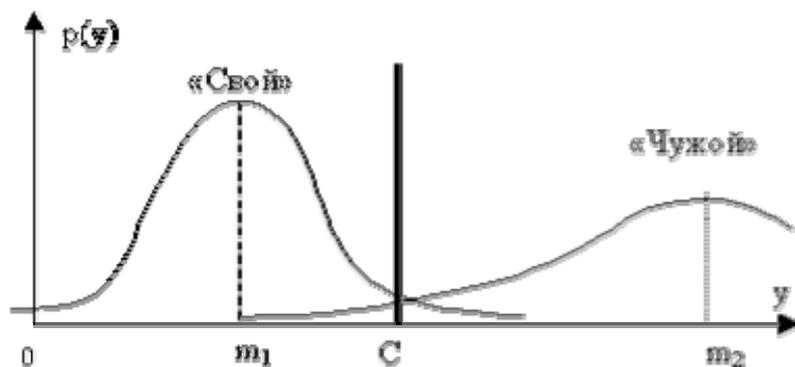


Рис. 3. Размещение разделяющей линии (гиперплоскости) так, чтобы ее проекция совпала с точкой равновероятных ошибок первого и второго рода

Точка равновероятных ошибок первого рода (отказ подлинному владельцу биометрии) и ошибок второго рода (пропуск злоумышленника) находится из условия

$$P_1 = P_2, \quad (11)$$

где P_1 – площадь хвоста распределения «свой», отсеченного справа порогом C , P_2 – площадь хвоста распределения «чужой», отсеченного слева порогом C на рис. 3.

В свою очередь, выполнения (11) можно легко добиться, зная значения весовых коэффициентов μ_i . Для этого достаточно предъявить почти настроенному перцептрону несколько примеров подлинных биометрических образов и математическое ожидание m_1 и стандарт отклонения σ_1 области «свой». Кроме того, необходимо предъявить почти настроенному перцептрону несколько образов биометрии «чужой» и вычислить для них математическое ожидание m_2 и стандарт отклонения σ_2 . После этого точка равновероятных ошибок находится путем деления отрезка $[m_1, m_2]$ пропорционально стандартам σ_1 и σ_2 . Расстояние до точки C от центра биометрического эталона может быть вычислено следующим образом:

$$|m_1(y) - C| = \sigma_1(y) \cdot \frac{|m_1(y) - m_2(y)|}{\sigma_1(y) + \sigma_2(y)}. \quad (12)$$

Аналогично может быть вычислено расстояние от проекции разделяющей линейной функции (дискриминанты) до центра второй области «чужой»:

$$|m_2(y) - C| = \sigma_2(y) \cdot \frac{|m_1(y) - m_2(y)|}{\sigma_1(y) + \sigma_2(y)}. \quad (13)$$

Очевидно, что, пользуясь уравнениями (12), (13), нетрудно найти положение проекции линейной разделяющей функции (гиперплоскости), близкое к оптимальному. При необходимости положение проекции разделяющей линии дополнительно может быть уточнено путем требуемого изменения соотношения между вероятностями ошибок первого и второго рода. Проекция линии (гиперплоскости) может быть сдвинута в любую сторону из точки равновероятных ошибок [1].

Система биометрической аутентификации на основе линейных разделяющих функций обладает рядом неоспоримых преимуществ.

По сравнению с геометрическими методами распознавания точность аутентификации с помощью линейных разделяющих функций возрастает, вследствие более точной аппроксимации области распределения векторов V_c . Повышение точности «оплачивается» при этом дополнительным объемом вычислений. Вместе с тем, дополнительные вычисления производятся по стандартным фиксированным процедурам и могут быть реализованы в масштабе времени, близкому к реальному.

Литература

1. Иванов А.И. Биометрическая идентификация личности по динамике подсознательных движений: Монография./ Пенза, Изд-во Пенз. гос ун-та, 2000. 188 с.
2. Льюнг Л. Идентификация систем. Теория для пользователя. М.: Наука, 1991. 432 с.
3. Цыпкин Я.З. Основы информационной теории идентификации. М.: Наука, 1984. 320 с.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОРГАНА СЛУХА ДЛЯ АВТОМАТИЧЕСКОГО РАСПОЗНАВАНИЯ РЕЧИ

Ю.Н. Титов

(Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина)

Научный руководитель – д.т.н., профессор А.А. Арзамасцев

(Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина)

В статье дано описание модели и результаты по моделированию органа слуха при автоматическом распознавании изолированных слов русского языка. Изложен алгоритм последовательной обработки сигнала через банк фильтров с учетом психоакустической природы слуха (Mel-Scale Transform) и результаты классификации полученных векторов-признаков с помощью аппарата искусственных нейронных сетей.

Введение

В рамках задачи оптимизации интерфейса «человек–компьютер» стоит проблема обеспечения коммуникации между ЭВМ и человеком посредством голосовых команд. Интерес к распознаванию команд по голосу обусловлен тем, что существенная в процентном отношении доля прагматически важной информации в повседневном взаимодействии человека с окружающим миром, а также многие проявления его реакции на то или иное событие и явление выражается через язык посредством голоса, а восприятие акустических волн осуществляется с помощью органа слуха. Для реализации задачи автоматического распознавания речи, т.е. построения голосового интерфейса нередко используются разнообразные подходы. Проблема автоматического распознавания речи на данный момент не является до конца решенной.

Нелинейные свойства слуха

Основной проблемой при распознавании речи является выбор компактного и информативного описания речевого сигнала, при котором существенно понижалась бы размерность образа слова и при этом сохранялись основные информативные признаки, позволяющие отличить одно слово от другого.

Наиболее распространенным методом формирования цифрового представления является спектральный анализ, основанный на дискретном преобразовании Фурье. Он позволяет сгладить влияние случайной компоненты сигнала, достаточно устойчив к изменениям интенсивности (громкости) произнесения, но формируемый образ имеет большую размерность и неудобен для распознавания [7].

Наличие определенных успешных открытий в сопряженных областях, работающих над цифровой обработкой сигналов, побуждает исследователей в последнее десятилетие обращаться к подходам, которые включают анализ процессов, происходящих в биологических объектах, и дальнейший учет в разработке математических моделей, применяемых для создания тех или иных программных продуктов. Ярким примером данной тенденции служит создание стандарта компрессии аудио MPEG-2, в основе которого лежит математическая модель слухового аппарата человека с учетом физиологических особенностей восприятия акустических волн [6]. Положительные результаты в данном направлении дают основания для их применения в области цифровой обработки акустических сигналов и распознавания речи.

Наука, которая изучает восприятие акустических волн биологическими организмами, в частности, человеком, называется психоакустикой. Основные задачи психоакустики – понять, как слуховая система расшифровывает звуковой образ, установить основные соответствия между физическими стимулами и слуховыми ощущениями, и выявить, какие именно параметры звукового сигнала являются наиболее значимыми для передачи семантической (смысловой) и эстетической (эмоциональной) информации [1].

Звуковой сигнал любой природы может быть описан определенным набором физических характеристик: частота, интенсивность, длительность, временная структура, спектр и др. Им соответствуют определенные субъективные ощущения, возникающие при восприятии звуков слуховой системой: громкость, высота, тембр, биения, консонансы–диссонансы, маскировка, локализация–стереоэффект и т.п.

Слуховые ощущения связаны с физическими характеристиками неоднозначно и нелинейно, например, громкость зависит от интенсивности звука, от его частоты, от спектра и т.п. Еще в прошлом веке был установлен закон Фехнера, подтвердивший, что эта связь нелинейна: ощущения пропорциональны отношению логарифмов стимула [1]. Например, ощущения изменения громкости в первую очередь связаны с изменением логарифма интенсивности, высоты – с изменением логарифма частоты и т.д.

Улитка (cochlea) играет основную роль в слуховом восприятии. Она представляет собой трубку переменного сечения, свернутую три раза подобно хвосту змеи. В развернутом состоянии она имеет длину 3,5 см [1]. Базилярная мембрана состоит из нескольких тысяч поперечных волокон: длина 32 мм, ширина у стремечка – 0,05 мм (этот конец узкий, легкий и жесткий), у геликотремы – ширина 0,5 мм (этот конец толще и мягче). Общий механизм передачи звука упрощенно может быть представлен следующим образом: звуковые волны проходят звуковой канал и возбуждают колебания барабанной перепонки. Эти колебания через систему косточек среднего уха передаются овальному окну, которое толкает жидкость в верхнем отделе улитки (лестнице преддверия), в ней возникает импульс давления, который заставляет жидкость переливаться из верхней половины в нижнюю через барабанную лестницу и геликотрему и оказывает давление на перепонку круглого окна, вызывая при этом его смещение в сторону, противоположную движению стремечка. Движение жидкости вызывает колебания базилярной мембраны (бегущая волна).

В настоящее время на основе тщательных экспериментов, в процессе которых слушателю предъявлялись два звука разной частоты с просьбой расположить их по высоте, установлена зависимость высоты тона от частоты сигнала, показанная на рис. 1 [7].

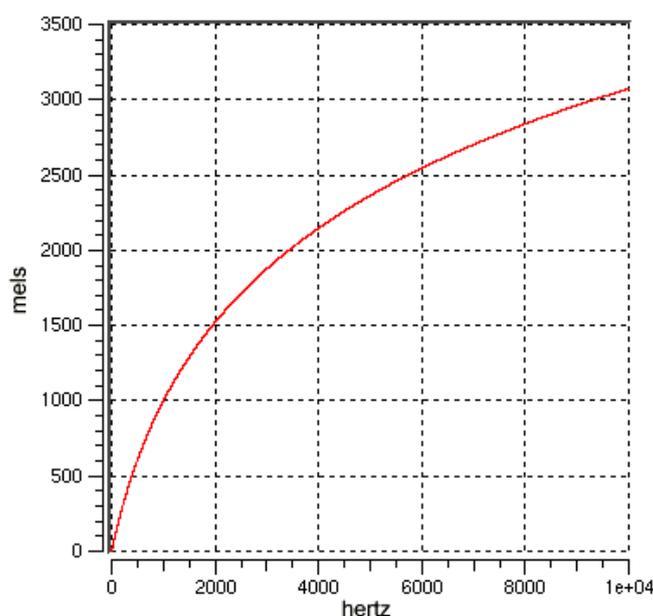


Рис. 1. Зависимость высоты тона в мелах от частоты сигнала

Значения высоты отложены в специальных единицах – мелах. Один мел равен ощущаемой высоте звука частотой 1000 Гц при уровне 40 дБ (иногда для оценки высоты тона используется другая единица, барк = 100 мел). Как видно из рис. 1, эта связь нелинейна – при увеличении частоты, например, в три раза (от 1000 до 3000 Гц), высо-

та повышается только в два раза (от 1000 до 2000 мел) [1]. Если высоту тона в мелах обозначить m , то на основе многих экспериментов зависимость тона от частоты f в герцах можно представить в виде [6]

$$m=1127,01048 \log (1+f/700). \quad (1)$$

Теория места в психоакустике при восприятии высоты основана на способности базилярной мембраны выполнять частотный анализ сложного звука, т.е. действовать как спектральный анализатор. Базилярная мембрана организована топтопически, т.е. каждый тон имеет свою топографию размещения [1]. Как уже было указано выше, звуковой сигнал вызывает появление на мембране бегущей волны, но специфика возбуждения состоит в том, что максимум смещения этой бегущей волны располагается в разных местах базилярной мембраны – низкие частоты имеют максимум смещения вблизи вершины мембраны, высокие – вблизи овального окна. Каждая частота имеет свое место максимума возбуждения на мембране. В зависимости от спектрального состава на базилярной мембране возбуждаются различные участки. Возбуждаются волосковые клетки, находящиеся на этом месте, и их электрическая активность сообщает мозгу, какие частоты присутствуют в спектре. Таким образом, частота тона представлена в коде, основанном на том, нейроны каких участков активны, а каких – молчат.

Нейронные сети как рецепторы базилярной мембраны

Удобным инструментом для моделирования рецепторов восприятия акустических волн нейронами-рецепторами, расположенными вдоль базилярной мембраны, является аппарат искусственных нейронных сетей [4]. Развитые в последние десятилетия в связи с резким увеличением вычислительной производительности компьютерной техники, они показывают себя как весьма серьезный подход для решения задач классификации образов. Также имеет место аналогия с реальными нейронами-рецепторами – правда, с учетом некоторых ограничений, как, например, отсутствие затухания сигнала, распространяющегося в нейронной сети от нейрона к нейрону вследствие отсутствия сопротивления синапса, и т.д. [2].

При выборе числа входных нейронов и построении архитектуры нейронной сети следует учитывать некоторые фактические аспекты восприятия речи человеком. Известно, а также легко наблюдаемо из экспериментов, что диапазон используемых частот человеческой речи располагается примерно в интервале 0–4000 Гц [3]. В свою очередь, из психоакустической теории места известно, что полосам частот по пропускной способности соответствует 25 сегментов [1].

Таким образом, можно сформулировать модель слуховой системы, которая представлена из линейки 25 психоакустических (mel-scale) полосовых фильтров и нейронной сети для классификации сегментов речи человека. Для того чтобы нейронная сеть смогла произвести классификацию, необходимо сформулировать классификацию языка речи, т.е. сформировать то, что требуется классифицировать. Также необходимо создать словарь обучения, т.е. набор образцов классификации для начального обучения нейронной сети.

Эксперимент и результаты

Нейронная сеть состояла из 25 нейронов входного слоя, трех нейронов внутреннего слоя и одного выходного нейрона. Использовалась сигмоидальная функция активации. В эксперименте использовался речевой корпус из десяти числительных, а также набор сэмплов, которые представляли собой названия 40 городов РФ. Численность дикторов составляла 17 женщин и 15 мужчин. Для разделения фонем и выделения участков одной фонемы с определением границ для дальнейшей обработки использовался

алгоритм кэпстра мел-скейл преобразования, описанный в [8]. Результаты представлены в табл. 1.

Степень распознавания, %	Дикторы	
	Мужчины	Женщины
Числительные	85	87
Названия городов	71	73

Таблица 1. Результаты распознавания изолированных слов из речевого корпуса

Заключение

В статье дано описание математической модели среднего уха человека с помощью психоакустического подхода восприятия высоты и полученной с помощью него классификации образов с использованием аппарата искусственных нейронных сетей. Приведены результаты экспериментов распознавания изолированных слов. К достоинствам данного метода можно отнести его достаточную простоту реализации, а также весьма очевидную аналогию с процессами, происходящими в реальном органе слуха человека. Недостатком является уровень ошибки при распознавании (13–23 %), который предлагается снизить использованием блоков контекстного распознавания, таких, как например, описанных в [9]. Также предлагается использовать увеличение речевого корпуса для обучения, так как большие речевые корпуса при обучении нейронных сетей играют важную роль для правильной классификации, представляя статистический материал для обучения и последующего распознавания [5].

Литература

1. Алдошина И.А. Основы психоакустики. //Звукорежиссер, 2002. №3. С. 86–92.
2. Барский А.Б. Нейронные сети: Распознавание, управление, принятие решений. М.: Финансы и статистика, 2004.
3. Кривнова О.Ф., Захаров Л.М., Строкин Г.С. Речевые корпуса (опыт разработки и использование) / Диалог'2000. Прикладные проблемы. М., МГУ им. М.В. Ломоносова, 2000.
4. Леонович А.А., Медведев М.С. Распознавание фонем: функциональный и нейросетевой подходы. / Материалы XXIII международной конференции «Информационные технологии в науке, образовании, телекоммуникации и бизнесе», Красноярск, КГТУ, майская сессия, 2003.
5. Лобанов Б.М., Цирульник Л.И. Фонетико-акустическая база данных для многоязычного синтеза речи по тексту на славянских языках.
6. Салюшин С.А. Методика экспериментального определения структурных параметров нейросети для распознавания речи. / Сборник научных трудов МИФИ, 2004.
7. Федяев О.И., Гладунов С.А. Фонетический анализ речи на основе нейросетевой аппроксимации сигнала. / Научные труды Донецкого гос. технического университета. Серия: Проблемы моделирования и автоматизации проектирования динамических систем. 1999. С. 38–43.
8. Dusan S., Rabiner L. On the Relation between Maximum Spectral Transition Positions and Phone Boundaries. // IEEE proceedings, Rutgers University, Piscataway, New Jersey, USA, 2001.
9. Cummins F., Grimaldi F., Leonard T. The Chains corpus: characterizing individual speakers. / Proceedings of the 11th International Conference «Speech and Computer SPECOM'2006». St. Peterburg, Anatolya Publishers, 2006.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В ЧЕЛОВЕЧЕСКОМ ОРГАНЕ СЛУХА

А.В. Носова

Научный руководитель – д.т.н., профессор В.М. Мусалимов

В работе рассматривается человеческий орган слуха. Создается модель (в пакете MatLab) наружного уха человека. Приводится структурная схема восприятия звука человеком.

Введение

Слух – одно из пяти чувств человека – способность воспринимать и распознавать звуки. Слух зависит от:

- уха – наружного, среднего и внутреннего – которое воспринимает звуковые колебания;
- слухового нерва, передающего полученные от уха сигналы;
- определенных отделов головного мозга (слуховых центров), в которых импульсы, переданные слуховыми нервами, вызывают осознание исходных звуковых сигналов.

Любой источник звука вызывает колебания окружающего воздуха: сначала мгновенное сжатие, потом мгновенное разрежение. Другими словами, из каждого источника звука исходят серии чередующихся волн повышенного и пониженного давления, которые быстро распространяются в воздухе. Этот движущийся поток волн и образует звук, воспринимаемый органами слуха.

Человеческое ухо номинально слышит звуки в диапазоне от 20 до 20 000 Гц. Верхний предел имеет тенденцию снижаться с возрастом. Большинство взрослых людей не могут слышать выше 16 кГц. Ухо само по себе не реагирует на частоты ниже 20 Гц, но они могут ощущаться через органы осязания. Чувствительность уха к звуковым колебаниям различных частот неодинакова. Оно особенно тонко реагирует на колебания средних частот (от 1000 до 4000 Гц). По мере уменьшения или увеличения частоты относительно среднего диапазона острота слуха постепенно снижается. По краям воспринимаемого диапазона частот звук должен быть очень сильным, настолько, что иногда ощущается физически прежде, чем слышится.

1. Анатомия органа слуха

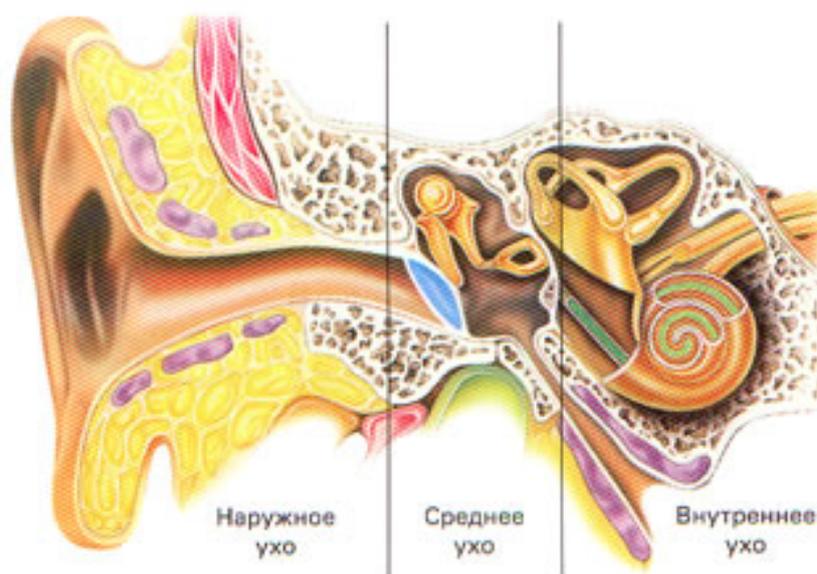


Рис. 1. Современная классификация зон (областей) уха

1.1. Внешнее (наружное) ухо

Внешнее ухо состоит из ушной раковины, собирающей звуковые волны и направляющей их в наружный слуховой проход, где они усиливаются благодаря его воронкообразной форме. Слуховой проход оканчивается барабанной перепонкой (рис. 2, а–б). Большая часть ушной раковины имеет хрящевой остов, покрытый надхрящницей и кожей. Нижняя ее часть – мочка – образована жировой клетчаткой, покрытой кожей. Полость ушной раковины переходит в наружный слуховой проход, который представляет собой трубку овального сечения длиной в среднем (у взрослого) около 2,5 см. Диаметр наружного слухового прохода различен (достигает 0,7–1 см).

Наружный слуховой проход состоит из фиброзно-хрящевых и костных отделов. Длина последнего достигает 16 мм.

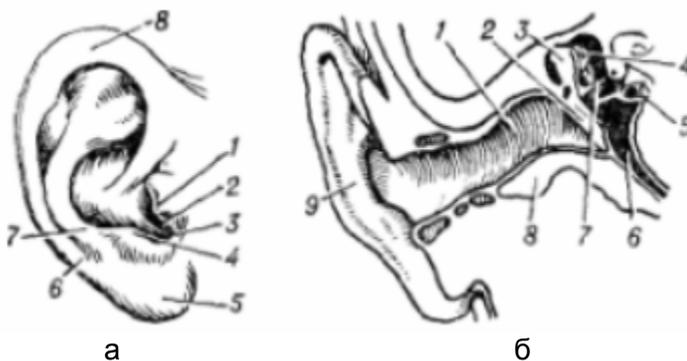


Рис. 2. Внешнее ухо: а – ушная раковина (1 – козелок; 2 – наружный слуховой проход; 3 – межкозелковая вырезка; 4 – противокозелок; 5 – мочка уха; 6 и 8 – завиток; 7 – противозавиток); б – наружное и среднее ухо (1 – наружный слуховой проход; 2 – барабанная перепонка; 3 – молоточек; 4 – наковальня; 5 – стремечко; 6 – барабанная полость; 7 – стремечковая мышца; 8 – барабанная часть височной кости; 9 – ушная раковина)

1.2. Среднее ухо

Среднее ухо состоит из полостей и каналов, сообщающихся друг с другом: барабанной полости, слуховой (евстахиевой) трубы, хода в антрум, антрума и ячеек сосцевидного отростка (рис. 3). Границей между наружным и средним ухом является барабанная перепонка. Среднее ухо – это заполненная воздухом камера, связанная с назальным и горловым ходами евстахиевой трубой, которая предназначена для выравнивания звукового давления по обе стороны от барабанной перепонки. Евстахиева труба обычно закрывается и открывается естественным образом, когда вы глотаете или зеваете.

Звуковые волны вызывают колебания барабанной перепонки, которые передаются по цепочке прикрепленных к ней слуховых косточек. Эти самые маленькие кости человека называются молоточек, наковальня и стремечко. Они механически связывают барабанную перепонку с овальным окошечком внутреннего уха.

Барабанная полость находится в пирамиде височной кости. Объем ее составляет примерно 1 см³. Наружная стенка барабанной полости образована барабанной перепонкой и костью, являющейся продолжением стенок наружного слухового прохода. Внутренняя (медиальная) стенка в большей своей части образована капсулой ушного лабиринта. На ней имеется мыс (промонториум), образованный основным завитком улитки, и два окна. Одно из них, овальное (окно преддверия), закрыто подножной пластинкой (основанием) стремени. Другое, круглое (окно улитки), закрыто вторичной барабанной перепонкой (мембрана круглого окна).

Задняя стенка граничит с сосцевидным отростком. В верхнем ее отделе имеется ход в антрум.

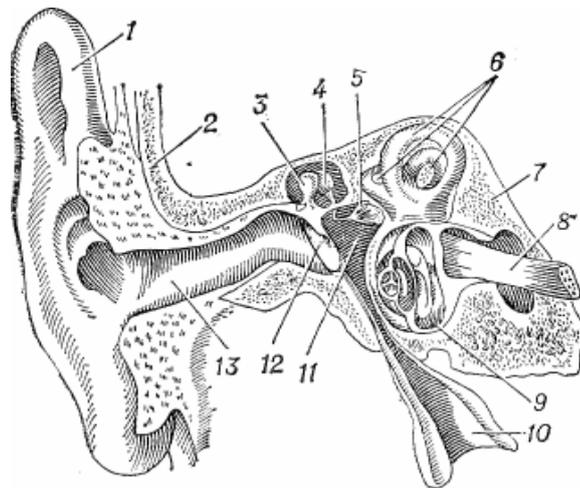


Рис. 3. Строение органа слуха (разрез вдоль правого наружного слухового прохода):
 1 – ушная раковина; 2 и 7 – височная кость; 3 – молоточек; 4 – наковальня;
 5 – стремечко; 6 – полукружные каналы; 8 – слуховой нерв; 9 – улитка; 10 – слуховая
 (евстахиева) труба; 11 – барабанная полость; 12 – барабанная перепонка; 13 – на-
 ружный слуховой проход

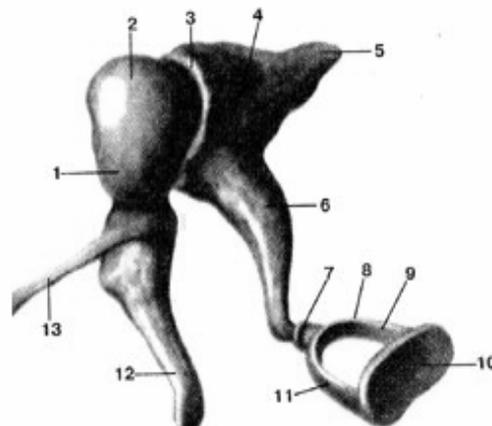


Рис. 4. Слуховые косточки: 1 – молоточек; 2 – головка молоточка; 3 – наковальне-
 молоточковый сустав; 4 – наковальня; 5 – короткая ножка наковальни; 6 – длинная
 ножка наковальни; 7 – наковальне-стремениной сустав; 8 – стремя; 9 – задняя ножка
 стремени; 10 – основание стремени; 11 – передняя ножка стремени; 12 – рукоятка
 молоточка; 13 – передний отросток молоточка

В барабанной полости имеются три слуховых косточки (рис. 4): молоточек, рукоятка которого соединена с барабанной перепонкой, а головка (сочленением) с телом наковальни; в наковальне, помимо ее тела, различают короткую и длинную ножки; последняя соединяется с головкой стремени. В стремени, помимо головки и шейки, имеются две ножки – передняя и задняя, а также подножная пластинка (основание).

В барабанной полости различают три отдела: верхний (аттик, эптимпанум, надбарабанное пространство), средний (мезотимпанум) и нижний (гипотимпанум).

В барабанной полости имеются две мышцы – стремениная и натягивающая барабанную перепонку. Эти мышцы играют большую роль в аккомодации звукопроводящей системы и предохранении внутреннего уха от акустической травмы.

Звуковые колебания через наружный слуховой проход передаются на барабанную перепонку и далее по цепи слуховых косточек (молоточек, наковальня и стремя) во внутреннее ухо. При этом происходит их усиление как за счет разницы поверхностей барабанной перепонки и подножной пластинки стремени, так и в результате рычажного действия слуховых косточек.

1.3. Внутреннее ухо

Внутреннее ухо – это специальная система каналов, а также расположенный в них рецепторный аппарат слухового и вестибулярного анализаторов.

Основная часть заполненного жидкостью внутреннего уха свернута спиралью и поэтому называется улиткой. В улитке находятся приблизительно 20 000 микроскопических сенсорных клеток, соединенных с волокнами слухового нерва и имеющих окончание в форме волосков. Разные группы этих волосковых клеток реагируют на различные частоты колебаний. Попадая в улитку, преобразованные звуковые волны вызывают колебания жидкости. При этом волосковые клетки, сгибаясь и разгибаясь, порождают нервные электрические импульсы, которые посылаются в мозг. Здесь эти импульсы интерпретируются как значимые звуки.

Расположено внутреннее ухо в пирамиде височной кости, которая в свою очередь делится на костный лабиринт и перепончатый.

В костном лабиринте внутреннего уха различают преддверие, три полукружных канала и улитку (рис. 5). Внутри костных лабиринтов внутреннего уха расположены перепончатые лабиринты, заполненные эндолимфой. Пространства между костными и перепончатыми лабиринтами заполнены перилимфой. Преддверие образует центральную часть, сзади и сверху оно переходит полукружные каналы, а спереди и внутри – в улитку.

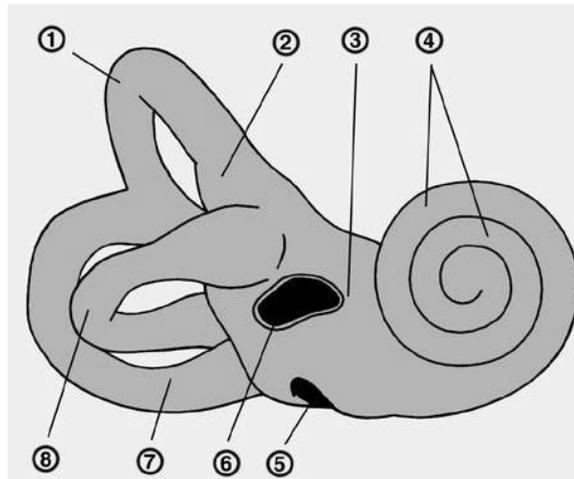


Рис. 5. Правый костный лабиринт: 1 – верхний (фронтальный) полукружный канал; 2 – ампула; 3 – преддверие; 4 – улитка; 5 – окно улитки; 6 – окно преддверия; 7 – задний (сагиттальный) канал; 8 – латеральный (горизонтальный) канал

Полукружные каналы, их три, расположены в трех взаимно перпендикулярных плоскостях. Каждый канал имеет одну расширенную ножку (ампулу) и простую ножку. На дне каждой перепончатой ампулы имеется гребешок – нервный концевой аппарат. Эта система называется вестибулярным аппаратом.

Улитка представляет собой костный канал, отходящий от преддверия и образующий два с половиной завитка вокруг костного стержня. Внутри костного канала имеется три хода: лестница преддверия и барабанная лестница, заполненные перилимфой, и располагающийся между ними улитковый ход, заполненный эндолимфой. На его нижней стенке (основной мембране) расположен кортиев орган – рецепторный аппарат слухового анализатора.

Кортиев орган состоит из так называемых кортиев дуг, образованных клетками-столбиками, поддерживающих клеток Дейтерса и волосковых, или чувствующих клеток. В виде навеса кортиев орган покрыт специальной перепонкой (рейснерова перепонка). Чувствующие волосковые клетки кортиева органа оплетаются разветвлениями слухового нерва, которые собираются в спиральный узел и далее в составе слухового

нерва идут в кору головного мозга. Улитка и заключенный в ней рецепторный аппарат слухового анализатора носят название кохлеарного аппарата.

Физическую основу слухового раздражения составляют колебания окружающей среды. Движения стремечка в овальном окне костного лабиринта вызывают волнообразные колебания перилимфы в преддверии, которые передаются на основную перепонку улитки и расположенный на ней кортиев орган. При этом энергия колебаний превращается в физиологический процесс нервного возбуждения, который проводится к корковым слуховым центрам в височных долях мозга, где нервное возбуждение превращается в ощущение звука.

2. Структурная схема органа слуха

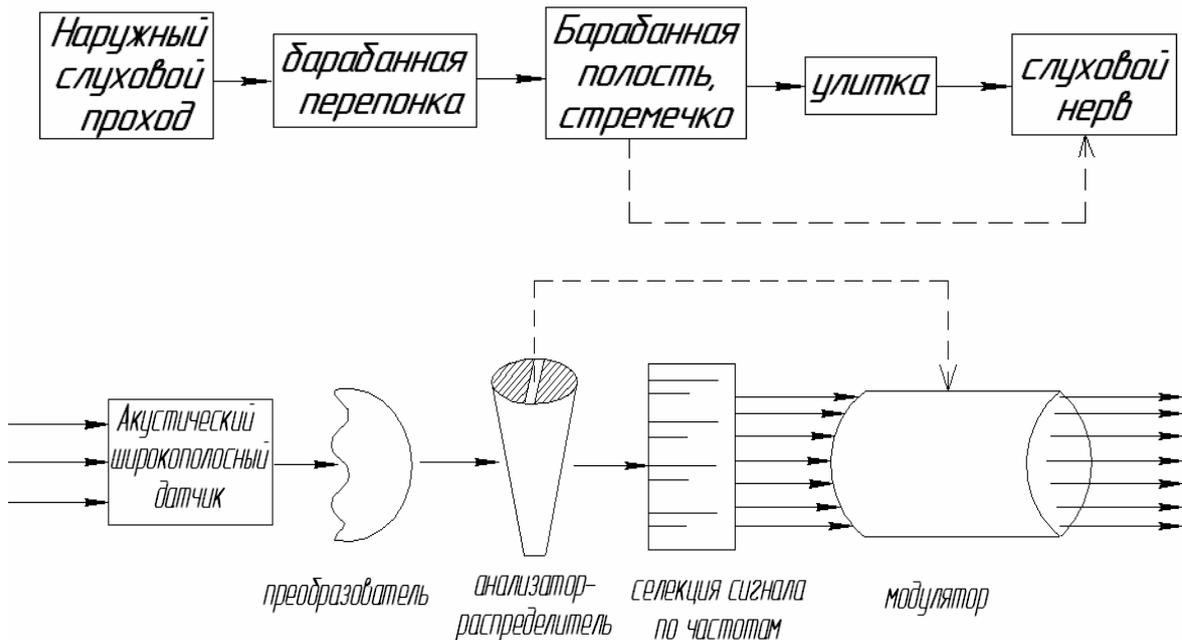


Рис. 6. Структурная схема преобразования акустической волны в звук, который слышит человек

3. Модель наружного уха

Наружное ухо служит в основном для придания слуху определенной направленности, концентрации энергии звуковых волн и защиты барабанной перепонки от вредных влияний изменяющейся температуры и влажности среды. На информационные процессы моноуральной обработки акустических сигналов оно не оказывает существенного влияния.

При желании учесть не вполне равномерную частотную характеристику наружного уха можно воспользоваться простейшей аппроксимацией его передаточной функции в виде

$$K_{н.у.}(p) = \frac{1 + pT_1 + p^2T_0^2}{1 + pT_2 + p^2T_0^2},$$

где $T_0 = 40 \text{ мсек}$, $T_1 = 60 \text{ мсек}$, $T_2 = 15 \text{ мсек}$, а p – комплексная частота.

На рис. 7 показана схема электрической цепи, обладающей такой передаточной функцией. Погрешности аппроксимации экспериментальной частотной характеристики наружного уха при $R_\Gamma = R_H = 2 \text{ кОм}$ не превышает 2 Дб. При иных значениях $R_\Gamma = R_H$ параметры модели определяются по формулам:

$$\begin{cases} L = \frac{2 * R_H}{\pi * f_0} \\ C = \frac{1}{8 * \pi * f_0 * R_H} \\ R = 6 * R_H \end{cases}$$

где f_0 – частота максимума (4 000 Гц).

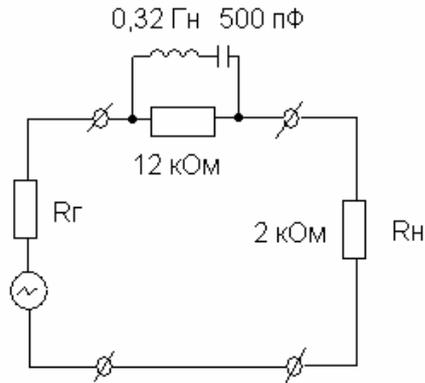


Рис. 7. Принципиальная схема цепи, воспроизводящая частотную характеристику коэффициента передачи наружного уха

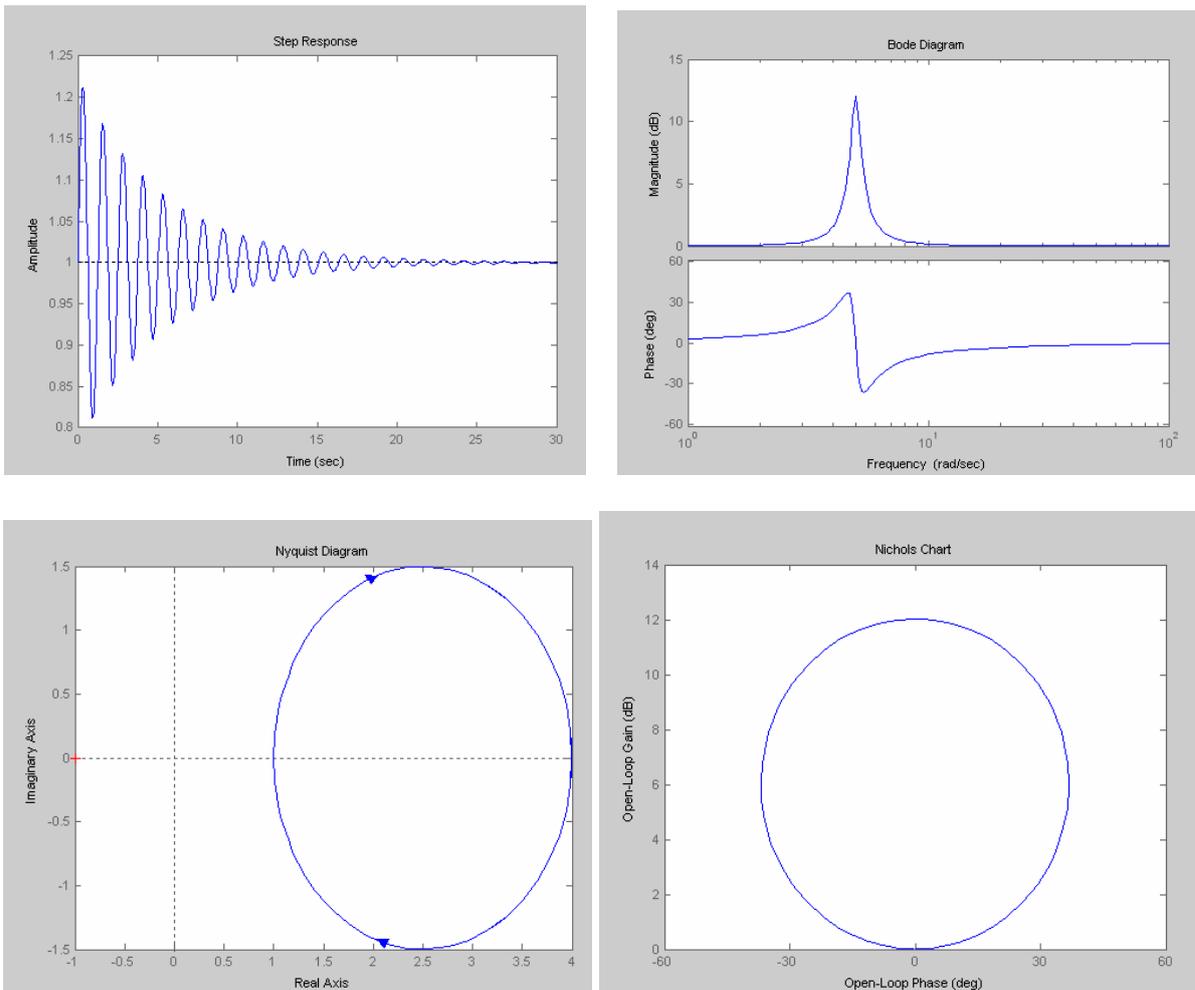


Рис. 8. Результаты моделирования

Ниже представлена программа моделирования передаточной функции в среде MATLAB.

```
>> t2=15*10^(-3)
t2 =
    0.0150
>> t1=60*10^(-3)
t1 =
    0.0600
>> t0=40*10^(-3)
t0 =
    0.0400
>> k=tf([t0 t1 1],[t0 t2 1])
Transfer function:
0.04 s^2 + 0.06 s + 1
-----
0.04 s^2 + 0.015 s + 1
>> step(k) >> bode(k)
>> nichols(k) >> nyquist(k)
```

Результаты моделирования показаны на рис. 8.

Из графиков $\text{step}(k)$ и $\text{bode}(k)$ видно, что передаточная функция (k) стремится к установившемуся значению 1, хотя изначально имеет большую частоту колебаний, что не очень хорошо, так как может привести к неустойчивой системе.

Из графиков $\text{nichols}(k)$ и $\text{nyquist}(k)$ видно, что данная замкнутая система устойчива.

Заключение

В работе исследована динамика человеческого уха, построена модель наружного уха человека и изучено преобразование акустических волн в звук человеческим органом слуха. Целью моделирования было изучение человеческого органа слуха как идеального акустического преобразователя, к которому стремится современная наука.

Литература

1. Лабутин В.К., Молчанов А.П. Модели механизмов слуха. М.: Энергия, 1973.
2. Шабанов А.Н. Медицинская энциклопедия. М.: Сов. энциклопедия, 1973.

ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ИЗОБРАЖЕНИЙ НА ЦИЛИНДРЕ И ТОРЕ

П.П. Коваленко

Научный руководитель – д.т.н., профессор В.М. Мусалимов

В работе рассматриваются особенности отображения изображений на цилиндр и тор. Цилиндр является системой с одной степенью свободы. Тор представляет собой систему с двумя степенями свободы, описываемую уравнениями Гамильтона. В ходе выполнения данной работы были написаны программы, реализующие вращение изображения на поверхности цилиндра и тора. Вращение изображения на поверхности цилиндра связано с одной частотой, а вращение изображения на поверхности тора – с двумя частотами.

Под визуализацией понимается представление зрительной информации каким-либо способом. В связи с тем, что зрение играет главенствующую роль в процессе восприятия человеком окружающего пространства, становится очевидной важность представления зрительной информации в удобном для восприятия виде. Представление информации разными способами приводит к различному ее восприятию.

В рамках данной работы предлагается произвести представление изображения путем нанесения его на поверхность цилиндра и тора с последующим использованием средств анимации. В качестве исходного было взято изображение картины Н. К. Рериха «Матерь Мира».

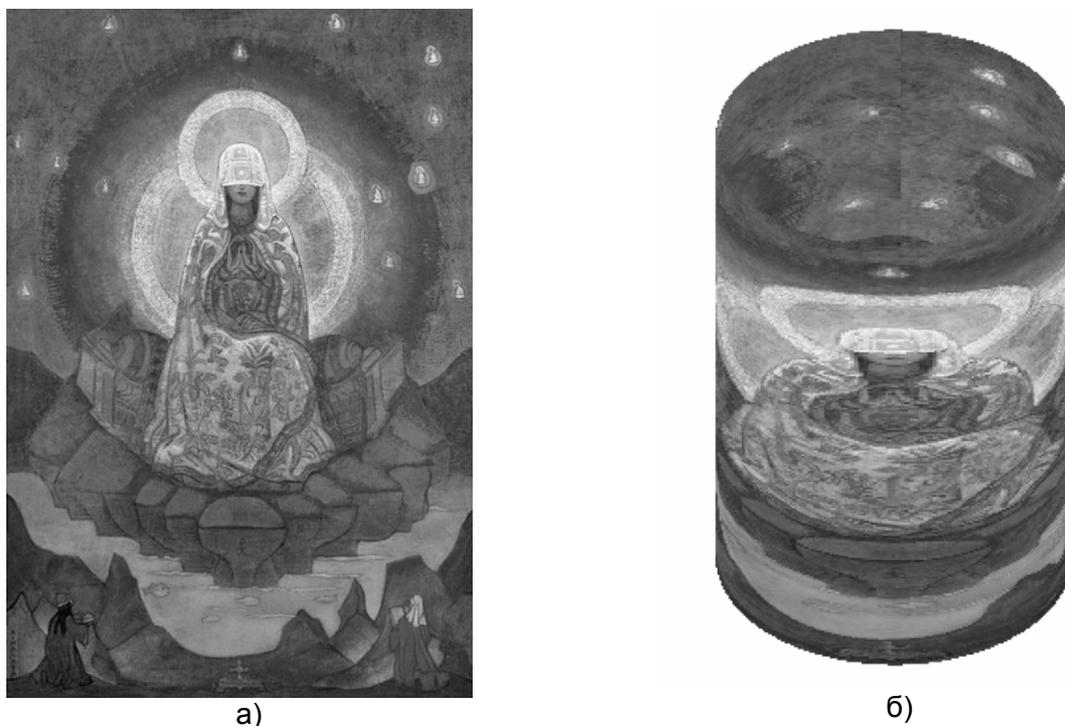


Рис. 1. а) Н.К. Рерих «Матерь Мира», б) изображение, нанесенное на поверхность цилиндра

С использованием пакета прикладных программ Matlab 7.0.1 была создана программа для нанесения исходного изображения на поверхность цилиндра. Результат работы программы представлен на рис. 1б.

Текст программы для нанесения изображения на поверхность цилиндра:

```
pr=imread('pr1.jpg');    % чтение изображения из файла
n = 500;
r = [1 1];
r = r(:);
m = length(r); if m==1, r = [r;r]; m = 2; end
theta = (0:n)/n*2*pi;
```

```

sintheta = sin(theta);
x = r * cos(theta);
y = r * sintheta;
z = (0:m-1)/(m-1)*ones(1,n+1);    % построение поверхности цилиндра
x1=-x;
y1=y;
z1=-z;
warp(x1,y1,z1,pr)    % нанесение текстуры на поверхность цилиндра
axis([-1.5 1.5 -1.5 1.5 -1 0]) % установка параметров осей
axis off;
campos([2,2,1])    % установка позиции камеры

```

Также с использованием системы Matlab 7.0.1 была написана программа для нанесения исходного изображения на поверхность тора. Результат работы программы представлен на рис. 2б.

Тор представляет собой систему с двумя степенями свободы, описываемую уравнениями Гамильтона (рис. 2а):

$$\dot{J} = -\frac{\partial H_0}{\partial \theta} = 0 \rightarrow J = const,$$

$$\dot{\theta} = \frac{\partial H_0}{\partial J} = \omega \rightarrow \theta = \omega \cdot t + \delta.$$

Вращение изображения по поверхности тора связано с двумя частотами, т.е. представляет собой одновременное вращение по двум направлениям – по большому радиусу и по малому радиусу:

$$\Delta\theta_2 = 2\pi \cdot \frac{\omega_2}{\omega_1}.$$

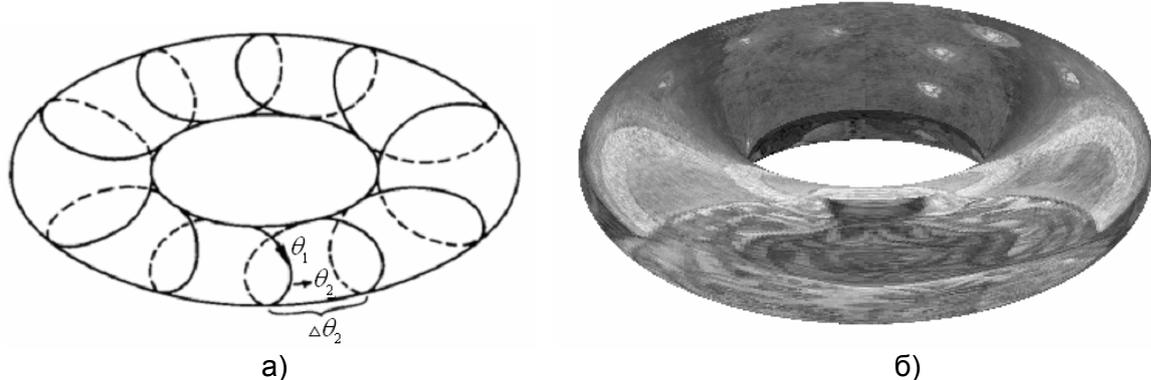


Рис. 2. а) Гамильтонова система, б) изображение, нанесенное на поверхность тора

Ниже приводится текст программы для нанесения изображения на поверхность тора:

```

pr=imread('pr1.jpg');    % чтение изображения из файла
n=500;
t1=pi*(-n:5:n)/n;
t2=(pi)*(-n:5:n)/n;
X=(1.2+0.5*cos(t2))*cos(t1);    % R=1.2, r=0.5
Y=(1.2+0.5*cos(t2))*sin(t1);
E=ones(size(t1));
Z=0.5*sin(t2)*E;
warp(X,Y,-Z,pr)    % нанесение текстуры на поверхность тора
axis([-2 2 -2 2 -2 2]) % установка параметров осей
axis off

```

Дальнейшим этапом развития данной работы явилось создание с помощью пакета прикладных программ Matlab 7.0.1 программ, реализующих перемещение изображения по поверхности цилиндра и тора в различных направлениях с различной частотой. Цилиндр представляет собой систему с одной степенью свободы, и вращение изображения по его поверхности связано с одной частотой.

Ниже приводится текст программы, реализующей вращение изображения по поверхности цилиндра:

```
pr=imread('pr1.jpg');
fig=figure;
set(fig,'DoubleBuffer','on');
set(gcf, 'color', [0.3,0.0,0.3]);
aviobj = avifile('cyl_vr.avi','quality',100,'fps',24)
s = 0.2616;
nframes = 720;
n = 300;
r = [1 1];
r = r(:);
m = length(r); if m==1, r = [r;r]; m = 2; end
theta = -0.8+(0:n)/n*2*pi;
sintheta = sin(theta);
for k = 1:nframes
theta=theta+s;
sintheta = sin(theta);
x = r * cos(theta);
y = r * sintheta;
z = (0:m-1)/(m-1)*ones(1,n+1);
x1=-x;
y1=y;
z1=-z;
warp(x1,y1,z1,pr)
axis([-1.5 1.5 -1.5 1.5 -1 0])
axis off;
campos([2,2,-0.5])
frame = getframe(gca);
aviobj = addframe(aviobj,frame);
end
aviobj = close(aviobj)
```

Ниже приводится текст программы, реализующей вращение изображения по поверхности тора:

```
pr1=imread('pr1.jpg');
fig=figure;
set(fig,'DoubleBuffer','on');
set(gcf, 'color', [0,0,0]);
aviobj = avifile('tor_vr.avi','quality',100,'fps',24)
s1 = 0.0;
s2 = 0.0;
nframes = 720;
k=300;
t1=pi*(-k:5:k)/k;
t2=(pi)*(-k:5:k)/k;
for n = 1:nframes
```

```

s1=s1+0.001    % реализация ускорения
s2=s2-0.0007
t1=t1-s1;
t2=t2+s2;
X=(1.2+0.5*cos(t2))*cos(t1);
Y=(1.2+0.5*cos(t2))*sin(t1);
E=ones(size(t1));
Z=0.5*sin(t2)*E;
warp(X,Y,-Z,pr1)
    axis([-1.5 1.5 -1.5 1.5 -1.5 1.5])
    axis off;
    frame = getframe(gca);
    aviobj = addframe(aviobj,frame);
end
aviobj = close(aviobj)

```

Данная программа позволяет также реализовать вращение изображения по поверхности тора с ускорением.

Таким образом, в работе рассмотрено отображение изображений на поверхность цилиндра и тора, а также были написаны программы, реализующие вращение изображения на поверхности цилиндра и тора. Результаты, полученные в данной работе, будут использованы при создании виртуального музея в рамках проекта «Рерих».

Литература

1. Дьяконов В.П., Абраменкова И.А. Matlab. Обработка сигналов и изображений. Специальный справочник. СПб: Питер, 2002. 602 с.
2. Шустер Г. Детерминированный хаос: введение. М.: Мир, 1998. 253 с.

ПРОБЛЕМЫ ПЕРЕДАЧИ И ПРИЕМА АКУСТИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ

С.А. Родинков

Научный руководитель – д.т.н., профессор В.М. Мусалимов

В работе рассмотрены проблемы приема и передачи акустических сигналов. Рассмотрено устройство уха как простейшего акустического волновода. Приведены понятия о звуке и об ультразвуке, рассмотрены специфические особенности ультразвука, его основные характеристики.

Введение. Устройство уха

Участок среды, ограниченный в одном или двух направлениях и служащий для передачи акустических волн, называется акустическим волноводом. Первым простейшим акустическим волноводом является человеческое ухо. Кратко рассмотрим его устройство (рис. 1).

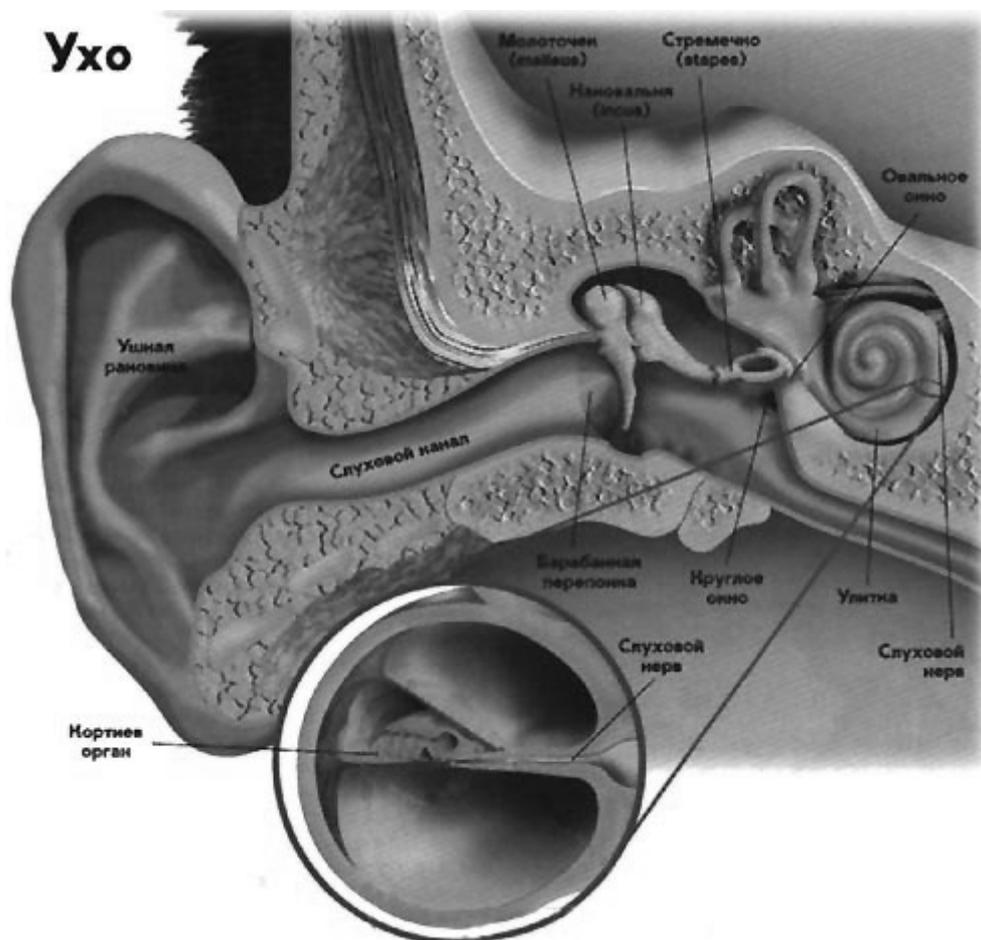


Рис. 1. Устройство уха

Снаружи мы видим так называемое внешнее ухо. Затем идет канал примерно 0.5 см в диаметре и около 3 см в длину. Далее – барабанная перепонка, к которой присоединены кости – среднее ухо. Эти косточки передают вибрацию барабанной перепонки далее – на другую перепонку, во внутреннее ухо – трубку с жидкостью диаметром около 0.2 мм и длиной 3–4 см, закрученную как улитка. Колебания воздуха слишком слабы, чтобы напрямую колебать жидкость, и среднее ухо вместе с барабанной перепонкой и перепонкой внутреннего уха составляют гидравлический усилитель: площадь барабанной перепонки во много раз больше перепонки внутреннего уха, поэтому

давление (которое равно F/S) усиливается в десятки раз. Во внутреннем ухе по всей его длине натянута еще одна вытянутая мембрана, напоминающая струну, жесткая к началу уха и мягкая к концу. Каждый участок этой мембраны колеблется в своем диапазоне: низкие частоты – в мягком участке ближе к концу, самые высокие – в самом начале. Вдоль этой мембраны расположены нервы, которые воспринимают колебания и передают их в мозг, используя два принципа.

Первый – ударный принцип. Поскольку нервы еще способны передавать колебания (бинарные импульсы) с частотой до 400–450 Гц, именно этот принцип непосредственно используется в области низкочастотного слуха. Там сложно иначе – колебания мембраны слишком сильны и затрагивают слишком много нервов. Ударный принцип расширяется примерно до 4 кГц с помощью трюка – несколько (до десяти) нервов ударяют в разных фазах, складывая свою пропускную способность. Этот способ хорош тем, что мозг воспринимает информацию более полно: с одной стороны, мы все-таки имеем легкое частотное разделение, а с другой – можем еще смотреть сами колебания, их форму и особенности, а не просто частотный спектр. Этот принцип продлен на самую важную для нас часть – спектр человеческого голоса. Да и вообще, до 4 кГц находится вся наиболее важная для нас информация.

Второй принцип – просто местоположение возбуждаемого нерва – применяется для звуков более 4 кГц. Таким образом, в области высоких частот мы имеем чисто спектральный слух не очень высокого разрешения, а для частот, близких к человеческому голосу – более полный, основанный не только на разделении спектра, а еще и на дополнительном анализе информации самим мозгом, что дает более полную картину, например, стерео.

Понятие о звуке

Звуковые волны могут служить примером колебательного процесса. Всякое колебание связано с нарушением равновесного состояния системы и выражается в отклонении ее характеристик от равновесных значений.

Звуком называются механические колебания упругой (твердой, жидкой или газообразной) среды, влекущие за собой возникновение в ней последовательно чередующихся участков сжатия и разряжения. Если произвести резкое смещение частиц упругой среды в одном месте, например, с помощью поршня, то в этом месте увеличится давление. Благодаря упругим связям частиц давление передается на соседние частицы, которые, в свою очередь, воздействуют на следующие. Таким образом, область повышенного давления как бы перемещается в упругой среде. За областью повышенного давления следует область пониженного давления. Если же производить непрерывные смещения частиц упругой среды с какой-то частотой, то образуется ряд чередующихся областей сжатия и разряжения, распространяющихся в среде в виде волны. Каждая частица упругой среды в этом случае будет совершать колебательные движения, смещаясь то в одну, то в другую сторону от первоначального положения.

В жидких и газообразных средах, где отсутствуют значительные колебания плотности, акустические волны имеют продольный характер, т.е. в них совпадают направления колебания частиц и перемещения волны. В твердых телах и плотных биотканях, помимо продольных деформаций, возникают также и упругие деформации сдвига, обуславливающие возбуждение поперечных (сдвиговых) волн, в этом случае частицы совершают колебания перпендикулярно направлению распространения волны. Скорость распространения продольных волн значительно больше скорости распространения сдвиговых волн.

Профиль акустической волны, как правило, имеет знакопеременный характер, причем давление считается положительным, если участок среды в данный момент времени испытывает сжатие, и отрицательным при разряжении.

Если колебания могут быть выражены математически в виде функции, значение которой через равные промежутки времени повторяются, то они называются периодическими. Наименьший интервал времени повторения колебательного процесса соответствует периоду (T). Величина, обратная периоду колебаний, называется частотой.

$$f = \frac{1}{T}. \quad (1)$$

Она показывает число полных колебаний в секунду. Частота колебаний измеряется в герцах (Гц). Частота колебаний связана с длиной волны λ соотношением

$$\lambda = \frac{c}{f}, \quad (2)$$

где c – скорость распространения звуковых волн (м/с). В соответствии с частотой, звуковые волны делят на следующие диапазоны: инфразвук – до 16 Гц; слышимый звук – 16 Гц–20000 Гц; ультразвук – 20 КГц–1000 МГц; гиперзвук – выше 109 Гц.

Понятие об ультразвуке

Ультразвук (УЗ) – упругие колебания и волны, частота которых превышает 15–20 кГц. Нижняя граница области УЗ частот, отделяющая ее от области слышимого звука, определяется субъективными свойствами человеческого слуха и является условной, так как верхняя граница слухового восприятия у каждого человека своя. Верхняя граница УЗ частот обусловлена физической природой упругих волн, которые могут распространяться лишь в материальной среде, т.е. при условии, что длина волны значительно больше длины свободного пробега молекул в газе или межатомных расстояний в жидкостях и твердых телах. В газах при нормальном давлении верхняя граница частот УЗ составляет $\approx 10^9$ Гц, в жидкостях и твердых телах граничная частота достигает 10^{12} – 10^{13} Гц. В зависимости от длины волны и частоты УЗ обладает различными специфическими особенностями излучения, приема, распространения и применения, поэтому область УЗ-х частот подразделяют на три области:

- низкие УЗ частоты ($1,5 \cdot 10^4$ – 10^5 Гц);
- средние (10^5 – 10^7 Гц);
- высокие (10^7 – 10^9 Гц).

Упругие волны с частотами 10^9 – 10^{13} Гц принято называть гиперзвуком.

Специфические особенности ультразвука

Хотя физическая природа УЗ и определяющие его распространение основные законы те же, что и для звуковых волн любого диапазона частот, он обладает рядом специфических особенностей. Эти особенности обусловлены относительно высокими частотами УЗ.

Малость длины волны определяет *лучевой характер* распространения УЗ-х волн. Вблизи излучателя волны распространяются в виде пучков, поперечный размер которых сохраняется близким к размеру излучателя. Попадая на крупные препятствия, такой пучок (УЗ луч) испытывает отражение и преломление. При попадании луча на малые препятствия возникает рассеянная волна, что позволяет обнаруживать в среде малые неоднородности (порядка десятых и сотых долей мм). Отражение и рассеяние УЗ на неоднородностях среды позволяют формировать в оптически непрозрачных средах

звуковые изображения предметов, используя звуковые фокусирующие системы, подобно тому, как это делается с помощью световых лучей.

Фокусировка УЗ позволяет не только получать звуковые изображения (системы звуковидения и акустической голографии), но и *концентрировать* звуковую энергию. С помощью УЗ-х фокусирующих систем можно формировать заданные *характеристики направленности* излучателей и управлять ими.

Периодическое изменение показателя преломления световых волн, связанное с изменением плотности в УЗ волне, вызывает *дифракцию света на ультразвуке*, наблюдаемую на частотах УЗ мегагерцового-гигагерцового диапазона. УЗ волну при этом можно рассматривать как дифракционную решетку.

Важнейшим нелинейным эффектом в УЗ поле является *кавитация* – возникновение в жидкости массы пульсирующих пузырьков, заполненных паром, газом или их смесью. Сложное движение пузырьков, их схлопывание, слияние друг с другом и т.д. порождают в жидкости импульсы сжатия (микроударные волны) и микропотоки, вызывают локальное нагревание среды, ионизацию. Эти эффекты оказывают влияние на вещество: происходит разрушение находящихся в жидкости твердых тел (*кавитационная эрозия*), возникает перемешивание жидкости, инициируются или ускоряются различные физические и химические процессы. Изменяя условия протекания кавитации, можно усиливать или ослаблять различные кавитационные эффекты, например с ростом частоты УЗ увеличивается роль микропотоков и уменьшается кавитационная эрозия, с увеличением давления в жидкости возрастает роль микроударных воздействий. Увеличение частоты приводит к повышению порогового значения интенсивности, соответствующей началу кавитации, которое зависит от рода жидкости, ее газосодержания, температуры и т.д. Для воды при атмосферном давлении оно обычно составляет 0,3–1,0 Вт/см². Кавитация – сложный комплекс явлений. УЗ волны, распространяющиеся в жидкости, образуют чередующиеся области высоких и низких давлений, создающих зоны высоких сжатий и зоны разрежений. В разреженной зоне гидростатическое давление понижается до такой степени, что силы, действующие на молекулы жидкости, становятся больше сил межмолекулярного сцепления. В результате резкого изменения гидростатического равновесия жидкость «разрывается», образуя многочисленные мельчайшие пузырьки газов и паров. В следующий момент, когда в жидкости наступает период высокого давления, образовавшиеся ранее пузырьки схлопываются. Процесс схлопывания пузырьков сопровождается образованием ударных волн с очень большим местным мгновенным давлением, достигающим нескольких сотен атмосфер.

Взаимодействие ультразвуковых волн со средой

Если среда, в которой происходит распространение ультразвука, обладает вязкостью и теплопроводностью или в ней имеются другие процессы внутреннего трения, то при распространении волны происходит *поглощение звука*, т.е. по мере удаления от источника амплитуда ультразвуковых колебаний становится меньше, так же как и энергия, которую они несут. Среда, в которой распространяется ультразвук, вступает во взаимодействие с проходящей через него энергией и часть ее поглощает. Преобладающая часть поглощенной энергии преобразуется в тепло, меньшая часть вызывает в передающем веществе необратимые структурные изменения. Поглощение является результатом трения частиц друг об друга, в различных средах оно различно. Поглощение зависит также от частоты ультразвуковых колебаний. Теоретически, поглощение пропорционально квадрату частоты.

Величину поглощения можно характеризовать *коэффициентом поглощения*, который показывает, как изменяется интенсивность ультразвука в облучаемой среде. С ростом частоты он увеличивается. Интенсивность ультразвуковых колебаний в среде

уменьшается по экспоненциальному закону. Этот процесс обусловлен внутренним трением, теплопроводностью поглощающей среды и ее структурой. Его ориентировочно характеризует величина полупоглощающего слоя, которая показывает, на какой глубине интенсивность колебаний уменьшается в два раза (точнее, в 2,718 раза или на 37%). По Пальману, при частоте 0,8 МГц средние величины полупоглощающего слоя для некоторых тканей таковы: жировая ткань – 6,8 см; мышечная – 3,6 см; жировая и мышечная ткани вместе – 4,9 см. С увеличением частоты ультразвука величина полупоглощающего слоя уменьшается. Так, при частоте 2,4 МГц, интенсивность ультразвука, проходящего через жировую и мышечную ткани, уменьшается в два раза на глубине 1,5 см.

Кроме того, возможно аномальное поглощение энергии ультразвуковых колебаний в некоторых диапазонах частот – это зависит от особенностей молекулярного строения данной ткани. Известно, что $\frac{2}{3}$ энергии ультразвука затухает на молекулярном уровне и $\frac{1}{3}$ на уровне микроскопических тканевых структур.

Под *глубиной проникновения* ультразвука понимают глубину, при которой интенсивность уменьшается на половину. Эта величина обратно пропорциональна поглощению: чем сильнее среда поглощает ультразвук, тем меньше расстояние, на котором интенсивность ультразвука ослабляется наполовину.

Если в среде имеются неоднородности, то происходит *рассеяние* звука, которое может существенно изменить простую картину распространения ультразвука и, в конечном счете, также вызвать затухание волны в первоначальном направлении распространения.

Так как акустическое сопротивление мягких тканей человека ненамного отличается от сопротивления воды, можно предполагать, что на границе раздела сред (эпидермис-дерма-фасция-мышца) будет наблюдаться *преломление* ультразвуковых лучей.

На явлении *отражения* основана ультразвуковая диагностика. Отражение происходит в приграничных областях кожи и жира, жира и мышц, мышц и костей. Если ультразвук при распространении наталкивается на препятствие, то происходит отражение, если препятствие мало, то ультразвук его как бы обтекает. Неоднородности организма не вызывают значительных отклонений, так как по сравнению с длиной волны (2 мм) их размерами (0,1–0,2 мм) можно пренебречь. Если ультразвук на своем пути наталкивается на органы, размеры которых больше длины волны, то происходит преломление и отражение ультразвука. Наиболее сильное отражение наблюдается на границах кость – окружающие ее ткани и ткани – воздух. У воздуха малая плотность и наблюдается практически полное отражение ультразвука. Отражение ультразвуковых волн наблюдается на границе мышца-надкостница-кость, на поверхности полых органов.

Если при распространении ультразвуковых волн в среде не происходит их отражения, образуются *бегущие* волны. В результате потерь энергии колебательные движения частиц среды постепенно затухают, и чем дальше расположены частицы от излучающей поверхности, тем меньше амплитуда их колебаний. Если же на пути распространения ультразвуковых волн имеются ткани с разными удельными акустическими сопротивлениями, то в той или иной степени происходит отражение ультразвуковых волн от пограничного раздела. Наложение падающих и отражающихся ультразвуковых волн может приводить к возникновению *стоячих* волн. Для возникновения стоячих волн расстояние от поверхности излучателя до отражающей поверхности должно быть кратным половине длины волны.

Применение ультразвука

Многообразные применения УЗ, при которых используются различные его особенности, можно условно разбить на три направления. Первое связано с получением

информации посредством УЗ волн, второе – с активным воздействием на вещество и третье – с обработкой и передачей сигналов. При каждом конкретном применении используется УЗ определенного частотного диапазона.

Примером применения ультразвука можно привести эхолокацию – например, для определения геометрических параметров камер, образующихся при скважинной добыче соли (рис. 2).

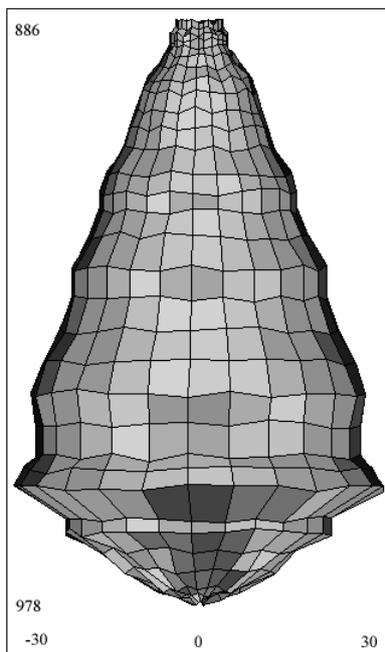


Рис. 2. Пример результатов сканирования скважины

Литература

1. Голямина И.П. Ультразвук. М.: Советская энциклопедия, 1979.
2. Кругликов В.К., Ноздрин М.А., Матвеев В.В., Тимошин П.А. Использование скважинного прибора "СКАНЕР-2000" для контроля эколого-геологического состояния подземных камер. / Экологическая геология и рациональное недропользование.- СПб.: ЦОП типографии Издательства СПбГУ, 2000. С. 286–287.
3. Стретт Дж. В. (Лорд Рэлей) Теория звука. В 2 томах. М.: Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1955.

КЛАССИФИКАЦИЯ АКУСТИЧЕСКИХ ДАТЧИКОВ

А.Л. Ткачев

Научный руководитель – д.т.н., профессор В.М. Мусалимов

В работе приведена общая классификация акустических датчиков и их технические характеристики. Классификация будет полезна студентам, аспирантам и специалистам при разработке приборов.

Введение

Для изготовления большинства акустических приборов и датчиков используются пьезоэлектрические материалы. Возбуждение и прием акустических колебаний звуковой и ультразвуковой частоты в этих устройствах происходит с помощью прямого и обратного пьезоэлектрического эффекта (пьезоэффекта).

Акустические датчики и устройства можно классифицировать по типу используемых волн и по способам применения.

Классификация по типу используемых волн

Классификация акустических датчиков по типу используемых волн приведена в табл. 1.

Класс устройства	Датчик	Рабочие частоты, МГц
Устройства на объемной акустической волне	Пьезоэлектрический резонатор с колебанием по толщине (TSM)	5 – 50
	Датчик горизонтально поляризованных акустических плоских волн (SH-APM)	
Устройства на поверхностных волнах	Датчик поверхностных акустических волн (SAW)	25 – 500
	Датчик горизонтально поляризованных поперечных поверхностных волн (SH-SAW), он же датчик поверхностной сдвиговой волны (STW)	

Таблица 1. Классификация по типу используемых волн

Устройства на объемной акустической волне. Резонатор колебания сдвига по толщине обычно состоит из толстой пластины пьезокварца АТ-среза с параллельными круговыми электродами, нанесенными на обе стороны. Результатом приложения напряжения между этими электродами становится сдвиговая деформация пьезокристалла. Это устройство известно как резонатор, потому что пьезокристалл резонирует, когда образуются электромеханические стоячие волны. Смещение достигает предельных значений на грани кристалла, что делает устройство чувствительным к поверхностному взаимодействию. В последнее время была проделана работа по созданию высокочастотных TSM резонаторов с использованием пьезоэлектрической пленки и техники объемной микрообработки кремния.

В датчике горизонтально поляризованных акустических плоских волн волна распространяется между верхней и нижней поверхностью пластины, что позволяет проводить измерения на обеих сторонах. Эти устройства используют тонкую пьезоэлектрическую подложку, или пластину, работающую как акустический волновод, который удерживает энергию между верхней и нижней поверхностями пластины. В результате обе поверхности подвергаются смещению, так что улавливание может возникнуть на любой стороне. Это

важное преимущество, так как одна сторона содержит встречно-штыревой преобразователь, который необходимо изолировать от электропроводной жидкости или газов, в то время как вторая сторона может быть использована в качестве датчика.

Устройства на поверхностных волнах. Поверхностные волны (волны Рэлея) обладают продольной и вертикальной поперечной компонентой, которая может соединяться со средой при контакте с поверхностью устройства. Такое соединение сильно влияет на амплитуду и скорость волны. Эта черта позволяет датчикам SAW напрямую оценивать массу и механические характеристики. Так как фактически вся энергия волн Рэлея заключена в пределах одной длины волны на поверхности, датчики SAW обладают наибольшей чувствительностью среди всех рассмотренных акустических датчиков.

Одним из недостатков этого устройства является то, что волны Рэлея являются поверхностными нормальными волнами, и поэтому они плохо подходят для измерения жидкостей. Когда датчик SAW вступает в контакт с жидкостью, результирующие волны сжатия вызывают существенное затухание поверхностной волны.

Датчики горизонтально поляризованных поперечных поверхностных волн используют тонкую пьезоэлектрическую подложку или пластину, работающую как акустический волновод, который удерживает энергию между верхней и нижней поверхностями пластины. В результате обе поверхности подвергаются смещению, так что улавливание может возникнуть на любой стороне.

Классификация по способам применения

Возможные способы применения акустических датчиков:

- Термодатчики
- Датчики влажности
- Подводные сонары
- Ультразвуковые сканеры
- Датчики расстояния
- Датчики вибраций
- Датчики удара
- Датчики силы
- Датчики давления
- Датчики крутящего момента
- Датчики массы
- Анализаторы газа и жидкостей

Термодатчик. Температурная зависимость некоторых материалов, из которых изготавливают пьезоэлектрическую подложку, зависит от угла среза и направления распространения волны. Правильным подбором материала, значений угла среза и направлением волны можно минимизировать температурный эффект первого порядка. Если максимизировать этот эффект, то можно сконструировать беспроводной акустический датчик температуры.

Термодатчики на базе генераторов линии запаздывания SAW обладают миллиградусным разрешением, хорошей линейностью и низким запаздыванием. Они к тому же весьма чувствительны к нагрузке массы от собственного веса и поэтому должны быть герметично упакованы. Преимущество термодатчиков также состоит в том, что они не требуют элементов и являются беспроводными, что делает их пригодными для использования в удаленных местах.

Датчики влажности. Если датчик на SAW подвергается температурному контролю и прямому воздействию окружающей среды, то вода будет конденсироваться на нем при температуре конденсации, что делает его эффективным датчиком точки конденсации. Из датчиков акустических волн с упругим гигроскопическим полимерным покрытием получают отличные датчики влажности. Три рабочих механизма составляют чувствительность датчика: нагрузка от собственной массы, электроакустические эффекты и вязкоэластичные эффекты. Каждый из этих механизмов можно эффективно контролировать и производить дешевый, точный датчик влажности.

Класс датчика	Рез. частота, kHz	Диапазон измерения	Разрешение	Чувствительность, ppm/%	Погрешность, %
Термодатчики	50 – 120	-200 – 1000, °C	нет данных	нет данных	0,15 – 0,5
Датчики отн. влажности	50 – 800	0 – 100, %	±0,025, °C	1,4	5

Таблица 2. Характеристики некоторых термодатчиков и датчиков влажности

Подводные сонары и ультразвуковые сканеры. В основе работы этих приборов лежит принцип импульсной локации, реализуемой путем возбуждения пьезоэлемента акустического датчика электрическим импульсом и послышки за счет этого короткого акустического импульса в виде узкого пучка (луча) энергии ультразвуковой частоты; приема тем же пьезоэлементом датчика отраженных акустических импульсов и обратного преобразования их в электрические сигналы; усиления частотной фильтрации и детектирования эхосигналов с последующей визуализацией их на экране видеомонитора в системе координат «глубина-время» в виде яркостных отметок.

Датчики расстояния. Принцип действия датчиков расстояния основан на использовании метода импульсного зондирования ультразвуком с временной и частотной селекцией, который заключается в сравнении времени прохождения ультразвукового сигнала через рабочий зазор датчика, заполненный контролируемой средой или газом, с выработанным в самом сигнализаторе временным интервалом.

Датчики вибраций и удара. Действие основано на регистрации ультразвуковых волн, возникающих при воздействии на элементы конструкций периметра здания или помещения. Электрический сигнал, пропорциональный уровню вибрации, усиливается и обрабатывается по специальному алгоритму, чтобы отделить разрушающее воздействие от помехового сигнала. Основными характеристиками таких извещателей является чувствительность к вибрации. Используются как пассивные, так и активные ультразвуковые датчики. Пассивные регистрируют ультразвуковые колебания воздуха или другой среды на частотах 18–60 кГц. Активные датчики бывают двух разновидностей. В первой используются элементы конструкций контролируемых объектов. При таком воздействии, как, например, разбивание оконного стекла, нарушается связь передатчика и приемника через стекло и происходит срабатывание датчика. Активные ультразвуковые датчики второго вида регистрируют изменение частоты (излучаемого датчиком сигнала) в контролируемой среде, например, при открывании замка или отпиливании металлической решетки.

Класс датчика	Рез. частота, kHz	Чувствительность, dB	Направленность, deg	Раб. темп., °C	Дальность, м	Разрешение, мм
Подводные сонары	Около 200	нет данных	10 – 20	нет данных	нет данных	-
Ультразвуковые сканеры	от 40	63 - 180	30 – 110	-40 – 85	0,2 – 6	около 9
Датчики расстояния	75 – 400	47 – 74	7 – 20	-30 – 70	0,06 – 5	1 – 4

Таблица 3. Характеристики подводных сонаров, ультразвуковых сканеров и датчиков расстояния

Датчики силы и давления. На скорости SAW сильно влияет напряжение, подаваемое на пьезоэлектрическую подложку, по которой распространяется волна. Таким

образом, датчики силы давления на SAW созданы путем превращения устройства в диафрагму. Частоты SAW изменяется вместе с напряжением. Когда диафрагма прогибается под давлением, датчик SAW изменяет данные на выходе.

Датчики пассивны (не требуют элементов питания), беспроводные, дешевые, выносливые, очень компактные и легкие.

Датчики крутящего момента. Если устройство на SAW неподвижно прикреплено к плоскому месту на валу и вал подвергается крутящему моменту, этот крутящий момент подвергает напряжению датчик и превращает его в беспроводной, пассивный, легковесный датчик крутящего момента. Если вал вращается в одну сторону, тогда датчик находится в состоянии натяжения, при вращении в другом направлении датчик находится в состоянии сжатия. В практическом применении два датчика вращающего момента используются таким образом, что их центральные (осевые) линии находятся под прямым углом друг к другу. Таким образом, когда один датчик находится в состоянии сжатия, другой – в состоянии натяжения. Так как оба датчика находятся при одной температуре, сумма двух сигналов минимизирует любые эффекты ухода параметров под влиянием температуры. Добавление второй SAW эффективно минимизирует температурные колебания датчика давления на SAW.

По сравнению с другими датчиками крутящего момента, включая резистивные датчики сопротивления, оптические преобразователи, торсионы, датчик на SAW является дешевым, обладает высокой надежностью и к тому же беспроводной.

Класс датчика	Рез. частота, kHz	Диапазон раб. частот, Hz	Динамич. диапазон	Раб. темп., °C	Погрешность, %
Датчики вибраций	5 – 120	0,1 – 4*10 ⁴	0,1 – 10 ⁵ , м/с ²	-50 – 400	до 8
Датчики удара	66 – 180	-	нет данных	-10 – 50	нет данных
Датчики силы	30 – 200	0,01 – 3*10 ⁴	0,4 – 10 ⁴ , Н	-40 – 400	до 2
Датчики давления	30 - 200	0,1 – 2*10 ⁴	0,05 – 20, мПа	0 – 400	нет данных
Датчики крутящего момента	от 6	нет данных	0 – 100, Н*м	-60 – 250	±0,5

Таблица 4. Характеристики некоторых датчиков силы, вибраций, давления и удара

Датчики массы. Датчики на SAW наиболее чувствительны к нагрузке от собственной массы, что можно использовать при создании датчика частиц и датчика толщины пленки. Если датчик покрыт адгезивом, то он становится датчиком частиц: любая частица, попадающая на поверхность, там и остается и изменяет распространение волны. Датчики частиц используются в производственных помещениях, мониторах качества воздуха, и мониторах атмосферы.

Класс датчика	Рез. частота, kHz	Раб. темп., °C	Раб. влажн., %	Чувствительность, мг/м ³
Датчики массы	15 – 40	нет данных	нет данных	0,0003 – 10
Анализаторы газа	40 – 150	5 – 90	0 – 98	нет данных

Таблица 5. Характеристики некоторых датчиков массы и анализаторов газа

Датчик толщины работает в основном по тому же принципу, что и датчик частиц, за исключением того, что на нем нет покрытия. Измеряемый сдвиг частоты пропорцио-

нален массе осажденной пленки, так что датчик получает данные по толщине путем измерения плотности пленки и акустического сопротивления. Наиболее доступные в продаже датчики толщины базируются на TSM резонаторах. Не являясь такими же чувствительными, как датчики на SAW, эти устройства, тем не менее, легки в использовании и обладают достаточной чувствительностью.

Анализаторы газов. Принцип действия большинства датчиков основывается на чувствительности масс-детектора, во взаимодействии с химически избирательным покрытием, которое абсорбирует заданные испарения, что приводит к увеличению нагрузки от собственного веса устройства.

Когда несколько датчиков на SAW, каждый с уникальным химическим специфичным покрытием, размещены в определенном порядке, тогда каждый из них будет давать различный результат при воздействии данного испарения. Программные средства по распознаванию структур допускают разнообразный список легкоиспаряющихся органических соединений, которые могут быть обнаружены и идентифицированы, что образует очень мощный химический анализатор.

Заключение

Датчики на акустических волнах являются универсальными устройствами. Они конкурентоспособны по цене, прочны, очень чувствительны, и надежны, к тому же некоторые из них являются беспроводными и/или не требуют элементов питания. Беспроводные датчики весьма удобны для использования их на движущихся объектах, например, для измерения давления покрышек на машинах или крутящего момента вала. Датчики, которым не требуется энергия, желательны для удаленного наблюдения за химическими испарениями, влажностью и температурой. Другие применения включают измерение силы, ускорения, ударной волны, угловой скорости и расстояний.

В общем случае чувствительность акустических датчиков пропорциональна количеству энергии, которая возникает на пути распространения волны. Датчики объемной акустической волны рассеивают энергию с поверхности через вещество основы на другую поверхность. Распределение энергии минимизирует интенсивность энергии на поверхности, на которой происходит измерение. Датчики SAW наоборот фокусируют энергию на поверхности, что делает их более чувствительными.

Литература

1. Куафье Ф. Взаимодействие работа с внешней средой. М.: Мир, 1985. 286 с.
2. Вардан В., Винной К., Джозе Л. ВЧ МЭМС и их применение. М.: Техносфера, 2004. 528 с.
3. Дышко А., Панич А. Пьезоэлектрические датчики уровня жидких сред. // ЭЛЕКТРОНИКА: Наука, Технология, Бизнес. 2003. №5. С. 47–48.
4. <http://www.roboclub.ru>
5. <http://www.pcb.com>
6. <http://www.piezoelectric.ru>
7. <http://www.murata.com>
8. <http://www.platan.ru>
9. <http://www.kistler.com>

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ МАГНИТОСТАТИЧЕСКОГО ВАРИОМЕТРА

П.А. Сергушин

Научный руководитель – д.т.н., профессор В.М. Мусалимов

В работе описана конструкция и принцип действия реального магнитостатического вариометра, составлена его математическая модель и исследованы реакции системы на единичные воздействия. Получены АЧХ и ФЧХ системы.

Введение

Магнитостатическими вариометрами называют приборы для измерения отклонений компонент вектора магнитной индукции внешнего магнитного поля. В настоящее время есть данные по нескольким устройствам, схожим по своему принципу действия с магнитовариометром статического типа.

Н.Ф. Кротевич [1] описал следующую конструкцию магнитовариометра: магнит подвешивается на упругом подвесе или на растяжках, которые служат осью вращения магнита. С магнитом жестко связано зеркало, позволяющее с помощью светового луча делать либо непосредственный отсчет отклонений магнита, либо преобразовывать отклонения магнита в электрические сигналы в схемах с фотоэлектрическим преобразованием.

Известное условие равновесия магнита с моментом M , подвешенного на упругой нити как на оси, которая закручена на угол Θ , имеет вид

$$[\vec{M} \vec{H}] = G\Theta, \quad (1)$$

Здесь \vec{H} – вектор напряженности магнитного поля в плоскости вращения магнита; G – удельный противодействующий момент нити (или коэффициент кручения). Описанная конструкция реализована, например, в магнитометре ГГ-42 [1].

В лаборатории наземных геомагнитных исследований СПбФ ИЗМИРАН выпускается устройство, позволяющее измерять характеристики магнитного поля Земли, а также других внешних магнитных полей. Прибор работает по тому же принципу, что и предложенный Н.Ф. Кротевичем, является трехкомпонентным и измеряет, соответственно, три составляющих вектора магнитной индукции [2].

В данной работе исследована динамика магнитостатического вариометра GI-MTS-1, разработанного и выпускаемого СПбФ ИЗМИРАН. Для этого выведено дифференциальное уравнение движения чувствительного элемента системы, построена передаточная функция. Стандартными средствами пакета прикладных программ Matlab исследованы переходные и частотные характеристики системы.

Область применения магнитометров

Магнитные измерения важны практически для любой сферы человеческой деятельности – приборостроение, машиностроение, медицина, геофизика, геология, неразрушающий контроль и ряд других.

Магнитометры применяются для:

- обеспечения службы непрерывных магнитовариационных наблюдений на стационарных магнитных обсерваториях;
- обеспечения наземных и морских магнитотеллурических исследований глубинного строения Земли;
- исследования свойств магнитных и слабомагнитных веществ, материалов и горных пород и их поиск в земной коре;

- проведения стационарных магнитовариационных измерений в связи с проблемой прогноза землетрясений;
- создания лабораторных установок для ознакомления учащихся с явлением магнетизма;
- составления карт биений человеческого сердца;
- навигации;
- контроля намагниченности деталей и оборудования на производстве.

Принцип работы магнитоэлектронного вариометра

На рис. 1 приведена принципиальная схема магнитоэлектронного вариометра.

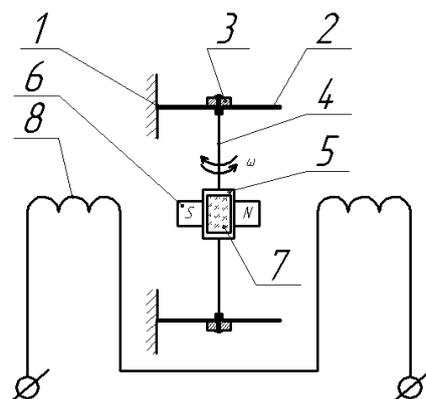


Рис. 1. Принципиальная схема магнитоэлектронного вариометра: 1 – стойка, 2 – плоские пружины, 3 – втулки, 4 – кевларовая нить, 5 – втулка, 6 – магнит, 7 – зеркало, 8 – катушки индуктивности

Чувствительный элемент (ЧЭ) представляет собой магнит 6, подвешенный между плоскими пружинами 2 на нерастяжимой нити 4, закрепленной во втулках 3 [2, 3]. Под действием изменяющегося внешнего магнитного поля происходит переориентация магниточувствительной системы. На втулке 5 жестко закреплено зеркало, на которое с излучающего светодиода падает оптическое излучение. Отраженный луч принимается фотодиодами. С фотодиодов снимается разность фототоков, в предусилителе датчика происходит фильтрация сигнала по низким частотам, затем производится усиление и распределение сигнала – на АЦП и в цепь обратной связи. Катушки индуктивности (обратной связи) создают магнитное поле, препятствующее повороту магнита.

Датчики углового положения магниточувствительной системы включены по дифференциальной схеме.

Обратная связь по магнитному полю

Особенностью обратной связи по магнитному полю является то, что сигнал с выхода поступает в цепь обратной связи в виде напряжения или тока и подается на вход в виде магнитного поля. Для преобразования электрического сигнала в магнитный используется катушка Гельмгольца, которая включается в цепь обратной связи. Таким образом, обратная связь охватывает все элементы микровариометра, включая датчик. Достоинства такого способа введения обратной отрицательной связи – следующие: а) уменьшается влияние нестабильности элементов; б) датчик, находящийся в поле обратной отрицательной связи, приобретает устойчивое равновесие [1].

Математическая модель магнитоэлектрического вариометра

Так как в принцип работы магнитоэлектрического вариометра входит преобразование механической энергии в электрическую с дополнительным применением отрицательной обратной связи, то можно сказать, что система является электромеханической. Упрощенная электромеханическая схема датчика с применением обратной связи по магнитному полю приведена на рис. 2.

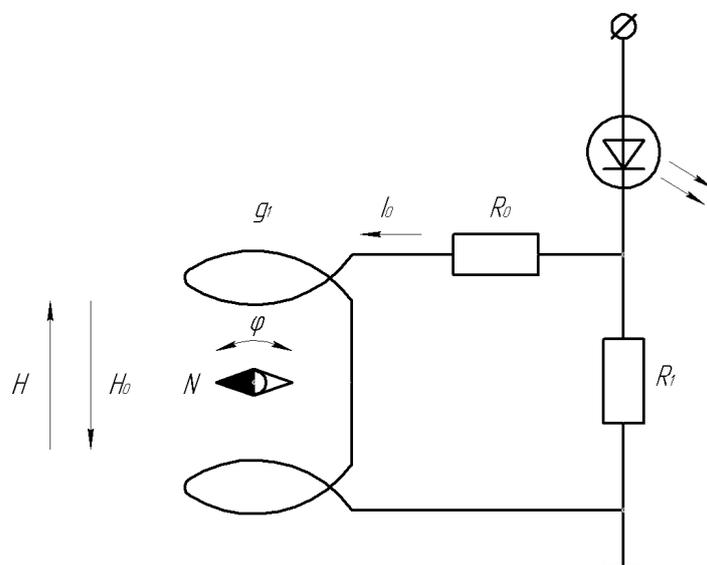


Рис. 2. Упрощенная электромеханическая схема магнитоэлектрического вариометра

Напряжение выходного сигнала снимается с сопротивления R_1 и подается в цепь R_0, g_1 . Ток через катушку g_1 может регулироваться сопротивлением R_0 . Если I_0 – ток в катушке g_1 , то магнитное поле обратной связи будет равно $H_0 = g_1 I_0$. g_1 – постоянная катушки в точке, где находится магнит датчика (обычно магнит располагается в центре катушки) [1].

Уравнение колебаний системы представлено выражением

$$\ddot{\varphi} + 2h\dot{\varphi} + \omega_0'^2\varphi = \frac{M}{J}H. \quad (2)$$

Здесь: φ – угол поворота магнита; $\dot{\varphi}$ – угловая скорость магнита; $\ddot{\varphi}$ – угловое ускорение магнита; $\omega_0' = \sqrt{\omega_0^2 + kg_1 \frac{R_1}{R_1 + R_0} \frac{M}{J}}$ – собственная частота системы при учете

обратной связи, рад/с; $\omega_0 = \sqrt{\frac{G}{J}}$ – собственная частота разомкнутой системы, рад/с;

$J = \frac{m \cdot l^2}{12}$ – момент инерции магнита относительно поперечной оси, кг·м²; $M = Br \cdot V$

– магнитный момент магнита Тл·м³; $2h = \frac{P}{J}$ – коэффициент электромагнитного демп-

фирования; $k = \frac{I}{\varphi}$ – коэффициент пропорциональности между углом отклонения маг-

нита φ и изменением тока на выходе микровариометра I ; $m = \rho \cdot V$ – масса магнита;

$V = a \cdot b \cdot l$ – объем магнита, м³; a, b, l – соответственно: высота, ширина и длина маг-

нита, м; g_1 – постоянная катушки обратной связи; H – величина внешнего магнитного

поля, Тл; Br – остаточная намагниченность магнита (SmCo), Тл; G – удельный противодействующий момент нити; P – степень успокоения подвижной системы;

Динамические характеристики магнитоэлектрического вариометра

Оценим качество переходных процессов магнитоэлектрического вариометра по виду отклика на единичное ступенчатое и импульсное воздействия [4, 5]. Для этого воздействуем на нее соответствующими входными сигналами.

Получим из выражения (2) передаточную функцию (3).

$$W = \frac{MH}{J} \frac{1}{s^2 + 2hs + \omega_0'^2}; \quad (3)$$

Здесь $s = \frac{d}{dt}$ – оператор Лапласа.

Исходные данные для моделирования (исходный текст программы в ППП Matlab):

```
P=1e-6; %коэффициент успокоения;
G=1e-7; %коэффициент кручения;
rho=8.5e3; %плотность материала магнита SmCo, кг/м3;
l=0.004; %длина магнита, м;
a=0.002; %ширина магнита, м;
b=0.002; %высота магнита, м;
Br=0.9; %остаточная намагниченность магнита SmCo, Тл;
H=1; %величина внешнего магнитного поля, Тл;
g1=1; %коэффициент катушки ОС;
R1=10; %сопротивление, включенное параллельно цепи катушки, Ом;
R0=3; %сопротивление в цепи катушки, Ом;
k=1; %коэффициент пропорциональности между углом поворота магнита и током;
V=a*b*l; %объем магнита м^3;
m=rho*V; %масса магнита, кг;
M=Br*V; %магнитный момент ЧЭ;
J=(m*(l^2))/12; %момент инерции;
h=P/(2*G); % 2h - коэффициент электромагнитного демпфирования;
omega0=sqrt(G/J); %циклическая частота собственных колебаний;
omega0_ =sqrt(omega0^2+k*g1*R1*M/((R1+R0)*J)); %значение циклической частоты собственных колебаний при учете обратной связи по магнитному полю;
W=tf([M*N/J],[1 2*h omega0_^2]); %передаточная функция системы;
t=0:0.001:1.2;
step(W,'k',t); grid on;
impulse(W,'k',t); grid on;
bode(W,'k'); grid on;
```

На рис. 3 показан результат воздействия на передаточную функцию команды ППП Matlab step(W), формирующей ступенчатый единичный сигнал, подаваемый на вход системы.

Время переходного процесса $t_p = 0.56c$.

$$\text{Перерегулирование } \sigma = \frac{A_2}{A_1} \cdot 100\% = \frac{0.130 - 0.124}{0.137 - 0.130} \cdot 100\% = 85.7\%.$$

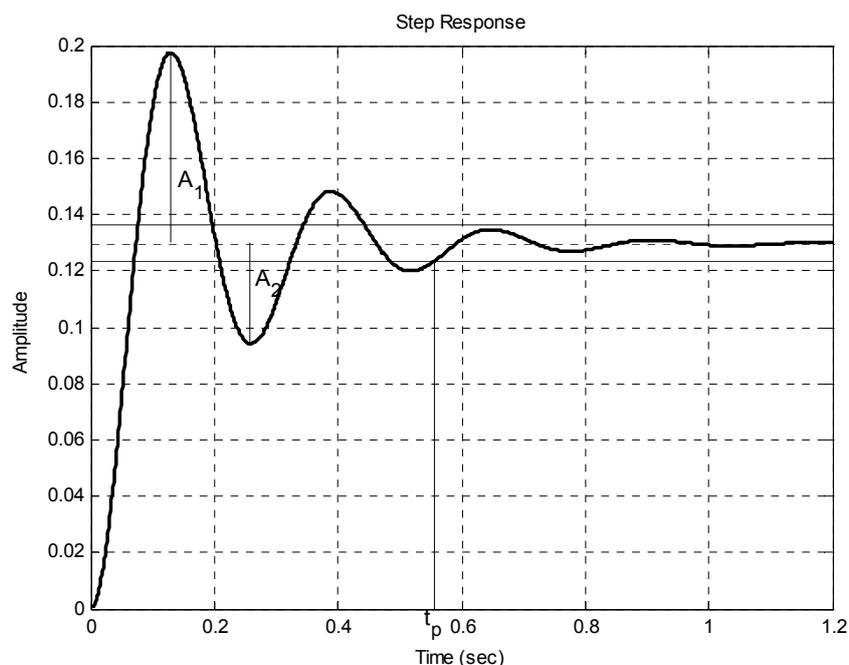


Рис. 3. Реакция магнитовариометра на ступенчатое единичное воздействие

На рис. 4. показан результат воздействия на передаточную функцию команды ППП Matlab `impulse(W)`, формирующей единичный импульс, подаваемый на вход системы.

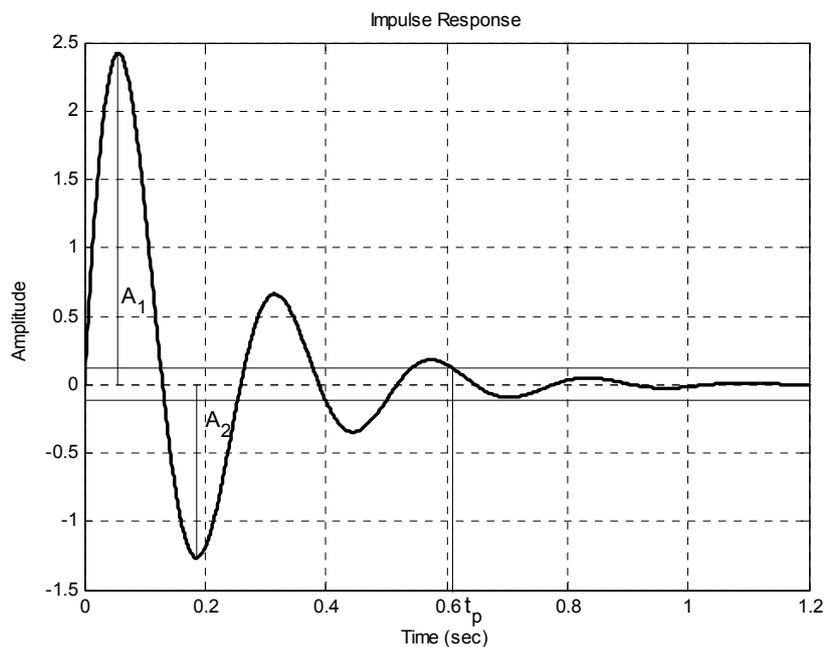


Рис. 4. Реакция магнитовариометра на единичное импульсное воздействие

Время переходного процесса $t_p = 0.61c$.

$$\text{Перерегулирование } \sigma = \frac{A_2}{A_1} \cdot 100\% = \frac{1.266}{2.420} \cdot 100\% = 52.3\%.$$

На рис. 5 при помощи команды ППП Matlab `bode(W)` в получены АЧХ и ФЧХ системы логарифмическом масштабе.

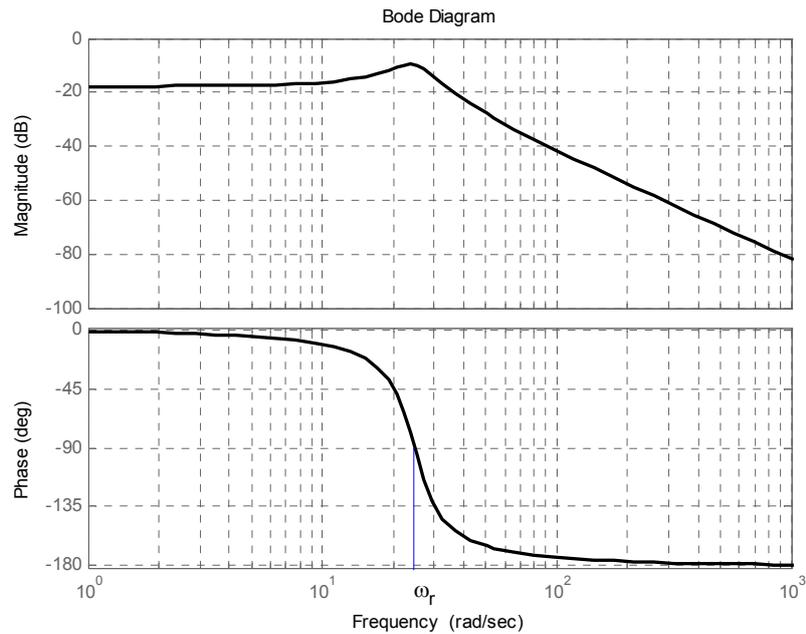


Рис. 5. Амплитудно-частотная и фазово-частотная характеристики магнитовариометра
Здесь $\omega_r = 24.66 \text{ рад/с} = 3.92 \text{ Гц}$ – резонансная частота системы.

Таким образом, при проектировании магнитометрической системы целесообразно выбирать рабочий диапазон частот подобного рода устройств 0.01–3 Гц.

Заключение

В результате выполнения данной работы были получены следующие результаты:

- построена математическая модель магнитостатического вариометра;
- исследованы реакции системы на калиброванные воздействия;
- получены частотные характеристики системы.

Литература

1. Кротевич Н.Ф. Магнитные микровариационные измерения и аппаратура для магнитотеллурических исследований. Новосибирск: Наука, Сибирское отделение, 1972.
2. Геофизический комплекс GI-MTS-1. Техническое описание. // СПб: СПбФ ИЗМИРАН, 2005. С. 1–15.
3. Сергушин П.А. Магнитовариометр как средство измерения магнитных полей // Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. 2006. №28. С. 173–175.
4. Ерофеев А.А. Теория автоматического управления: Учебник для вузов. 2-е изд. доп. и перераб. СПб.: Политехника, 2002. 302 с.
5. Бесекерский В.А., Попов Е.П. Теория систем автоматического регулирования. М.: Наука, 1975. 768 с.

СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ СИСТЕМЫ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ СЕПАРАЦИИ И ПЕРЕГРЕВА ВЛАЖНОПАРОВЫХ ТУРБИН АЭС: АНАЛИЗ ТЕПЛОГИДРАВЛИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В КОНСТРУКЦИЯХ СЕПАРАТОРОВ-ПАРОПЕРЕГРЕВАТЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ ОПЫТА ЭКСПЛУАТАЦИИ

М.Ю. Егоров

(Санкт-Петербургский государственный политехнический университет)

Научный руководитель – д.т.н., профессор Е.Д. Федорович

(Научно-производственное объединение по исследованию и проектированию энергетического оборудования им И.И. Ползунова)

Рассмотрены теплогидравлические процессы в промежуточных сепараторах-пароперегревателях СПП-500 и СПП-500-1 на основе длительного опыта эксплуатации СПП на энергоблоках с реакторами РБМК. Даны рекомендации о перспективности использования конструктивных решений, заложенных в рассмотренные аппараты.

Введение

В ближайшие десятилетия намечено значительное развитие атомной энергетики в Российской Федерации [1]. Предполагается рост единичной мощности энергоблоков и сооружение новых АЭС. Все большее значение приобретает повышение эффективности и надежности работы оборудования. Для этого важно осмысление накопленного опыта разработки и эксплуатации существующего оборудования.

Производство электроэнергии осуществляется, в частности, на энергоблоках с ядерными реакторами большой мощности канального типа РБМК. Теплоноситель – вода – нагревается в активной зоне реактора до температуры насыщения и частично испаряется. Пароводяная смесь поступает в барабаны-сепараторы, где происходит разделение насыщенной воды и пара. Пар направляется в турбоустановку (ТУ). В ТУ тепловая энергия пара превращается в механическую работу и далее преобразуется в электрическую энергию.

Экономичность АЭС во многом определяется надежной работой оборудования ТУ в течение длительного времени. В ТУ насыщенного пара одной из важнейших является задача уменьшения влагосодержания в проточной части. Влияние влажности отрицательно сказывается на экономичности – увеличение средней влажности на 1 % приводит к уменьшению внутреннего относительного КПД ТУ на величину ~ 1 % [2]. Влажность пара снижает надежность работы вследствие эрозии лопаток ТУ, а, следовательно, и длительность межремонтного периода. Для поддержания необходимого уровня надежности в ТУ мощностью свыше 200 МВт АЭС сочетают промежуточную – между цилиндром высокого давления (ЦВД) и низкого давления (ЦНД) – сепарацию влаги из пара с двухступенчатым перегревом отборным и острым паром. В целях компактности, снижения стоимости и уменьшения потерь давления сепарация и перегрев осуществляются в единых двухфункциональных интегральных аппаратах-сепараторах-пароперегревателях (СПП).

В настоящее время на АЭС с РБМК-1000 для осушки и перегрева применяются аппараты типа СПП-500-1. Опыт эксплуатации этих аппаратов, рассмотренный, в частности в [3], показал недостаточный уровень надежности СПП-500-1 из-за возможного проноса влаги через сепаратор, последующего эрозионного износа, вибраций и нестационарных термических напряжений в элементах аппарата. Необходимость значительного восстановительного ремонта СПП-500-1 отмечена в [4]. Анализ экспериментальных данных [5] показывает, что в определенных условиях СПП-500-1 работают с частичным или полным выключением поверхности нагрева из-за подтопления перегревателя.

телей, имеет место пульсационный перекося температур. В [5, 6] обсуждаются причины тепловой и гидравлической разверок, их проявления в виде подтопления перегревателей, пульсаций давлений, расходов и температур потоков и металла в трактах обеих сред. В работах [7, 8] отмечаются сложные условия пуска и прогрева СПП-500-1, невозможность ремонта перегревателя на работающей ТУ.

Применение СПП связано с капитальными затратами и снижением термического КПД цикла тепловой схемы ТУ, что подчеркнуто в [9]. Там, в частности, предлагаются изменения тепловой схемы ТУ, но игнорируется рассмотрение вопросов, связанных с обеспечением необходимого для надежной работы ТУ уровня перегрева пара. Следует иметь в виду, что при правильно выбранных параметрах (разделительное давление, температура перегрева пара, потери давления в СПП и др.) все затраты окупаются за счет уменьшения потерь от влажности в проточных частях ТУ – применение СПП повышает тепловую экономичность ТУ мощностью 500 МВт на ~ 2,3 % [10].

Конечной целью данной работы, входящей в цикл исследований по тематике СПП, является разработка предложений по совершенствованию аппаратов СПП-500-1, направленному на повышение экономичности и увеличение эффективности работы ТУ и, следовательно, энергоблока с реактором РБМК-1000 в целом. При разработке новых, модернизации существующих систем сепарации и перегрева предлагается использование имеющегося положительного опыта разработки, изготовления и эксплуатации аппаратов подобного типа. В частности, проведенный в данной работе сравнительный анализ теплогидравлических процессов в конструкциях эксплуатирующихся сегодня СПП-500-1 и эксплуатируемых ранее СПП-500 позволяет дать рекомендации о перспективности использованных конструктивных решений.

Анализ теплогидравлических процессов в конструкциях СПП-500 и СПП-500-1

В ТУ АЭС с РБМК-1000 после ЦВД пароводяная смесь дисперсно-кольцевой структуры с влажностью $y \sim 15\%$ при температуре $T \sim 137^\circ\text{C}$ и давлении $p \sim 0.34$ МПа [11] по трубопроводам подводится в СПП-500 (СПП-500-1), 500 МВт – электрическая мощность каждой из двух ТУ энергоблока электрической мощностью 1000 МВт. На рис. 1 показана схема включения СПП-500-1 в ТУ. Для СПП-500 схема аналогична.

Конструкции СПП-500 (рис. 2) и СПП-500-1 (рис. 3) включают:

- входную камеру – для приема пароводяной смеси;
- жалюзийный сепаратор – для сепарации влаги из влажного пара;
- двухступенчатый теплообменник–пароперегреватель – для осушки и перегрева нагреваемого пара (НП) до температуры, которая должна обеспечивать надежную работу ЦНД. Для перегрева используется теплота конденсации греющего пара (ГП) – отборного (из ЦВД) и острого, отбираемого перед ЦВД, см. рис. 1.

Входные камеры и сепарационные части. Во входной камере каждого аппарата влажный пар взаимодействует с поверхностями конструкций. Возникают условия для первичного отделения крупнодисперсной влаги.

В СПП-500 отделенная влага стекает по стенке корпуса и металлоконструкциям из входной камеры в кольцевой клиновидный коллектор, где под действием сил инерции при движении пароводяной смеси со скоростью $v \sim 33$ м/с и при повороте на 165° в блоке поворотных лопаток происходит отделение крупнодисперсной влаги [12]. Из коллектора СПП-500 сепарат отводится из аппарата, рис. 2. Пар с оставшейся мелкодисперсной влагой поступает в жалюзийный сепаратор.

В СПП-500-1 крупнодисперсная влага из входной камеры вместе с основным потоком влажного пара направляется в радиальные коллекторы (в виде объемных клиньев) без дренажей. Входная камера СПП-500-1 с наклонным плоским верхним днищем

не обеспечивает эффективного распределения влаги и пара по радиальным коллекторам. Эти коллекторы в силу своих конструктивных особенностей препятствуют выравниванию поступающего со скоростью $v \sim 10$ м/с из входной камеры потока влажного пара по сечению блоков жалюзийного сепаратора (даже при наличии поворотных лопаток, рис. 4). Крупнодисперсная влага из клиновых радиальных коллекторов СПП-500-1 также поступает в сепарационные блоки.

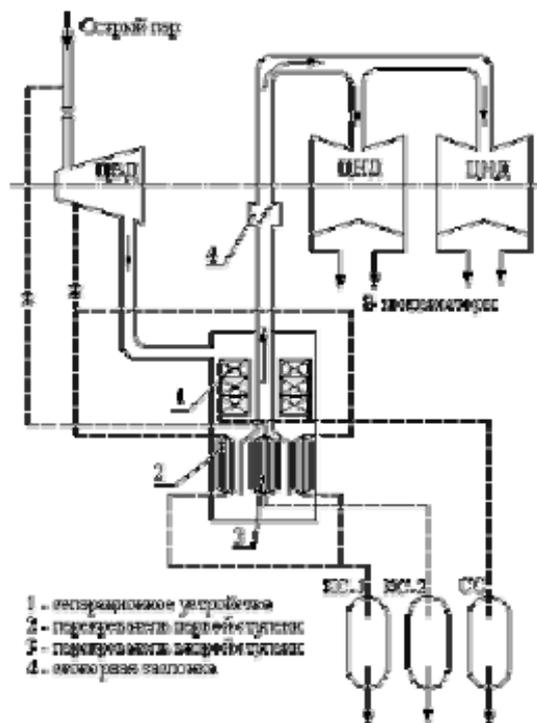


Рис. 1. Включение СПП-500-1 в схему турбины: СС – сепаратосборник, КС-1 – конденсатосборник 1 ступени, КС-2 – конденсатосборник 2 ступени

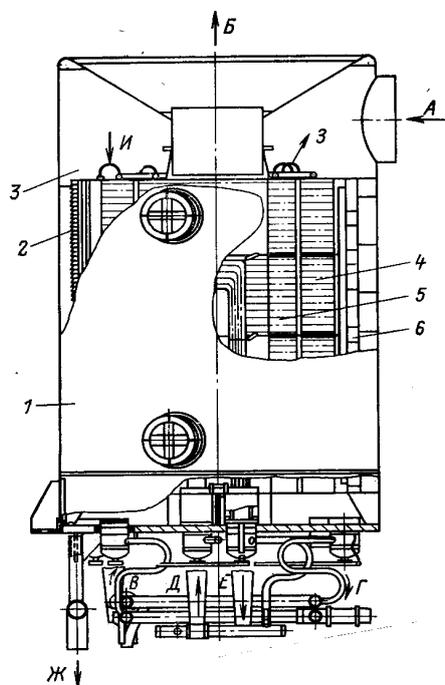


Рис. 2. Сепаратор-пароперегреватель СПП-500: 1 – корпус, 2 – направляющие лопатки, 3 – входная камера, 4 (5) – трубный пучок 1 (2) ступени, 6 – сепарационные пакеты, А – вход влажного пара, Б – выход перегретого пара, В (Д) – вход греющего пара 1 (2) ступени, Г (Е) – выход конденсата греющего пара 1 (2) ступени, Ж – отвод сепарата

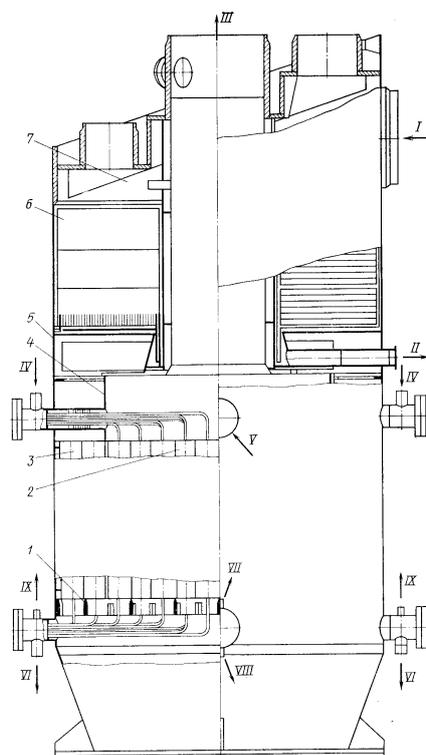


Рис. 3. Сепаратор-пароперегреватель СПП-500-1: 1 – опорная решетка модулей, 2 (3) – модули 2 (1) ступени, 4 – перегородка между модулями 1 и 2 ступеней, 5 – корпус, 6 – сепарационные пакеты, 7 – входная камера, I – вход влажного пара, II – отвод сепарата, III – выход перегретого пара, IV (V) – вход греющего пара 2 (1) ступени, VI (VII) – выход конденсата греющего пара 2 (1) ступени

В СПП-500 равномерное распределение потока влажного пара по сечению сепаратора обеспечивается с помощью двух распределенных по фронту потока гидравлических сопротивлений – блока поворотных лопаток (до сепаратора) и теплообменного пучка пароперегревателя (после сепаратора). Благодаря такому размещению сепаратора достигается приемлемая скорость влажного пара на жалюзи $v \sim 1.4$ м/с, которая в условиях отсутствия прострельных течений в каналах сепаратора (рис. 5) обеспечивает эффективное отделение мелкодисперсной влаги. Далее пар с влажностью $y \leq 1\%$ поступает в пароперегреватель [13].

В СПП-500-1 при приведенных выше входных условиях для сепарационных блоков даже при наличии двух распределенных по фронту потока гидравлических сопротивлений – блока поворотных лопаток (до сепаратора) и дырчатых листов (после сепаратора) и расчетной скорости потока $v \sim 2.1$ м/с [13] трудно прогнозировать достаточно низкую выходную влажность пара, а скорость потока влажного пара $v \sim 29$ м/с [12] в отверстиях дырчатых листов за сепараторами провоцирует концентрацию влаги на наклонных поверхностях клиновых выходных радиальных коллекторов (рис. 4) перед поступлением в пароперегреватель.

Эффективность сепарации влаги из влажного пара в сепараторах СПП-500 и СПП-500-1 оказывает значительное влияние на теплофизические процессы, протекающие в их пароперегревателях. В обоих аппаратах предусмотрен двухступенчатый перегрев пара.

Пароперегреватели. В СПП-500 нагреваемый пар последовательно перегревается в межтрубном пространстве при поперечном обтекании горизонтально расположенных коридорных пучков спиральных нержавеющей труб $\varnothing 18 \times 1.4$ мм (рис. 6).

При разработке СПП-500 и оценке интенсивности теплообмена со стороны нагреваемого пара не выполнялось оценок оптимизационного характера по влиянию геомет-

рических характеристик пучка на эффективность перегрева. На интенсивность теплообмена в коридорных пучках существенное влияние оказывает относительный продольный шаг расположения труб (по глубине пучка), составивший в данном случае $\sigma_2 = s_2 / d_{\text{нар}} = 1.11$. Имеющиеся рекомендации позволяют определять интенсивность теплообмена с инженерной точностью при шагах $\sigma_2 < 2$, а при $\sigma_2 \rightarrow 1$ (рис. 7) погрешность может достигать $\pm 50\%$ [12]. Реализованные в конструкции другие геометрические характеристики – относительный поперечный шаг $\sigma_1 = 1.14 < 1.5$ и количество рядов труб $n > 15$ в направлении потока нагреваемого пара – слабо влияют на интенсивность теплообмена [12].

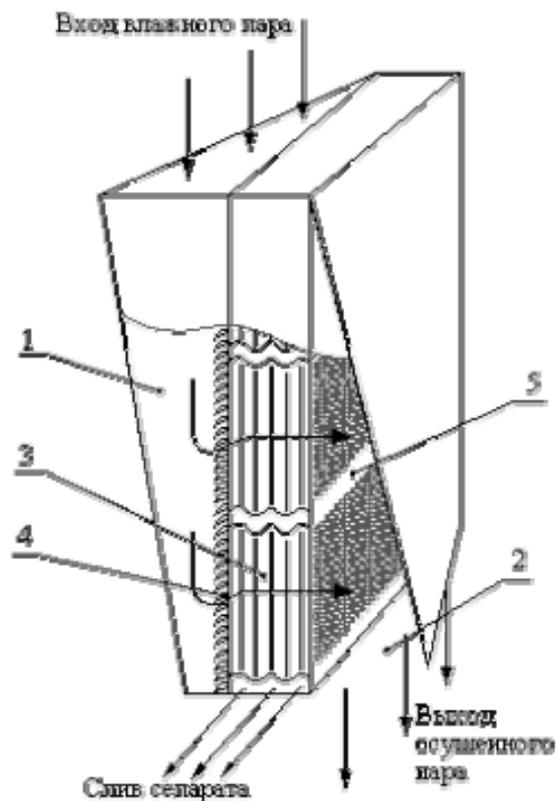


Рис. 4. Схема сепарационного блока: 1 (2) – входной (выходной) коллектор, 3 – жалюзийные пластины, 4 – направляющие лопатки, 5 – дырчатый дроссельный лист

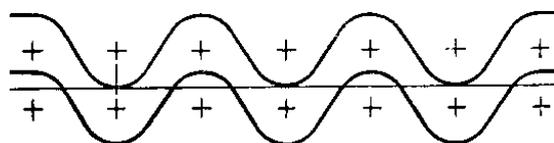


Рис. 5. Профиль жалюзи

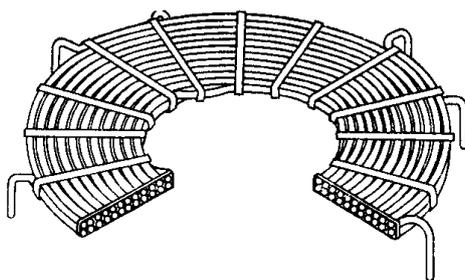


Рис. 6. Теплообменный змеевиковый спиральный пучок

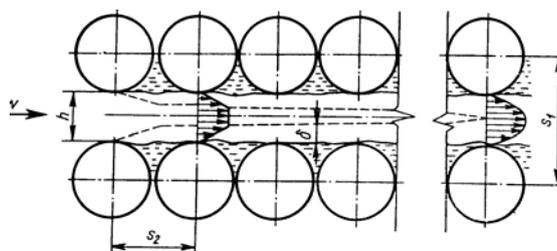


Рис. 7. Схема течения в плотном коридорном пучке

Процесс теплообмена со стороны нагреваемого пара происходит при средней скорости в узком сечении $v_{\text{нп1}} \sim 24$ м/с для 1 ступени и $v_{\text{нп2}} \sim 40$ м/с для 2 ступени, что соответствует турбулентному режиму течения с числами Рейнольдса $Re_{\text{нп1}} \sim 4.8 \times 10^4$ для 1 ступени и $Re_{\text{нп2}} \sim 5.7 \times 10^4$ для 2 ступени; числами Прандтля $Pr_{\text{нп1}} \sim 0.96$ для 1 ступени и $Pr_{\text{нп2}} \sim 0.93$ для 2 ступени [11]. При проектировании аппарата значения чисел Нуссельта $Nu_{\text{нп}}$ нагреваемого пара вычислялись из зависимости [14]

$$Nu_{\text{нп}} = 0.2 Re_{\text{нп}}^{0.64} Pr_{\text{нп}}^{0.35}.$$

Они составили $Nu_{\text{нп1}} \sim 200$ для 1 ступени и $Nu_{\text{нп2}} \sim 220$ для 2 ступени, расчетные значения коэффициентов теплоотдачи нагреваемого пара, соответственно, $\alpha_{\text{нп1}} \sim 330$ Вт/(м²°С) и $\alpha_{\text{нп2}} \sim 440$ Вт/(м²°С).

Выполненные нами расчеты, исходя из зависимостей А.А. Жукаускаса и др., рекомендуемых в литературе позднего периода [15, 16]

$$Nu_{\text{нп}} = 0.27 Re_{\text{нп}}^{0.63} Pr_{\text{нп}}^{0.36},$$

дали большие значения $Nu_{\text{нп1}} \sim 265$ для 1 ступени и $Nu_{\text{нп2}} \sim 290$ для 2 ступени. При этом коэффициенты теплоотдачи нагреваемого пара, соответственно, составили $\alpha_{\text{нп1}} \sim 440$ Вт/(м²°С) и $\alpha_{\text{нп2}} \sim 590$ Вт/(м²°С). Эти различия определяют целесообразность дополнительных исследований.

Процесс передачи тепла осуществляется при конденсации внутри горизонтальных спиральных змеевиков (рис. 6). В змеевики 1 ступени поступает греющий отборный (см. рис. 1) пар с влажностью не более $y \sim 10\%$ при температуре $T \sim 210^\circ\text{C}$ и давлении $p \sim 1.9$ МПа, а в змеевики 2 ступени поступает греющий острый (см. рис. 1) пар с влажностью не более $y \sim 0.5\%$ при температуре $T \sim 278^\circ\text{C}$ и давлении $p \sim 6.30$ МПа [13].

При движении внутри горизонтальных труб вектор ускорения силы тяжести ортогонален вектору осредненной скорости потока, что усложняет гидродинамику движения. Ввиду малости отношения внутреннего диаметра теплообменной трубы к радиусугиба змеевика влияние кривизны труб на интенсивность теплообмена со стороны греющего пара в обеих ступенях незначительно. Это позволяет несколько упростить анализ, поскольку рассмотрение гидродинамики и теплообмена двухфазного потока в горизонтальных трубах, несмотря на свою сложность, является более простой задачей. При этом важнейшим моментом анализа является определение структуры двухфазного потока, чему в известной нам литературе уделено мало внимания. На различных участках горизонтальной трубы возможно существование различных режимов течения фаз.

Рекомендуемые различными авторами эмпирические формулы дают большие различия. Так, неоднозначна зависимость среднего по длине трубы коэффициента теплоотдачи от удельного теплового потока [17]. Экспериментальные данные по теплоотдаче в горизонтальных трубах значительно расходятся между собой, противоречат друг другу. Экспериментальные данные по теплоотдаче в змеевиках крайне ограничены.

Поэтому на данном этапе мы ограничиваемся лишь приведением расчетных коэффициентов теплоотдачи в приближении полной конденсации движущегося водяного пара внутри горизонтальной трубы, которые составили $\alpha_{гп1} \sim 10^4$ Вт/(м²°С) для 1 ступени и $\alpha_{гп2} \sim 1.5 \times 10^4$ Вт/(м²°С) для 2 ступени [11].

Анализ структуры коэффициента теплопередачи k_i

$$k_i = \frac{1}{\frac{d_{нар}}{\alpha_{гпi} d_{вн}} + \frac{d_{нар}}{2\lambda_{стi}} \ln\left(\frac{d_{нар}}{d_{вн}}\right) + \frac{1}{\alpha_{нпi}}}, \quad (1)$$

показал, что при высокой интенсивности теплообмена при конденсации $\alpha_{гп}$ и значениях тепловой проводимости тонкостенных труб $\sim 1.1 \times 10^4$ Вт/(м²°С) даже при низких значениях теплопроводности нержавеющей стали определяющее влияние на величину коэффициента теплопередачи k_i оказывает коэффициент теплоотдачи со стороны нагреваемого пара $\alpha_{нпi}$. При этом расчетные значения коэффициентов теплопередачи по ступеням составляют $k_1 \sim 350$ Вт/(м²°С), $k_2 \sim 480$ Вт/(м²°С) [13].

Анализ гидравлических процессов в СПП-500 показал:

- трубная система перегревателя, обеспечивающая равномерность распределения нагреваемого пара по каналам сепаратора, имеет сопротивление ~ 0.012 МПа [13];
- потери давления греющего пара значительны, в змеевиках 1 ступени длиной 90 м составили ~ 0.14 МПа [11], в змеевиках 2 ступени длиной 102 м – ~ 0.23 МПа [11], что способствует устойчивости теплогидравлических процессов, в частности теплообмена, при конденсации греющего пара в длинных горизонтальных змеевиках.

В СПП-500-1 теплообменная поверхность пароперегревателя выполнена из труб $\varnothing 14 \times 1.2$ мм, объединенных в отдельные однотипные вертикальные кожухотрубные теплообменники – модули – двух диаметров: 325 мм и 273 мм. 1 ступень пароперегревателя состоит из 56 модулей диаметром 325 мм и 4 модулей диаметром 273 мм, 2 ступень – только из 70 модулей диаметром 325 мм, расположенных в центральной части СПП. Каждый модуль (рис. 8) представляет собой трубу большого диаметра с сваренными в нее трубными досками.

Перегреваемый пар после сепарационного устройства движется сверху вниз по трубкам модулей 1 ступени и между модулей. У днища аппарата перегреваемый пар направляется к центру, проходит вверх по трубкам модулей 2 ступени и покидает СПП-500-1 через центральную трубу.

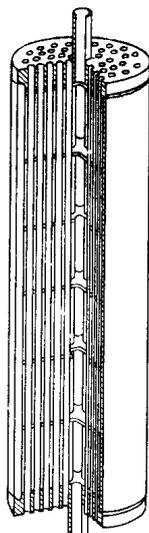


Рис. 8. Модуль пароперегревателя СПП-500-1

Греющий пар движется в межтрубном пространстве. Греющий пар подводится к центру верхней трубной доски каждого модуля через 4 камеры (по 2 на каждую ступень), расположенные между нижней частью сепаратора и верхними трубными досками модулей. Далее греющий пар 1 ступени омывает трубки, по которым течет нагреваемый пар. Здесь осуществляется прямоточное (сверху вниз) течение греющего и нагреваемого пара, так как здесь нагреваемый пар поступает сверху. Во второй ступени греющий и нагреваемый пар движутся в противоположных направлениях, так как нагреваемый пар поступает в модули снизу, а греющий – сверху. Отвод конденсата греющего пара осуществляется в нижней части СПП-500-1.

Основной поток нагреваемого пара движется внутри теплообменных труб модулей 1 и 2 ступеней пароперегревателя со скоростью $v_{\text{нп}} \sim 45$ м/с. При этом устанавливается турбулентный режим течения с числами Рейнольдса $Re_{\text{нп1}} \sim 6 \times 10^4$ для 1 ступени и $Re_{\text{нп2}} \sim 4 \times 10^4$ для 2 ступени, который сопровождается теплообменом со стенками труб, интенсивность которого характеризуется коэффициентами теплоотдачи $\alpha_{\text{нп}} \sim 350 \div 400$ Вт/(м²°С) [18]. Наличие ограниченной с помощью вытеснителей протечки на уровне ~ 5 % [18] от общего расхода нагреваемого пара в относительно большом пространстве между модулями с низкими скоростями сопровождается теплообменом с интенсивностью почти на порядок меньшей, чем в модулях.

Конденсация греющего пара, протекающего с низкими скоростями в межтрубном пространстве внутри модулей 1 и 2 ступеней, сопровождается теплообменом с интенсивностью, которая по рекомендациям [12] оценивается $\alpha_{\text{гп}} \geq 10^4$ Вт/(м²°С). При анализе влияния коэффициентов теплоотдачи на коэффициент теплопередачи на основе зависимости (1) можно также констатировать преимущественное влияние на этот параметр коэффициентов теплоотдачи со стороны нагреваемого пара $\alpha_{\text{нп}}$, в том числе и для протечки в межмодульном пространстве.

Как было указано выше, трудно прогнозировать величину влажности пара y на входе в пароперегреватель СПП-500-1. Были выполнены оценки интенсивности теплообмена со стороны нагреваемого пара при входной влажности пара $y = 1$ %.

При наличии 1 %, вместо принятых 0.2 % в [18], равномерно распределенной влаги на входе в 1 ступень при оцененных интенсивностях теплообмена и теплопередачи конструктивной поверхности теплообмена в модулях 1 ступени оказывается не достаточно для обеспечения заданного уровня перегрева пара. В межмодульном пространстве 1 ступени подводимая теплота в основном расходуется на испарение влаги. В общем пространстве после модулей 1 ступени поступает пар из модулей с уровнем перегрева меньше заданного и пар из межмодульного пространства насыщенный (при температуре входа) или слабо перегретый. Далее в пространстве между модулями 1 и 2 ступени должно произойти трудно прогнозируемое перемешивание вышеупомянутых потоков при повороте их для входа во 2 ступень. Процессы, происходящие во 2 ступени, имеют аналогичный характер и могут усложняться при неравномерном распределении влаги на входе в 1 ступень пароперегревателя. В самом неблагоприятном случае при сильной концентрации влаги оказывается возможен ее пронос через обе ступени на вход в ЦНД.

Но и при равномерном распределении 1 % влаги в потоке пара на входе в 1 ступень и самых благоприятных условиях перемешивания основного потока нагреваемого пара с протечкой между модулями при оцененных для заданных условий интенсивностях теплообмена и теплопередачи поверхности теплообмена 2 ступени также оказывается не достаточно для обеспечения необходимого уровня перегрева ($T \sim 263$ °С [13]) основного потока. С учетом еще более низкой степени перегрева протечки пара в межмодульном пространстве после полного ее перемешивания с основным потоком необходимый уровень перегрева пара достигнут не будет.

Гидравлические потери, сопровождающие процесс в СПП-500-1:

- со стороны нагреваемого пара при оценке по гомогенной модели потока (за счет большей плотности влажного пара по сравнению с проектной) потери оказываются выше проектных ~ 0.023 МПа [13, 18];
- со стороны греющего пара незначительны в имеющих малую длину (в зоне теплообмена 1.9 м [18]) модулях 1 и 2 ступени и не гарантируют устойчивость теплогидравлических процессов, в частности теплообмена, при конденсации пара в межтрубном пространстве модулей.

Опыт эксплуатации СПП-500 и СПП-500-1

По проекту СПП-500 устанавливались так, что их днища находились на одном уровне с днищами конденсаторов ТУ, над верхней отметкой сепараторосборника, что способствовало забросу сепарата на днище СПП-500, возникновению пульсаций расхода сепарата. Заброс сепарата на днище вызывал термоциклические разрушения вертикальных участков трубок 2 ступени. На основе экспериментальных исследований была проведена модернизация обвязки, которая обеспечила эффективную работу СПП-500. Был произведен восстановительный ремонт поврежденных вертикальных трубок 2 ступени. После указанных мероприятий СПП-500 работали безаварийно, но были сняты с эксплуатации и заменены на СПП-500-1 по требованию завода-изготовителя, автора конструкции СПП-500-1.

Первый выход из строя элементов СПП-500-1 на АЭС произошел через 1000 часов эксплуатации [13] и напрямую связан с невозможностью примененных в этом аппарате конструктивных решений обеспечить собственную надежность. В частности, осмотрами мест повреждений был обнаружен обрыв трубок $\varnothing 25 \times 2$ мм подвода греющего пара и отвода конденсата в месте приварки труб к трубной доске модулей. Разрушения имели усталостный характер. На СПП-500-1 был произведен восстановительный ремонт подводящих и отводящих трубок модулей.

Промышленные испытания аппаратов СПП-500-1 ведутся на протяжении многих лет. Предпосылками для проведения испытаний явилась неудовлетворительная работа СПП-500-1 на АЭС, выразившаяся в снижении температуры перегреваемого пара на выходе из аппарата, необходимости проведения ремонта в течение межремонтного периода. Меры, направленные на устранение данных явлений, применялись многократно, но имели кратковременный эффект. Аппараты СПП-500-1 работают в различных условиях из-за особенностей компоновки, но все СПП-500-1 имеют собственную недостаточную надежность и эффективность, не обеспечивают необходимые условия для надежной работы ЦНД ТУ даже на расчетном уровне.

Достоинства конструкции СПП-500

Основные элементы СПП-500 были исследованы и отработаны до оптимальных решений на специальных экспериментальных стендах; испытания проводились как на моделях, так и на натуральных элементах. Один из аппаратов СПП-500 был испытан при натуральных параметрах нагреваемого и греющего пара. Испытания подтвердили надежность работы аппарата и получение заданной температуры перегрева $T \sim 263^\circ\text{C}$ при гидравлическом сопротивлении ниже расчетного [19].

Установлено, что превышение нагрузки на жалюзи сепаратора до 30 % сверх номинальной не вызывает уменьшения эффективности влагоудаления [19]. Высококачественная сепарация является важным преимуществом СПП-500. Фактор влияния эффективности сепарации влаги из влажного пара в сепараторах на теплофизические процессы, протекающие в пароперегревателях, полностью проявился на примере СПП-500

и СПП-500-1. Оказалось, что результаты процесса сепарации (отсутствие концентрации влаги) влияют на процесс теплообмена в СПП-500 так, что необходимый уровень перегрева $T \sim 263^\circ\text{C}$ обеспечивается при заданных условиях. Управление процессом сепарации в СПП-500 осуществляется, в частности, с помощью конструкции пароперегревательного пучка через его распределенное по фронту потока пара гидравлическое сопротивление. В СПП-500-1 в реализованной конструкции сепаратора и пароперегревателя теплогидравлические процессы осуществляются таким образом, что в итоге не достигается необходимая температура перегрева пара даже при самых благоприятных прогнозах в отношении эффективности сепарации и при отсутствии концентрации влаги на входе в пароперегреватель.

Как показали специальные исследования охлаждения поверхности нагрева влажным паром, рассмотренные в [20], для надежной работы поверхности нагрева и труб подвода греющего пара необходимо обеспечить влажность за сепаратором $y \leq 2\%$. Это условие выполнено в аппаратах СПП-500 ($y \leq 1\%$), чего нельзя сказать об СПП-500-1.

К числу дополнительных достоинств, обусловленных конструкцией аппаратов СПП-500, относятся:

- малое относительное аэродинамическое сопротивление по нагреваемому пару, составляющее $\sim 3.5\%$ от начального давления [19];
- значительно меньшие габариты (высота СПП-500-1 на $\sim 35\%$ превышает высоту СПП-500 при одинаковом диаметре [11, 18]) по сравнению с другими СПП равной мощности, что облегчает компоновку СПП-500.

Другие достоинства СПП-500 рассмотрены нами в [21].

Выводы

1. Процессы теплообмена в сепараторах-пароперегревателях СПП-500 и СПП-500-1 на энергоблоках с реакторами РБМК-1000 оказывают большое влияние на достижение необходимой температуры перегрева пара на входе ЦНД и необходимого уровня надежности ТУ.
2. Процессы теплообмена в этих аппаратах характеризуются низкими тепловыми нагрузками $\sim (9-14) \times 10^3 \text{ Вт/м}^2$ [11, 18] и в условиях различных интенсивностей теплообмена со стороны нагреваемой и греющей сред требуют специальной организации с помощью конструктивных решений.
3. Примером конструктивного решения, позволяющего рационально и эффективно обеспечить низкую влажность ($y \leq 1\%$) и отсутствие ее концентрации в потоке нагреваемого пара, а также относительно интенсивный теплообмен со стороны нагреваемого пара при устойчивом протекании теплогидравлических процессов, является СПП-500.
4. Необходимо дальнейшее изучение теплогидравлических процессов в СПП.

Заключение

Обсуждение необходимых дополнительных мер для выполнения СПП-500-1 своих функций, а также негативный опыт эксплуатации и результаты промышленных испытаний СПП-500-1 продолжаются, но и так ясно, что недостатки конструкции предопределяют аппараты СПП-500-1 как непригодные для дальнейшего использования даже в проектных разработках, не говоря уже об их эксплуатации. Необходима теоретическая, экспериментальная и расчетная разработка конструктивно-новых аппаратов. При выборе конструктивных решений для нового аппарата возможно использование ряда решений, заложенных в аппараты СПП-500, так как основные конструктивные

принципы, заложенные в эти аппараты, достаточно продуктивны, а опыт, полученный при разработке данной конструкции, в том числе и в части организации процессов теплообмена, заслуживает внимания и должен быть использован при разработке СПП для АЭС.

Литература

1. Федеральная целевая программа «Развитие атомного энергопромышленного комплекса России на 2007–2010 годы и на перспективу до 2015 года». Утверждена постановлением Правительства Российской Федерации от 6 октября 2006 г. № 605.
2. Маргулова Т.Х. Атомные электрические станции: Учебник для вузов. 5-е изд., перераб. и доп. М.: Изд. АТ, 1994. 296 с.
3. Петкевич И.Л., Судаков А.В. Исследование надежности сепаратора–пароперегревателя для РБМК-1000. / XXXIII Неделя науки СПбГПУ: Материалы межвузовской научно-технической конференции. СПб: Изд-во СПбГПУ, 2005. Ч. II, с. 154–155.
4. Лебедев В.И., Орешкин Б.М., Судаков А.В. Продление ресурса оборудования энергоблоков АЭС. / Труды ЦКТИ. СПб: НПО ЦКТИ, 2002. Вып. 282, с. 28–44.
5. Мухачев В.Л., Десятун В.Ф., Назаров О.И. Оптимизация работы системы промпрегрева турбины К-500-60/3000 на основе продувки тракта греющего пара второй ступени перегрева СПП-500-1. / Труды ЦКТИ. СПб: НПО ЦКТИ, 1992. Вып. 269, с. 87–93.
6. Мухачев В.Л., Симкин Б.П. Разработка системы промпрегрева турбоустановки с исключением дефицита расхода греющего пара в СПП. / Труды ЦКТИ / СПб: НПО ЦКТИ, 1992. Вып. 269, с. 94–98.
7. Гольдштейн А. Д., Кругликов П. А., Федер Е. В. и др. Некоторые аспекты повышения надежности тепломеханического оборудования АЭС. / Труды ЦКТИ / СПб.: НПО ЦКТИ, 2002. Вып. 282, с. 75–83.
8. Самусев Л.Е., Гасанов И.К., Ананьев А.Н. и др. Повышение надежности работы СПП-500-1 в пусковых и ремонтных режимах. / Труды ЦКТИ / СПб.: НПО ЦКТИ, 2002. Вып. 285, с. 191–197.
9. Лахтионов А.Е., Боровков В.М. Повышение эффективности работы сепараторов–промпрегревателей в тепловых схемах ПТУ АЭС // XXXII Неделя науки СПбГПУ: Материалы межвузовской научно-технической конференции / СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2004. Ч. II, с. 159–160.
10. Кунегин Е.П., Крамеров А.Я. К вопросу о параметрах пара АЭС с водоохлаждаемыми реакторами. // Теплоэнергетика, 1972. № 3. С. 2–4.
11. Рабочий проект промежуточного сепаратора–пароперегревателя для турбины К–500-65/3000. Работа № 1009088/0–5841. Л.: ЦКТИ, 1969. 34 с.
12. Сепараторы-пароперегреватели турбин АЭС. Расчет и проектирование. Руководящий технический материал 108.020.107-84. Л.: НПО ЦКТИ, 1986.
13. Шишкин А.А., Федорович Е.Д. Опыт эксплуатации промежуточных сепараторов–пароперегревателей турбин Ленинградской АЭС // Труды ЦКТИ. СПб.: НПО ЦКТИ, 1981. Вып. 189, с. 3–9.
14. Маргулова Т.Х. Расчет и проектирование парогенераторов атомных электростанций. М.-Л.: Государственное энергетическое издательство, 1962. 144 с.
15. Петухов Б.С., Генин Л.Г., Ковалев С.А. и др. Теплообмен в ядерных энергетических установках: Учебное пособие для вузов. 3-е изд., перераб. и доп. М.: Изд-во МЭИ, 2003. 548 с.
16. Цветков Ф.Ф., Григорьев Б.А. Тепломассообмен: Учебное пособие для вузов. – 2-е изд., испр. и доп. М.: Изд-во МЭИ, 2005. 550 с.

17. Кректунов О.П., Савус А.С. Процессы конденсации и конденсаторы масложирового производства. СПб: Изд-во АООТ «НПО ЦКТИ», 1998. 496 с.
18. Рабочий проект ФР-00170 (взамен ФР-00120). Расчет промежуточного сепаратора–пароперегревателя турбины К-500-65/3000 (тепловой и гидравлический). Подольск, 1972. 14 с.
19. Андреев П.А., Гершевич Б.А., Парамонов П.М. и др. Промежуточный сепаратор–пароперегреватель для турбин Ленинградской АЭС. // Энергомашиностроение, 1974. № 10. С. 1–4.
20. Судаков А.В., Трофимов А.С. Пульсации температур и долговечность элементов энергооборудования. Л.: Энергоатомиздат. Ленингр. отд-е, 1989. 176 с.
21. Егоров М.Ю., Федорович Е.Д., Прохоров В.А. Промежуточные сепараторы–пароперегреватели турбин Ленинградской АЭС: модернизация конструкций на основе опыта эксплуатации. / Фундаментальные исследования в технических университетах: Материалы X Всероссийской конференции по проблемам науки и высшей школы. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2006. С. 272.

НАШИ АВТОРЫ

Аверина Анастасия Валерьевна – студентка кафедры общей физики Санкт-Петербургского государственного университета

Акишина Екатерина Юрьевна – студентка кафедры оптоинформационных технологий и материалов

Асеев Владимир Анатольевич – научный сотрудник кафедры оптоинформационных технологий и материалов

Беленова Евгения Геннадьевна – научный сотрудник кафедры физики твердого тела Московского педагогического государственного университета

Богатырёва Валерия Владимировна – студентка кафедры лазерной техники и биомедицинской оптики

Варкентина Надежда Васильевна – магистрант кафедры лазерных технологий и экологического приборостроения

Васильев Виктор Георгиевич – научный сотрудник кафедры физики твердого тела Московского педагогического государственного университета

Зыонг Ван Зунг – аспирант кафедры лазерных технологий и экологического приборостроения

Ващенко Елена Валерьевна – студентка кафедры лазерной техники и биомедицинской оптики

Верзин Илья Александрович – студент кафедры оптоинформационных технологий и материалов

Волынский Максим Александрович – студент кафедры компьютерной фотоники

Городецкий Андрей Александрович – аспирант центра информационных оптических технологий

Гортинская Лидия Вячеславовна – аспирант кафедры высшей математики

Дёмин Сергей Анатольевич – аспирант кафедры оптики и нанофотоники Казанского государственного университета

Евсеев Вадим Олегович – студент кафедры измерительных технологий и компьютерной томографии

Егоров Михаил Юрьевич – студент Санкт-Петербургского государственного политехнического университета

Ермолаева Елена Вячеславовна – студентка кафедры фотоники и оптоинформатики

Есикова Надежда Александровна – сотрудник института аналитического приборостроения РАН

Жуков Сергей Николаевич – студент кафедры оптоинформационных технологий и материалов

Жукова Марина Николаевна – студентка кафедры оптических технологий

Захаров Алексей Сергеевич – доцент кафедры компьютерной фотоники

Златов Андрей Сергеевич – студент кафедры оптоинформационных технологий и материалов

Золотова Елизавета Юрьевна – аспирант кафедры оптики квантоворазмерных систем

Ильин Дмитрий Валерьевич – аспирант кафедры лазерных технологий и экологического приборостроения

Кальянова Арина Игоревна – аспирант кафедры информатики и прикладной математики

Киселев Алексей Сергеевич – студент кафедры фотоники и оптоинформатики

Киселев Андрей Сергеевич – студент кафедры фотоники и оптоинформатики

Клементьева Анастасия Валерьевна – студент кафедры оптоинформационных технологий и материалов

Коваленко Павел Павлович – студент кафедры мехатроники

Колобкова Елена Владимировна – студент технологического института

Лазарева Ксения Евгеньевна – студентка кафедры оптоинформационных технологий и материалов

Ле Зуй Туан – аспирант кафедры прикладной и компьютерной оптики

Логунов Александр Евгеньевич – аспирант центра информационных оптических технологий

Макаров Дмитрий Сергеевич – ассистент кафедры компьютерной теплофизики и энергофизического мониторинга

Макин Дмитрий Николаевич – аспирант кафедры физики и техники оптической связи

Малов Андрей Михайлович – аспирант кафедры компьютерной фотоники

Матухина Елена Владимировна – научный сотрудник кафедры физики твердого тела Московского педагогического государственного университета

Монахова Ольга Александровна – аспирант кафедры технической физики и информационных технологий Энгельсского технологического института Саратовского государственного технического университета

Москалёва Анна Юрьевна – научный сотрудник кафедры лазерной техники и биомедицинской оптики

Нелепец Андрей Викторович – аспирант кафедры лазерной техники и биомедицинской оптики

Новиков Борис Юрьевич – аспирант кафедры лазерных технологий и экологического приборостроения

Носова Александра Валерьевна – студентка кафедры мехатроники

Панищев Олег Юрьевич – аспирант кафедры теоретической физики Татарского государственного гуманитарно-педагогического университета

Поволоцкий Алексей Валерьевич – студент кафедры общей физики Санкт-Петербургского государственного университета

Постников Евгений Сергеевич – студент кафедры оптоинформационных технологий и материалов

Разумовская Ирина Васильевна – научный сотрудник кафедры физики твердого тела Московского педагогического государственного университета

Римских Мария Владимировна – студентка кафедры измерительных технологий и компьютерной томографии

Родинков Сергей Александрович – аспирант кафедры мехатроники

Рошак Евгения Николаевна – студент кафедры оптического материаловедения и оптики

Сергушин Павел Анатольевич – аспирант кафедры мехатроники

Серегин Александр Николаевич – студент кафедры измерительных технологий и компьютерной томографии

Серобабина Екатерина Анатольевна – студентка кафедры адаптивной физической культуры Санкт-Петербургского государственной академии физической культуры им. П.Ф. Лесгафта

Ситдиков Владимир Масгутович – студент кафедры оптоинформационных технологий и материалов

Скалецкая Ирина Евгеньевна – аспирант кафедры твердотельной оптоэлектроники

Соколов Дмитрий Юрьевич – аспирант кафедры измерительных технологий и компьютерной томографии

Соловьев Валерий Сергеевич – аспирант кафедры физики и оптической связи

Сушко Виктория Юрьевна – аспирант кафедры компьютерной теплофизики и энергофизического мониторинга

Титов Юрий Николаевич – аспирант кафедры компьютерного и математического моделирования Тамбовского государственного университета им. Г.Р. Державина

Тишкин Виталий Олегович – студент кафедры фотоники и оптоинформатики

Ткачёв Алексей Леонидович – аспирант кафедры мехатроники

Тупик Александра Николаевна – студент кафедры измерительной технологии и компьютерной томографии

Уханова Екатерина Аркадьевна – аспирант кафедры физики

Филиппов Геннадий Николаевич – научный сотрудник кафедры компьютерной фотоники

Цехомский Виктор Алексеевич – студент кафедры оптоинформационных технологий и материалов

Цыганкова Екатерина Владимировна – студентка кафедры оптоинформационных технологий и материалов

Чернов Илья Алексеевич – студент кафедры оптоинформационных технологий и материалов

Шереметьева Татьяна Анатольевна – научный сотрудник кафедры компьютерной фотоники

Ширшнёв Павел Сергеевич – студент кафедры оптического материаловедения и оптики

Щеголихина Ольга Ивановна – научный сотрудник кафедры физики твердого тела Московского педагогического государственного университета

СОДЕРЖАНИЕ

1. ФОТОНИКА И ОПТОИНФОРМАТИКА	4
Волынский М.А., Захаров А.С. Анализ интерференционных сигналов малой когерентности на основе моделей линейной и нелинейной стохастической фильтрации	4
Малов А.М., Шереметьева Т.А., Филиппов Г.Н. Метод предварительной обработки медико-биологических изображений	10
Золотова Е.Ю. Формирование нано-микроструктур и планарных волноводов методом копирования рельефа матрицы УФ-отверждаемой полимерной композицией	17
Верзин И.А. Исследование электрооптического эффекта в кристаллах 4-N,N-dimethylamino-4'-N'-methyl-4-stilbasolium tosylate (DAST)	27
Чернов И.А. Метод дисперсионного анализа спектра стекол. Задача вычисления интеграла свертки и его реализация в программе вычисления спектра комплексной диэлектрической проницаемости в широком интервале частот.....	32
Постников Е.С. Моделирование спектра комплексной диэлектрической проницаемости стеклообразных материалов. Реализация и апробация алгоритма минимизации отклонений модельного спектра от экспериментального	38
Тишкин В.О. Объемное сканирование и моделирование.....	45
Киселев Ан.С., Киселев Ал.С. Спектроэнергетические характеристики излучения, отраженного от участка среды с динамической неоднородностью сферической формы	48
Киселев Ал.С., Киселев Ан.С. Комплексы дискретных поверхностных оптических солитонов в активных нелинейных системах	57
Ермолаева Е.В. Компрессия и усиление сверхкоротких импульсов при ВКР в плазме и сжатых газах: особенности и оптимальные условия процесса.....	69
Клементьева А.В., Колобкова Е.В., Асеев В.А. Исследование влияния термообработки на спектрально-люминесцентные свойства наностеклокерамики, активированной ионами эрбия.....	79
Златов А.С., Асеев В.А. Спектральные свойства высококонцентрированных иттербий-эрбиевых метафосфатных стекол для микролазеров.....	85
Жукова М.Н., Асеев В.А. Измерение населенности метастабильного уровня стекол, активированных ионами эрбия	89
Цыганкова Е.В., Цехомский В.А. Роль сурьмы в формировании наноразмерных серебряных коллоидных плазмонов в фототерморелаксационном стекле.....	97
Жуков С.Н., Асеев В.А., Ситдинов В.М. Электрические и магнитные спектры поляризованной люминесценции в стеклах, активированных эрбием	104
2. ФИЗИКА ТВЁРДОГО ТЕЛА И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЕ	109
Есикова Н.А. Оптические свойства пористых стекол	109
Ильин Д.В. Влияние примесей в кварцевом стекле на его вязкость	118
Аверина А.В., Поволоцкий А.В. Лазерный метод осаждения меди из раствора электролита на поверхность диэлектрика	123

Акишина Е.Ю., Лазарева К.Е. Структурные превращения в монокристаллах кварца при облучении быстрыми нейтронами.....	128
Соловьев В.С. Акрилатные сополимеры в качестве фиксирующей матрицы карбонизированных остатков.....	135
Макин Д.Н. Особенности поведения тетразолсодержащих акриловых гидрогелей в водных растворах соляной кислоты.....	137
Беленова Е.Г., Разумовская И.В., Матухина Е.В., Щеголихина О.И., Васильев В.Г. Структурная организация и деформационное поведение смесей особого класса мезоморфных соединений – ODIS*- кристаллов.....	141
Зыонг Ван Зунг, Ле Зуй Туан, Варкентина Н.В. Определение размера апертуры ближнепольных оптических зондов по распределению светового поля в дальней зоне	153
Гортинская Л.В. Влияние электрического поля на резонансы в системе нанослоев	159
Тупик А.Н. Электрокинетические методы управления микропотоками в каналах.	166
Ващенко Е.В. Фотопроводимость островковой металлической пленки натрия	170
Рошак Е.Н., Ширшнев П.С. Зависимость механизма влияния пластической деформации на спектры германия от концентрации электронов	175
Уханова Е.А. Оценка функции распределения по размерам частиц в углеродных нанокompозитах методом малоуглового рентгеновского рассеяния .	178
Логунов А.Е. Селективное изменение размеров и форм металлических наночастиц с помощью процесса фотоатомной эмиссии и фотодиффузии атомов по их поверхности.....	187
Новиков Б.Ю. Рекомендации по лазерной фазово-структурной модификации стеклокерамик СТ-50-1 и ФС-1	195
3. БИОМЕДИЦИНСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ И ТОМОГРАФИЯ.....	202
Дёмин С.А., Зарипов Р.Р., Панищев О.Ю. Кросс-корреляции в живых системах: анализ нейромагнитных сигналов коры головного мозга человека.....	202
Серобабина Е.А. Биоинформационный подход в развитии силовой выносливости у человека	213
Евсеев В.О. Применение метода регуляризации к задаче синтеза однородного поля в катушке МР-томографа.....	219
Римских М.В. О восстановлении смазанных томограмм различными методами...	225
Соколов Д.Ю. Повышение однородности поля постоянного магнита МР-томографа.....	233
Серегин А.Н. Система управления учебным ЯМР-томографом	246
Монахова О.А. Программное обеспечение преобразования аналогового биомедицинского сигнала в дискретную равномерную выборку для последующей цифровой обработки средствами вейвлет-анализа	250
Городецкий А.А. Дифракция широкополосного терагерцового излучения на амплитудных и фазовых экранах, восстановление изображений по полученной картине дифракции	256
Богатырёва В.В., Москалёва А.Ю. Влияние поля лазерного излучения на эритроциты.....	262
Скалецкая И.Е. Исследование влияния фрактально-матричного резонатора на оптические свойства дистиллированной воды	273

Нелепец А.В. Исследование дифракционного поля, формируемого фрактальными дифракционными структурами.....	284
4. ТЕПЛОФИЗИКА, БИОФИЗИКА, БИОМЕХАНИКА	293
Сушко В.Ю. Уравнение теплопроводности для вспучивающегося материала в многослойной тепловой защите.....	293
Макаров Д.С. Система регулирования температуры в сушильных камерах	298
Кальянова А.И. Использование линейных разделяющих функций в биометрической идентификации	302
Титов Ю.Н. Математическая модель органа слуха для автоматического распознавания речи	307
Носова А.В. Математическое моделирование динамических процессов в человеческом органе слуха	311
Коваленко П.П. Визуализация изображений на цилиндре и торе.....	318
Родинков С.А. Проблемы передачи и приема акустических сигналов.....	322
Ткачёв А.Л. Классификация акустических датчиков.....	328
Сергушин П.А. Моделирование динамики магнитостатического вариометра	333
Егоров М.Ю. Совершенствования системы промежуточной сепарации и перегрева влажнопаровых турбин АЭС: анализ теплогидравлических процессов в конструкциях сепараторов – пароперегревателей на основе опыта эксплуатации	339
НАШИ АВТОРЫ.....	351

**Научно-технический вестник СПбГУ ИТМО. Выпуск 37.
СОВРЕМЕННАЯ ФИЗИКА. Труды молодых ученых / Главный
редактор д.т.н., проф. В.Н. Васильев. – СПб: СПбГУ ИТМО, 2007. 357 с.**

**НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК СПбГУ ИТМО
Выпуск 37**

**СОВРЕМЕННАЯ ФИЗИКА.
Труды молодых ученых**

Главный редактор
доктор технических наук, профессор
В.Н. Васильев

Дизайн обложки В.А. Петров, А.А. Колокольников
Редакционно-издательский отдел СПбГУ ИТМО

Зав. РИО Н.Ф. Гусарова

Лицензия ИД № 00408 от 05.11.99.

Подписано в печать 20.09.07.

Заказ 1059. Тираж 100 экз.