

XX Всероссийский молодежный Самарский конкурс-конференция научных работ по оптике и лазерной физике, посвященный 100-летию со дня рождения Н.Г. Басова

**Самарский филиал федерального государственного
бюджетного учреждения науки
Физического института им. П.Н. Лебедева
Российской академии наук**

**Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Самарский национальный исследовательский
университет имени академика С.П. Королева»**

**Самарский научно-образовательный центр
по оптике и лазерной физике**

**XX Всероссийский молодежный
Самарский конкурс-конференция
научных работ по оптике и лазерной
физике, посвященный 100-летию
со дня рождения Н.Г. Басова**

8-12 ноября 2022 года

Сборник трудов конференции

Москва 2022

УДК 535+535: 621.373.826

XX Всероссийский молодежный Самарский конкурс-конференция научных работ по оптике и лазерной физике, посвященный 100-летию со дня рождения Н.Г. Басова: сборник трудов конференции, (Самара, 8–12 ноября 2022 г.). – М.: Тривант, 2022. – 481 с.

ISBN 978-5-89513-516-7

В сборнике представлены работы участников XX Всероссийского молодежного Самарского конкурса-конференции научных работ по оптике и лазерной физике, посвященного 100-летию со дня рождения Н.Г. Басова, а также аннотации докладов и лекций ведущих ученых, сделанных в рамках Конкурса-конференции. Исследования конкурсантов охватывают широкий круг теоретических и прикладных вопросов когерентной и квантовой оптики, спектроскопии, биофотоники, лазерной физики, взаимодействия света с веществом и нанопотоники.

Для студентов, аспирантов, специализирующихся в области оптики, спектроскопии, лазерной физики, научных работников и преподавателей.

СОДЕРЖАНИЕ

ЛЕКЦИИ ВЕДУЩИХ УЧЁНЫХ И ПРИГЛАШЁННЫЕ ДОКЛАДЫ.

АННОТАЦИИ

Е.В. Александров

Дизайн металл-органических координационных полимеров и водородно-связанных органических каркасов с практически значимыми оптическими свойствами.....12

К.Н. Болдырев

Центры окраски в алмазах: от квантовых сенсоров до квантового интернета14

Э.А. Генина

Оптическое просветление биотканей: современное состояние и перспективы.....15

М.А. Губин

Квантовые стандарты частоты: принципы и применения.....16

И.Ю. Еремчев, А.О.Тарасевич, М.А. Князева, Дж. Ли, А.В. Наумов, И.Г. Щерблыкин

Наблюдение эффекта антигруппировки фотонов в замедленной люминесценции одиночных субмикронных кристаллов перовскитов MAPbI_317

И.Н. Завестовская

Мультимодальные лазерно синтезированные наночастицы для лучевой терапии.....19

И.Г. Зубарев

Н.Г. Басов – пионер и организатор лазерных исследований в СССР.....20

Н.Н. Колачевский

Квантовые вычисления с использованием одиночных ионов.....21

Ю.Н. Кульчин

Роль Н.Г.Басова в создании на Дальнем Востоке России научной школы лазерной физики.....22

Н.Д. Кундикова

Эффекты спин-орбитального взаимодействия свет: вклад советской и российской науки.....24

И.З. Латышов
Атмосферные квантовые коммуникации.....26

А.В. Наумов
Оптическая наноскопия одиночных макромолекул.....27

Д.В. Проконова, Н.Н. Лосевский, С.П. Котова, И.Т. Мынжасаров, И.Ю. Еремчев, А.В. Наумов
Флуоресцентная 3D-наноскопия с использованием световых полей, полученных на основе оптики спиральных пучков света.....28

А.В. Шкаликов
Устройства на основе суженных волокон.....29

Д.К. Тучина, Е.Н. Лазарева, Р.А. Анисимов, Р.А. Верховский, М.В. Ломова, А.А. Доронкина, А.М. Мыльников, Н.А. Наволокин, В.И. Кочубей, И.Ю. Янина
Влияние введения апконверсионных наночастиц, покрытых оболочкой CaCO_3 , на оптические параметры биологических тканей в области развития опухоли30

СЕКЦИЯ АСПИРАНТОВ И МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ

Д.О. Акатьев, А.В. Васильев, Н.М. Шафеев, Ф.М. Албаев, А.А. Калачев
Функции хеширования на основе многомерных однофотонных состояний34

Н.В. Голубова, Е.С. Серёгина, Е.Ф. Шевцова, В.В. Дрёмин, Е.В. Потапова
Изучение динамики мозгового кровообращения лабораторных животных методом лазерной спекл-контрастной визуализации 40

И.Г. Гревцева, О.В. Овчинников, М.С. Смирнов, К.С. Чирков, Т.А. Чевычелова
Люминесцентные свойства коллоидных квантовых точек PbS , пассивированных молекулами тиогликолевой кислоты..... 44

М.М. Евсеев, О.В. Кузнецов, В.Н. Аязов
Синтез [5]-гелицена в газовой фазе51

В.Д. Зайцев
Острая фокусировка света с круговой поляризацией линзами с разной числовой апертурой 58

Р.К. Захаров, Е.К. Башкиров
Перепутывание между изолированным кубитом и кубитом в резонаторе с керровской средой в модели Джейнса-Каммингса.....64

А.С. Абдулина, А.А. Шмидт, А.О. Злобин, Н.И. Буримов, С.М. Шандаров
Исследование эффектов второго порядка методом голографической интерферометрии.....72

| | |
|--|-----|
| <u>А.А. Зыков, А.Л. Матвеев, Л.А. Матвеев, В.Ю. Зайцев</u> Численное моделирование компенсации маскирующих движений биоткани в контактной оптической когерентной ангиографии с использованием процедуры Фурье сдвига..... | 79 |
| <u>А.А. Акимов, В.В. Ивахник, К.Г. Казакова</u> Влияние обратной связи на коэффициент отражения четырехволнового преобразователя излучения на резонансной и тепловой нелинейностях..... | 87 |
| <u>К.Ю. Кандурова, Д.С. Сумин, А.В. Мамошин, Е.В. Потапова</u> Сравнительный анализ вклада флуорофоров в спектры флуоресценции у пациентов с различными заболеваниями печени..... | 93 |
| <u>М.М. Евсеев, О.В. Кузнецов</u> Поверхность потенциальной энергии химической реакции этилового радикала с монооксидом углерода..... | 100 |
| <u>А.А. Кузнецова, Д.П. Порфирьев</u> Профиль поверхности потенциальной энергии мономолекулярного распада молекулы глиоксаля..... | 107 |
| <u>Е.Н. Лазарева, П.А. Дьяченко, А.Е. Положенков, А.М. Мыльников, А.А. Сокова, А.Б. Бучарская, В.В. Тучин</u> In vivo исследование цельной крови лабораторных животных, подвергнутых экспозиции опа-аэрозоля (пропиленгликоль и глицерин) методами спектроскопии КР и микроскопического имиджинга..... | 114 |
| <u>Ф. А. Мартыненко</u> Мюонный лэмбовский сдвиг в трехчастичных мюон-электронных системах в квантовой электродинамике..... | 121 |
| <u>С.Н. Мокриц, А.В. Кулик, Д.А. Терешко, С.С. Минаев, В.М. Чудновский</u> Физические механизмы лазерной терапии кист | 129 |
| <u>С.А. Найденов, А.В. Неупокоева, А.В. Сычевский</u> Применение нейронной сети для классификации изображений нейтрофилов | 137 |
| <u>А.А. Николаев, А.А. Рудь, В.Н. Аязов, А.М. Мебель</u> Диаграммы поверхности потенциальной энергии химического превращения ацетальдегида в этанимин во льдах аммиака..... | 142 |
| <u>Н.В. Ремизов, Е.М. Батаева, Д.П. Страмоусов, Д.Н. Артемьев</u> Разработка стенда визуализатора вен на основе дифференциального поглощения в ближнем ИК диапазоне..... | 150 |
| <u>А.Е. Рупасов, С.И. Кудряшов, В.В. Кесаев, Р.А. Заколдаев</u> Фемтосекундная лазерная 3Д-фабрикация интегральных оптических устройств в объеме прозрачных диэлектриков | 157 |

| | |
|---|-----|
| <u>А.А. Савельева, Е.С. Козлова</u> Формирование вихревых структур плазмонными оптическими элементами | 165 |
| <u>И.А. Серебрякова, Ю.И. Сурков, Я.К. Кузинова, О.М. Конопацкова, В.В. Тучин, Э.А. Генина</u> Комплексный подход к диагностике и постоперационному мониторингу новообразований кожи человека in vivo..... | 173 |
| <u>М.А. Сизов, М.Г. Рябков, Е.Б. Киселёва, Е.Л. Бедерина</u> Влияние реперфузии химуса на параметры микроструктуры и метаболизма тонкой кишки по данным оптического биоимиджинга | 181 |
| <u>Ю.И. Сурков, И.А. Серебрякова, Э.А. Генина</u> Метод измерения показателя преломления и индекса гидратации биоткани с помощью комбинации оптической когерентной томографии и высокочастотного ультразвукового исследования..... | 191 |
| <u>С.А. Артемов, А.Н. Беляев, О.С. Бушукина, С.В. Костин, П.А. Рябочкина, С.А. Хрущалина, Д.В. Пьянзин, А.Д. Таратынова</u> Принципиальная схема устройства для проведения эндовазальной лазерной облитерации с использованием двухмикронного лазерного излучения | 199 |
| <u>С. Ф. Уманская, А.Н. Маресев, А.А. Матрохин, М.А. Шевченко, Н.В. Чернега</u> Случайная лазерная генерация – температурная зависимость..... | 207 |
| <u>А.К. Чепак, М.В. Тутов, С.Ю. Братская, А.Ю. Мироненко</u> Высококчувствительное обнаружение ионов Cu^{2+} флуоресцентным наносенсором с усиленным откликом фёрстеровским резонансным переносом энергии | 214 |
| <u>А.В. Эскин</u> Трехчастичные мюонные связанные состояния в методе комплексного вращения координат..... | 220 |
| <u>А.В. Юрьев, Ю.А. Адаменков, М.А. Горбунов, В.А. Шайдулина, А.А. Калачева</u> Исследование активной среды ЛОНИГ методом ДЛС..... | 227 |
| <u>Е.А. Ярунова, А.А. Кренц, Н.Е. Молевич</u> Исследование типов неустойчивостей в широкоапертурных лазерах с фактором Генри..... | 233 |

ДОКЛАДЫ ВНЕ КОНКУРСА

| | |
|--|-----|
| <u>Н.Н. Давлетшин</u> Фантомная микроскопия с применением нематематической жидкокристаллической ячейки в качестве модулятора света | 241 |
|--|-----|

М.А. Князева, А.О. Тарасевич, А.В. Наумов, И.Ю. Еремчев

Эффект мерцания замедленной люминесценции одиночных полупроводниковых нанокристаллов.....242

И.Т. Мынжасаров, И.Ю. Еремчев, Д.В. Проколова, Н.Н. Лосевский, С.П. Котова, А.В. Наумов

Трёхмерная флуоресцентная dhpsf-наноскопия коллоидных полупроводниковых нанокристаллов (квантовых точек)243

А.Ю. Нелюбов, И.Ю. Еремчев, С.С. Косолобов, В.П. Драчев, Е.А. Екимов, А.В. Наумов

Высокостабильные одиночные центры окраски в НРНТ микроалмазах с узкими спектральными линиями247

СТУДЕНЧЕСКАЯ СЕКЦИЯ

М.С. Алёхин, В.А. Жукова

Колебательные спектры лекарственных препаратов, соержащих парацетамол..249

Е.К. Башкиров, А.В. Астахова

Исследование реакций радикального замещения в низкотемпературной среде255

А.Р. Багров, Е.К. Башкиров

Перепутывание трех кубитов, индуцированное тепловым полем резонатора.....263

Е.А. Батракова, И.О. Антонов

Численное моделирование различных типов радиочастотных квадрупольных ионных ловушек271

Д.М. Безверхняя, А.Т. Саакян, В.Н. Пузырёв, А.Н. Стародуб, А.А. Кологривов

Исследование лазерной плазмы алюминиевых мишеней в рентгеновском диапазоне спектра279

Я.А. Бычкова, А.Ю. Зюбин, И.Г. Самусев

Математический анализ массивов спектров комбинационного рассеяния света статистическими методами с использованием алгоритмов машинного обучения 287

А. С. Ванькаев, Е. В. Ключкина, С. А. Лисицын

Разработка и исследование эффекта резистивного переключения в оксидных наноразмерных структурах титана294

И.А. Горюнов, В.В. Шуплецов, Н.А. Адаменков, А.В. Мамошин, Е.В. Потапова, В.В. Дремин

Возможности применения гиперспектральной визуализации для оценки степени ишемии кишечной стенки.....302

| | |
|---|-----|
| <u>Д.А. Губинская, М.А. Федянина, Е.Н. Савченков</u> Брэгговская дифракция света на доменных стенках регулярных доменных структур в кристаллах ниобата и танталата лития..... | 308 |
| <u>В.А. Дерюгина, И.А. Матвеева</u> Нейросетевая классификация дерматоскопических изображений..... | 315 |
| <u>Е.А. Долгова</u> Острая фокусировка пучков со смешанной векторно-круговой поляризацией..... | 321 |
| <u>В.В. Евстифорова, А.А. Шацкая, Л.А. Братченко, Д.Н. Артемьев</u> Исследование поверхностно-усиленного рамановского рассеяния плазмы крови.. | 328 |
| <u>Д.А. Жигаев, Д.А. Шишкина, И.А. Шишкин, В.С. Хоробров</u> Исследование параметров фоточувствительных структур на основе гетероструктур карбид кремний на пористом кремнии..... | 337 |
| <u>А.А. Жукович-Гордеева, А.В. Кузнецов, Н.А. Смирнов, Е.П. Пожидаев</u> Полидоменная и монодоменная структуры сегнетоэлектриков жидкого кристаллала, ограниченного в жидкокристаллических ячейках шероховатыми анизотропными пограничными поверхностями..... | 342 |
| <u>А.Ю. Ионов, О.О. Фролов, П.Е. Тимченко, И.В. Бажутова, Е.В. Тимченко</u> Применение метода спектроскопии комбинационного рассеяния для оценки эмали зубов при пародонтите до и после лечения | 354 |
| <u>А.Д. Капитонов, А.В. Меженин</u> Расчет энергетической эффективности непрерывных кислородно-иодных лазеров с использованием упрощенных моделей генерации..... | 362 |
| <u>А.И. Кашапов, Е.А. Безус, Д.А. Быков, Л.Л. Досколович</u> Генерирование пространственно-временных оптических вихрей с помощью слоистых металлодиэлектрических структур..... | 370 |
| <u>А.И. Ковалёв</u> Решение экстремальных задач с помощью квантового компьютера..... | 378 |
| <u>Л.И. Крикунова, Д.П. Порфирьев, В.Н. Аязов</u> Поверхность потенциальной энергии и молекулярно кинетические параметры химической реакции метинового радикала с молекулой ацетонитрила в условиях холодного космоса..... | 386 |
| <u>С.Ю. Кулагина, Н.В. Латухина</u> Исследование порошков и суспензий нанокompозита пористого кремния с гидроксипатитом..... | 394 |

| | |
|--|-----|
| <u>Р.А. Курамшин, А.П. Торбин, М.И. Свистун, М.В. Загидуллин, А.К. Чернышов, П.А. Михеев</u> | |
| Измерение констант скорости энергообменных процессов в плазме Ar/He | 402 |
| <u>Н.В. Латухина, Д.А. Нестеров, А.В. Павликов, О.А. Шалыгина</u> | |
| Фотоэлектрические свойства структур с окисленным пористым кремнием, допированным эрбием | 410 |
| <u>А.И. Пономарев, О.А. Заякин, С.П. Котова, Н.Н. Лосевский, Т.Н. Сапцина</u> | |
| Разработка системы мониторинга содержания свободной воды в авиационном топливе..... | 418 |
| <u>В.Н. Приземин, Д.С. Сумин, Н.В. Голубова, К.Ю. Кандурова, А.В. Мамошин, Е.В. Потапова</u> | |
| Исследование желчи методом спектроскопии комбинационного рассеяния в рамках оценки печеночной недостаточности при синдроме механической желтухи..... | 426 |
| <u>И. Г. Рютин, А. В. Кузнецов, А.А. Жукович-Гордеева, Е. П. Пожидаев</u> | |
| Жидкокристаллические электрооптические модулятору субмегагерцового диапазона..... | 432 |
| <u>Р.Т. Самигуллин, П.Е. Тимченко, Е.В. Писарева, О.О. Фролов, Л.Т. Волова</u> | |
| Оптический метод оценки состава минерального компонента компактной костной ткани после проточной делипидации | 439 |
| <u>Е.В. Сорокина, Ю.А. Христофорова, И.А. Матвеева</u> | |
| MCR-анализ спектров комбинационного рассеяния кожи разных фототипов | 447 |
| <u>Д.С. Труфанов, И.О. Антонов</u> | |
| Численные симуляции времяпролетного масс-спектрометра с ионным зеркалом для центра лабораторной астрофизики | 454 |
| <u>С.О. Тучин, И.О. Антонов</u> | |
| Численное моделирование взаимодействия молекулярно-ионного кубита с радиочастотным электромагнитным полем | 462 |
| <u>В.К. Урюпина, К.А. Целогородцев, Е.В. Разуева, Н.Н. Лосевский</u> | |
| Формирование вихревых полей для оптической манипуляции | 470 |
| <u>А.А. Акимов, В.Д. Фомина</u> | |
| Четырехволновое взаимодействие на резонансной нелинейности при наличии обратной связи | 476 |

**ЛЕКЦИИ ВЕДУЩИХ УЧЕНЫХ
И ПРИГЛАШЕННЫЕ ДОКЛАДЫ.
АННОТАЦИИ**

ДИЗАЙН МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИХ КООРДИНАЦИОННЫХ ПОЛИМЕРОВ И ВОДОРОДНО-СВЯЗАННЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСОВ С ПРАКТИЧЕСКИ ЗНАЧИМЫМИ ОПТИЧЕСКИМИ СВОЙСТВАМИ

Е.В. Александров^{1,2,3}

¹Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева РАН

²Самарский государственный технический университет

³Самарский государственный медицинский университет

Металл-органические координационные полимеры (МОКП) и водородно-связанные органические каркасы (ВОК) представляют самую широкую область применения топологических методов анализа и дизайна. Разнообразие структур и свойств этих соединений обусловлено топологией связывания строительных единиц в кристаллические структуры. Мы разработали топологические методы анализа и осуществили синтез, структурные и оптические исследования для разработки принципов дизайна МОКП с практически значимыми оптическими свойствами.

Для 22 новых МОКП Cd(II) и Zn(II) с полимидазолатными и поликарбонатными лигандами обнаружена люминесценция в синей области спектра при возбуждении ультрафиолетовым излучением. Топология базовой сетки определяет наличие доступных каналов в МОКП, и адсорбция электронодефицитных нитроароматических соединений вызывает тушение люминесценции обратно пропорционально концентрации нитроароматических соединений в растворе.

Один каркас улавливает катионы Eu³⁺ и Tb³⁺ из водного раствора, что придает ему характеристический люминесцентный отклик.

Два новых МОКП демонстрируют зависимость излучательных свойств от степени их взаимопроникновения.

Микрорамановская спектроскопия помогла подтвердить состав трех новых МОКП с рекордной степенью взаимопроникновения.

Установлено, что нецентросимметричные кристаллы новых соединений 4,5,6-тригидроксиизофталевой кислоты способны генерировать вторую оптическую гармонику с эффективностью почти в 5 раз выше дигидрофосфата калия.

В пяти новых ВОК объединение порфириновых фотосенсибилизаторов и каталитических металло-центров на поверхности пор позволяет катализировать фотовосстановление CO₂ до CO.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ 18-73-10116 «Методы топологического дизайна координационных полимеров».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. A.V. Sokolov, A.V. Vologzhanina, E.D. Barabanova, S.Y. Stefanovich, P.V. Dorovatovskii, I.V. Taydakov, E.V. Alexandrov *Chem. Eur. J.* 2021. 27. 9180–9192.
2. Y. Sun, X. Chen, F. Wang, R. Ma, X. Guo, S. Sun, H. Guo, E.V. Alexandrov *Dalton Trans.* 2019. 48. 5450.
3. R. Ma, X. Guo, Y. Sun, F. Wang, S. Sun, T. Zhou, S. Liu, H. Guo, E. V. Alexandrov *Inorg. Chem. Acta.* 2019. 496, 119032.
4. S. Liu, M. Guo, Y. Sun, H. Guo, X. Guo, E. V. Alexandrov *Inorg. Chim. Acta.* 2018. 474. 73.
5. S. Liu, Y. Yan, M. Guo, H. Guo, X. Guo, E.V. Alexandrov *Inorg. Chim. Acta.* 2016. 453. 704.
6. S. Sun, Y. Sun, H. Guo, X. Fu, M. Guo, S. Liu, X. Guo, L. Zhang, E. V. Alexandrov *Inorg. Chim. Acta.* 2018. 483. 165.
7. M. Guo, F. Wang, R. Ma, X. Guo, S. Sun, Y. Sun, S. Liu, H. Guo, E. V. Alexandrov *Cryst. Growth Des.* 2019. 19. 5267–5274.
8. D. Blasi, S. Quici, S. Orlandi, P. Mercandelli, A. V. Sokolov, E. V. Alexandrov, L. Carlucci *CrystEngComm*, 2022, 24 (30), 5474–5486.
9. Q. Wen, M. C. Gregorio, L. Shimon, I. Pinkas, N. Malik, A. Kossoy, E. Alexandrov, D. M. Proserpio, M. Lahav, M. E. Boom *Chemistry – A European Journal*, 2022, 28 (54), e202201108.
10. Q. Yin, E.V. Alexandrov, D.-H. Si, Q.-Q. Huang, Z.-B. Fang, Y. Zhang, A.-A. Zhang, W.-K. Qin, Y.-L. Li, T.-F. Liu, D. M. Proserpio *Angewandte Chemie*, 2022, 61 (6), e202115854.

ЦЕНТРЫ ОКРАСКИ В АЛМАЗАХ: ОТ КВАНТОВЫХ СЕНСОРОВ ДО КВАНТОВОГО ИНТЕРНЕТА

К.Н. Болдырев

ИСАН (Москва, Троицк)

В лекции будет представлен обзор по алмазной фотонике: сенсорике, алмазных лазерах, алмазных композитных материалах фотоники и др.

ОПТИЧЕСКОЕ ПРОСВЕТЛЕНИЕ БИОТКАНЕЙ: СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ

Э.А. Генина

*Саратовский национальный исследовательский университет
имени Н.Г. Чернышевского, Саратов*

Оптическое просветление тканей (ОПТ) — быстро развивающаяся область исследований, связанная с необходимостью глубокой визуализации биотканей. Прозрачность ткани позволяет наблюдать неоднородности, расположенные внутри ткани или скрытые под ней, не нарушая ее целостности. Ежегодно количество предлагаемых новых протоколов и подходов растет почти в геометрической прогрессии, среди наиболее развитых можно назвать CLARITY, CUBIC, DISCO, Scale и другие. В последнее время вышло несколько обзорных статей и книг, связанных с этой областью. Данная работа является попыткой обобщить текущее состояние дел в области ОПТ *in vitro*, *ex-vivo* и *in-vivo*. Также рассматриваются краткая история развития методов ОПТ, основные механизмы оптического просветления, проблемы, стоящие на пути внедрения ОПТ в клиническую практику, и пути их решения. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-52-56005.

КВАНТОВЫЕ СТАНДАРТЫ ЧАСТОТЫ: ПРИНЦИПЫ И ПРИМЕНЕНИЯ

М.А. Губин

ФИАН, Москва

Точные измерения времени и частоты служат основой фундаментальных теорий, стремящихся все более точно описывать наш мир и, одновременно, без них невозможны самые современные технологии. Наиболее яркие примеры - глобальные коммуникационные сети и системы высокоточной навигации, включая космический и наземной сегменты. Это значит, что слаженно работающие источники стабильной частоты непосредственно влияют на развитие экономик государств.

В лекции будет кратко представлен путь развития квантовых стандартов времени и частоты начавшийся примерно 100 лет назад, практически одновременно с квантовой механикой, отражены наиболее яркие поворотные моменты их развития и диверсификация по параметрам и применениям.

Тема стандартов частоты, основанных на высокостабильных генераторах, тесно связана с именем Николая Геннадиевича Басова: работая над ней, он пришел к открытию новой области науки – квантовой радиофизики, распространив своей принципы на оптический диапазон спектра, что привело к революционным изменениям в технологиях и научным открытиям, в том числе, основанным на высокоточных измерениях частоты и времени.

**НАБЛЮДЕНИЕ ЭФФЕКТА АНТИГРУППИРОВКИ ФОТОНОВ В
ЗАМЕДЛЕННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ОДИНОЧНЫХ
СУБМИКРОННЫХ КРИСТАЛЛОВ ПЕРОВСКИТОВ MAPbI_3**

**И.Ю. Еремчев¹, А.О.Тарасевич¹, М.А. Князева¹, Дж. Ли², А.В. Наумов¹,
И.Г. Щерблыкин²**

¹*Институт спектроскопии РАН, Троицк, Москва*

²*Университет г. Лунд, Швеция*

Невозможность излучения двух (и более) фотонов люминесценции одновременно характерно для ряда одиночных квантовых излучателей: атомов, хромофорных молекул, примесных центров в твердотельных матрицах, квантовых точек, π -сопряженных полимеров в определенной конформации. Данный эффект, называемый антигруппировкой фотонов, может иметь различную природу: например, в случае квантовых точек запрет на одновременное излучение двух фотонов связан с безызлучательными Оже-процессами. В случае же классической двухуровневой системы: участвующий в процессе поглощение-испускание валентный электрон не может быть одновременно возбужден дважды, а, следовательно, не может быть двух одновременно излученных фотонов. В эксперименте наблюдение эффекта антигруппировки фотонов в кросскорреляционной функции второго порядка $g(2)(\tau)$ позволяет проверять «единичность» исследуемого квантового излучателя или же оценивать число идентичных независимых одиночных излучателей, дающих вклад в люминесцентный сигнал. Помимо этого, исследование антигруппировки фотонов и ее эволюции на временных масштабах, сравнимых с временем затухания люминесценции, позволяет получать ценную информацию о фотофизических процессах во взаимодействующих многохромофорных системах.

В данной работе приводятся результаты исследования люминесцентных свойств одиночных субмикронных кристаллов перовскитов MAPbI_3 . Основной акцент был сделан на исследовании статистики фотонов люминесценции. Обнаружено, что в замедленной компоненте люминесценции может наблюдаться эффект антигруппировки фотонов, который сильнее проявляется для фотонов с большим временем задержки. При этом сигнал быстрой компоненты соответствует статистике, характерной для классиче-

ского источника излучения. Полученные результаты были объяснены моделью рекомбинации электрон-дырочных пар, учитывающей захват и последующее высвобождение носителей заряда с малого числа (вплоть до единичных) дефектных уровней, находящихся близи зоны проводимости (или валентной зоны). Показаны перспективы использования техники анализа временной эволюции $g(2)(0)$ для исследования свойств дефектных состояний в перовскитах на единичном уровне.

Работа была проведена в рамках проекта, поддержанного грантом РФФИ № 20-12-00202.

МУЛЬТИМОДАЛЬНЫЕ ЛАЗЕРНО СИНТЕЗИРОВАННЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ ДЛЯ ЛУЧЕВОЙ ТЕРАПИИ

И.Н. Завестовская

ФИАН, Москва

Доклад посвящен вопросам производства наночастиц для биомедицинских применений с использованием технологий лазерной абляции и фрагментации. Отмечено, что разработанные технологии лазерного синтеза в воде позволяют получать наночастицы заданного размера и свойств, и особой химической чистоты. Акцент сделан на наличие комплекса свойств в одной наносистеме, позволяющих разрабатывать мультимодальные биомедицинские технологии. Приведен анализ биофотонных свойств, фотодинамического нагрева и полиморфной трансформации. Приведены примеры использования указанных наносистем в биомедицине.

Н.Г. БАСОВ – ПИОНЕР И ОРГАНИЗАТОР ЛАЗЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ В СССР

И.Г. Зубарев

ФИАН, Москва

Продолжая заниматься исследованием молекулярных генераторов Н.Г. Басов начиная с 1956 г. начал размышлять над проблемой создания квантовых генераторов оптического диапазона. Для решения этой проблемы он привлёк к работе многих специалистов разных оптических направлений. В итоге в 1958 г. он приступил к организации первой в СССР и в мире целевой программы по созданию лазерных источников, которую начал реализовывать с 1959 г. После успешного завершения этой программы в 1961 г. Н.Г. Басов организовал первое в СССР «Постановление ЦК КПСС и СМ СССР» по разработке лазеров специального назначения, с которого лазерные исследования приобрели общесоюзный размах.

КВАНТОВЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОДИНОЧНЫХ ИОНОВ

Н.Н. Колачевский

ФИАН, Москва

Лазерно-охлажденные ионы, захваченные в ловушки Пауля, являются одной из наиболее перспективных платформ для выполнения квантовых вычислений. На их базе созданы универсальные квантовые процессоры, продемонстрирована работа ключевых алгоритмов, показана работа первых логических кубитов. В докладе обсуждаются принципы работы и перспективы развития данного направления, а также представлены результаты работ по созданию ионного квантового компьютера в ФИАНе.

РОЛЬ Н.Г.БАСОВА В СОЗДАНИИ НА ДАЛЬНЕМ ВОСТОКЕ РОССИИ НАУЧНОЙ ШКОЛЫ ЛАЗЕРНОЙ ФИЗИКИ

Ю.Н. Кульчин

*Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН, г. Владивосток
kulchin@iacp.dvo.ru*

14 декабря 2022 г. мы будем отмечать 100-летний Юбилей выдающегося русского физика, лауреата Нобелевской премии, Ленинской и Государственной премии СССР, дважды Героя Социалистического Труда академика Н.Г.Басова. В 1971 году Н.Г. Басов создал в Московском инженерно-физическом институте (МИФИ) Высшую школу физиков, которая изначально была названа Специальным факультетом физики МИФИ. Тем самым, предвосхищая время, Н.Г.Басов заложил основы одного из самых прогрессивных подходов в организации образовательного процесса, который, наряду с высоким уровнем фундаментальной подготовки, предполагал глубокое погружение студентов в творческий исследовательский процесс в самых современных физических лабораториях институтов Академии наук СССР и, прежде всего, Физического института АН СССР им П.Н. Лебедева (ФИАН). Зачислялись в Высшую школу физиков лучшие студенты третьекурсники из региональных и республиканских высших учебных заведений. В числе студентов, отобранных в 1972 году для обучения в Высшей школе физиков МИФИ-ФИАН, оказался и автор настоящего сообщения, который в ту пору был студентом физического факультета Дальневосточного государственного университета. После окончания в 1976 году обучения в МИФИ, я вернулся в г. Владивосток, где и работаю уже более 40 лет. За эти годы, не прерывая своей тесной связи с МИФИ и ФИАНом, автору удалось создать одну из ведущих школ Российской Федерации в области лазерной физики, в которой широким фронтом ведутся исследования по следующим направлениям:

- Лидары и лидарно-спутниковые комплексы;
- Лазерная спектроскопия;
- Взаимодействие излучения с веществом:
 - низкопороговая нелинейная оптика;
 - топологическая фотоника;

- лазерная абляция;
- лазерные технологии обработки материалов.
- Волноводные сенсоры;
- Адаптивная оптика;
- Нано- плазмоника;
- Фотоника наносистем;
- Биофотоника.

В настоящем докладе автор ставит своей целью рассказать о роли Н.Г. Басова и созданной им Высшей школы физиков МИФИ-ФИАН в создании и развитии на Дальнем Востоке России Научной школы Лазерной физики.

ЭФФЕКТЫ СПИН-ОРБИТАЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СВЕТА: ВКЛАД СОВЕТСКОЙ И РОССИЙСКОЙ НАУКИ

Н.Д. Кундикова

*Институт электрофизики Уро РАН,
Южно-Уральский государственный университет*

Началом исследований эффектов спин орбитального взаимодействия света следует считать 1936 год, когда было доказано существование спинового углового момента света [1]. Хотя в 1936 году для преобразования спинового углового момента света в механический момент использовалось излучение вольфрамовой лампы, во всех последующих экспериментальных исследованиях использовалось лазерное излучение. Именно Николай Геннадиевич Басов, столетие которого отмечается в этом году, получил в 1964 году Нобелевскую премию за создание лазеров. Эту же премию получили также Александр Михайлович Прохоров и Чарлз Хард Таунс.

Понятие спин-орбитального взаимодействия фотона впервые использовалось при интерпретации оптического эффекта Магнуса как результат влияния поляризации света на его траекторию при распространении поляризованного света в оптическом волокне [2]. После публикации статьи [3] термин «спин-орбитальное взаимодействие фотона» вошел в научный обиход и трансформировался в устойчивое словосочетание «спин-орбитальное взаимодействие света».

Оптический эффект Магнуса можно рассматривать как обратный к эффекту поворота поляризации при распространении света по неплоской территории [4], а сам эффект, как многократный поперечный сдвиг излучения при полном внутреннем отражении [5].

К настоящему времени обнаружено достаточно большое количество эффектов спин-орбитального света как в оптически однородной, так и неоднородной среде, однако основополагающий вклад в развитие данного направления внесли именно советские и российские ученые.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. R. A. Beth, "Mechanical Detection and Measurement of the Angular Momentum of Light," Phys. Rev., vol. 50, no. 2, pp. 115–125, 1936.

2. А. В. Дугин, Б. Я. Зельдович, Н. Д. Кундикова, В. С. Либерман, “Влияние циркулярности поляризации на распространения света в оптическом волокне,” Письма в ЖЭТФ, Т. 53, №. 4, С. 186–188, 1991.
3. V. S. Liberman and B. Y. Zel'dovich, “Spin-orbit interaction of a photon in an inhomogeneous medium,” Phys. Rev. A, vol. 46, no. 8, pp. 5199–5207, 1992.
4. С. М. Рытов, “О переходе от волновой к геометрической оптике,” ДАН СССР, Т. 18, №. 4–5, С. 263–266, 1938.
5. Ф. И. Федоров, “К теории полного отражения,” ДАН СССР, Т. 105, С. 465–468, 1955.

АТМОСФЕРНЫЕ КВАНТОВЫЕ КОММУНИКАЦИИ

И.З. Латыпов

КФТИ ФИЦ КазНЦ РАН

Рассмотрены базовые аспекты построения атмосферных квантовых сетей. Проведены исследования «гибридной» квантовой сети на основе созданных оптических модулей. Рассмотрены новые протоколы квантовой коммуникации на основе квантового хеширования и применения адаптивной оптики для эффективной работы протоколов в турбулентной атмосфере.

ОПТИЧЕСКАЯ НАНОСКОПИЯ ОДИНОЧНЫХ МАКРОМОЛЕКУЛ

А.В. Наумов

ТОП ФИАН, ИСАН, МПГУ, Москва

В настоящей лекции приводится обзор основных достижений в области оптической наноскопии одиночных органических молекул, изолированных в твердых средах, обсуждаются основные принципы, инструментарий, история развития и перспективы данной научной области. Продемонстрированы возможности техники при криогенных температурах, когда возможно детектирование бесфононных спектральных линий (БФЛ), ультравысокочувствительных к параметрам ближайшего (нанометрового) окружения. Анализ временных спектральных траекторий БФЛ и их зависимостей от внешних параметров позволяет измерить индивидуальные параметры низкоэнергетических возбуждений туннельного и фононного типа. Кроме того, могут быть получены данные и о динамике возбужденного состояния самой примесной молекулы, ее фотохимических и фотофизических трансформациях. Особое внимание в лекции будет уделено флуоресцентной наноскопии биомиметических макромолекул, в частности порфиринов и фталацианинов. Помимо флуоресцентной спектроскопии одиночных макромолекул мы приводим примеры высокочувствительной регистрации спектров комбинационного рассеяния света (КРС) органических молекул, в т.ч. в режиме усиленного поверхностью КРС (SERS) с использованием специально синтезированных металлизированных метаповерхностей, изготовленных методом шаблонного синтеза в трековых мембранах. Результаты, приведенные в лекции получены при поддержке гранта РФФИ (20-03-00923), гранта Президента РФ для поддержки ведущих научных школ (НШ-776.2022.1.2).

ФЛУОРЕСЦЕНТНАЯ 3D-НАНОСКОПИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СВЕТОВЫХ ПОЛЕЙ, ПОЛУЧЕННЫХ НА ОСНОВЕ ОПТИКИ СПИРАЛЬНЫХ ПУЧКОВ СВЕТА

**Д.В. Прокопова¹, Н.Н. Лосевский¹, С.П. Котова¹, И.Т. Мынжасаров²,
И.Ю. Еремчев^{2,3,4,5}, А.В. Наумов^{2,3,4,5}**

*¹СФ ФИАН, Самара, ²МФТИ, ³ИСАН,
⁴ТОП ФИАН, Москва, Троцк, ⁵МПУ*

Спиральные пучки света – особый класс световых полей, обладающих свойством структурной устойчивости и претерпевающих поворот распределения интенсивности при распространении и фокусировке, открытые в 90-х годах XX века в Самарском филиале ФИАН В.Г. Волостниковым и Е.Г. Абрамочкиным. Они и световые поля, сконструированные на их основе, нашли применение в самых различных областях, одна из которых трехмерная локализация одиночных излучающих объектов (флуоресцентных белков, одиночных молекул, квантовых точек и др.) с субдифракционной точностью (3D18 наноскопия). В докладе будут рассмотрены методы расчета фазовых дифракционных оптических элементов (ДОЭ), разработанных на основе оптики спиральных пучков света для наноскопии и возможные оптические схемы флуоресцентных наноскопов. Представлены результаты по локализации одиночных коллоидных квантовых точек в продольном направлении с точностью ~10 нм с использованием одной из рассмотренных схем.

УСТРОЙСТВА НА ОСНОВЕ СУЖЕННЫХ ВОЛОКОН

А.В. Шкалик

КФТИ ФИЦ КазНЦ РАН

Оптические кварцевые волокна нашли широкое применение для создания волоконно-оптических линий связи, для научных исследований как в различных областях физики, медико-биологических исследованиях, так и при создании различных диагностических систем. При этом волокна используются и как средство связи, так и непосредственно для создания чувствительных элементов на различные физические изменения. В этом отношении целесообразно использовать волоконные датчики и периферийные устройства, так как оптические волокна могут служить одновременно как чувствительный элемент и как средство передачи информации. В частности, большими преимуществами обладает волоконно-оптический микрофон, так как он позволяет записывать звуковую информацию без электромагнитных помех и передавать ее непосредственно по волоконной линии связи. При этом наиболее технологически удобны датчики на основе суженного волокна, так как в таких датчиках излучение не выходит из волокна, и поэтому монолитность конструкции системы не нарушается. В данной работе анализируются суженные волокна, получаемые методом высокотемпературного растяжения и возможность применения датчиков вибраций на их основе для контроля возникновения аварийных ситуаций. Целью данной работы является внедрение недавних достижений в области разработки и изготовления суженного оптического волокна для изготовления волоконно-оптических устройств. Проведено исследование технологических процессов изготовления датчиков вибраций на основе одномодового волокна и экспериментально исследованы характеристики полученных датчиков.

**ВЛИЯНИЕ ВВЕДЕНИЯ АПКОНВЕРСИОННЫХ НАНОЧАСТИЦ,
ПОКРЫТЫХ ОБОЛОЧКОЙ CaCO_3 , НА ОПТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ
БИОЛОГИЧЕСКИХ ТКАНЕЙ В ОБЛАСТИ РАЗВИТИЯ ОПУХОЛИ**

**Д. К. Тучина^{1,2}, Е. Н. Лазарева^{1,3}, Р. А. Анисимов¹, Р. А. Верховский¹,
М. В. Ломова¹, А. А. Доронкина¹, А. М. Мыльников⁴,
Н. А. Наволокин⁴, В. И. Кочубей^{1,3}, И. Ю. Янина^{1,3}**

*¹ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский
государственный университет имени Н.Г. Чернышевского»
(410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83)*

*²Институт биохимии им. А.Н. Баха ФИЦ Биотехнологии РАН
(119071, г. Москва, Ленинский проспект, дом 33, строение 2)*

*³Национальный исследовательский Томский государственный
университет (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36)*

*⁴ФГБОУ ВО «Саратовский государственный медицинский университет
имени В. И. Разумовского» Министерства здравоохранения Российской
Федерации (410012, г. Саратов, ул. Большая Казачья, 112)
e-mail: irina-yanina@yandex.ru*

В настоящее время активно развиваются оптические лечебно-диагностические методы, отличающиеся быстротой, малоинвазивностью и доступностью [1, 2]. В реализации таких методов помогают наноконтейнеры для адресной доставки [3]. В таких случаях в качестве носителей используют пористые частицы CaCO_3 , оказывающие слабое цитотоксическое действие на живые клетки [4, 5]. Например, наноконтейнеры с красителями используются в фотодинамической терапии (ФДТ) для замедления роста опухолевой ткани [6, 7]. Однако важно знать оптические свойства тканей в зоне фотодинамического воздействия, так как это позволяет оценить влияние наноконтейнеров на оптические свойства тканей в зоне облучения, что необходимо учитывать при расчете загрузки действующего агента в носитель.

Одним из перспективных материалов для развития методов фототерапии являются функционализированные апконверсионные наночастицы (АКНЧ), которые могут способствовать не только увеличению эффектив-

ности ФДТ [8-11], но и оказывать дополнительный фототермический эффект с одновременным контролем температуры области терапии [8-12].

В данном исследовании показано изменение оптических параметров, таких как коэффициент поглощения, коэффициент рассеяния, коэффициент анизотропии, биологических тканей до и после введения АКНЧ, покрытых оболочка CaCO_3 , взятых из зоны развития опухоли. Измерения проводились *ex vivo* при комнатной и физиологической температурах, что позволяет приблизить полученные данные к реальным условиям проведения фотодинамической терапии.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 21-72-10057, <https://rscf.ru/project/21-72-10057/>

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. V.V. Tuchin, J. Popp, V. Zakharov, *Multimodal Optical Diagnostics of Cancer* (Springer), (2020).
2. V.V. Tuchin, *Tissue Optics: Light Scattering Methods and Instruments for Medical Diagnostics* (3rd ed., PM 254, SPIE Press, Bellingham, WA) (2015).
3. H. Chang, J. Xie, B. Zhao, B. Liu, S. Xu, N. Ren, X. Xie, L. Huang, W. Huang, Rare earth iondoped upconversion nanocrystals: synthesis and surface modification, *Nanomaterials*, Vol. 5(1), pp.1-25, (2015).
4. X. Li, Y. Tang, L. Xu, X. Kong, L. Zhang, Y. Chang, H. Zhao, H. Zhang, X. Liu, Dependence between cytotoxicity and dynamic subcellular localization of upconversion nanoparticles with different surface charges, *RSC Adv.*, vol. 7 (53), pp. 33502–33509 (2017).
5. C. Wang, M. He, B. Chen, B. Hu, Study on cytotoxicity, cellular uptake and elimination of rare-earth-doped upconversion nanoparticles in human hepatocellular carcinoma cells, *Ecotoxicol. Environ. Saf.*, vol. 203, (110951), pp. 1–10, (2020).
6. M. H. Abdel-Kader, *Photodynamic therapy* (Springer-Verlag Berlin An), (2016).
7. H.S. Qian, H.C. Guo, P.C. Ho, R. Mahendran, Y. Zhang, Mesoporous-Silica-Coated UpConversion Fluorescent Nanoparticles for Photodynamic Therapy, *Small*, vol. 5 (20), pp. 2285-90, (2009)
8. Kumar B, Murali A, Bharath AB, Giri S. Guar gum modified upconversion nanocomposites for colorectal cancer treatment through enzyme-responsive drug release and NIR-triggered photodynamic therapy. *Nanotechnology*. 2019 Aug 2;30(31):315102. doi: 10.1088/1361-6528/ab116e. Epub 2019 Mar 20. PMID: 30893650.

9. Guan, M., Dong, H., Ge, J. et al. Multifunctional upconversion–nanoparticles–trismethylpyridylporphyrin–fullerene nanocomposite: a near-infrared light-triggered theranostic platform for imaging-guided photodynamic therapy. *NPG AsiaMater* 7, e205 (2015).
10. Wang C., Cheng L., Liu Z. Upconversion nanoparticles for photodynamic therapy and other cancer therapeutics // *Theranostics*. 2013. Vol. 3, № 5. P. 317. DOI: 10.7150/thno.5284
11. Wang C., Tao H., Cheng L., Liu Z. Near-infrared light induced in vivo photodynamic therapy of cancer based on upconversion nanoparticles // *Biomaterials*. 2011. Vol. 32, № 26. P. 6145-6154. DOI: 10.1016/j.biomaterials.2011.05.007.
12. Qian H.S., Guo H.C., Ho P.C., Mahendran R., Zhang Y. Mesoporous-Silica-Coated Up-Conversion Fluorescent Nanoparticles for Photodynamic Therapy // *Small*. 2009. Vol. 5, № 20. P. 2285-90. DOI: 10.1002/sml.200900692

**СЕКЦИЯ АСПИРАНТОВ
И МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ**

ФУНКЦИИ ХЕШИРОВАНИЯ НА ОСНОВЕ МНОГОМЕРНЫХ ОДНОФОТОННЫХ СОСТОЯНИЙ

Д.О. Акатьев¹, А.В. Васильев^{1,2}, Н.М. Шафеев^{1,2}, Ф.М. Албаев²,
А.А. Калачев^{1,2}

¹ Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского ФИЦ

Казанский научный центр РАН

(420029, г. Казань, ул. Сибирский тракт, д. 10/7)

²Казанский федеральный университет,

(420008, г. Казань, ул. Кремлевская, д. 18)

e-mail: akatevdmirijj@gmail.com

В работе были реализована квантовая функция хеширования на основе многомерных однофотонных состояний света в базисе мод орбитального углового момента света. Показано, что использование состояний высокой размерности позволяет сократить количество носителей информации для реализации протоколов квантового хеширования.

Ключевые слова: однофотонные состояния, орбитальный угловой момент света, хеширование.

1. ВВЕДЕНИЕ

Протоколы хеширования информации широко используются во многих областях криптографии, например, верификации сообщений, квантовой цифровой подписи и др. [1, 2], поэтому, перенос процесса хеширования в квантовую плоскость является актуальной задачей. Хеш-функции обладают двумя основными свойствами: устойчивости к коллизиям – вероятность наблюдения одинаковых результатов хеширования при разных входных сообщениях; свойство однонаправленности – функция хеширования легко вычисляется, но обратное преобразование практически невозможно произвести. Вероятность возникновения коллизий в процессе хеширования стало основной целью нашего исследования. Основной концепт квантового хеширования на основе кубитов с орбитальным моментом был предложен нами в работе [3]. Однако, многомерные однофотонные состояния являются более перспективные для реализации различных протоколов квантовой информатики, так как это позволяет увеличить информационную емкость квантовых состояний и уменьшить количество носителей информации для реализации протоколов. Поэтому нами было исследовано вероятность

возникновения коллизий для процесса хеширования малого объема информации (8 бит) в некоторое количество многомерных однофотонных состояний (кудитов), генерируемых в базисе орбитального углового момента света.

2. ФУНКЦИЯ ХЕШИРОВАНИЯ НА ОСНОВЕ КУДИТОВ В БАЗИСЕ МОД ОРБИТАЛЬНОГО УГЛОВОГО МОМЕНТА СВЕТА

2.1. Многомерные однофотонные состояния с орбитальным угловым моментом света

Для реализации квантовой функции хеширования мы генерировали кудиты с помощью спонтанного параметрического рассеяния света (СПР). Если излучение накачки будет обладать ОУМ, то в условиях фазового синхронизма СПР, рожденные пары фотонов (сигнального и холостого фотонов) будут обладать ОУМ, причем будет формироваться закон сохранения ОУМ $l_p = l_s + l_i$ [4]. Для создания одиночных изолированных одиночных кудитов, мы фильтровали в холостом канале состояния, которые соответствуют фундаментальной моде $l_i = 0$. В этом случае, вся информация о пространственной структуре излучения накачки будет переноситься на сигнальный фотон $l_p = l_s + 0 \Rightarrow l_p = l_s$.

Для исследования свойств хеш-функции мы получили многомерные квантовые состояния света размерности $d = 2, 3, 4$ в базисе мод орбитального углового момента $l = -3, -2, \dots, 2, 3$. Примеры таких состояний показаны ниже.

$$|\psi_j^{d=2}(\varphi_1)\rangle = |2\rangle + e^{i\varphi_1}|-2\rangle, \quad (1)$$

$$|\psi_j^{d=3}(\varphi_2, \varphi_3)\rangle = |2\rangle + e^{i\varphi_2}|-2\rangle + e^{i\varphi_3}|0\rangle, \quad (2)$$

$$|\psi_j^{d=4}(\varphi_4, \varphi_5, \varphi_6)\rangle = |3\rangle + e^{i\varphi_4}|-3\rangle + e^{i\varphi_5}|1\rangle + e^{i\varphi_6}|-1\rangle, \quad (3)$$

Для определения точности воспроизведения и степени чистоты генерируемых состояний, была реализована процедура квантовой томографии пространственных состояний света, описанная в работе [5]. Для примера, были восстановлены матрицы плоскости для состояний $|\psi_j^{d=2}(\frac{2\pi}{3})\rangle$ и $|\psi_j^{d=3}(0,0)\rangle$.

Матрицы плотности данных состояний представлены ниже.

$$\rho_{|\psi_j^{d=2}(\frac{2\pi}{3})\rangle}^{exp} = \begin{pmatrix} 0.500 \pm 0.004 & -0.251 \pm 0.001 - (0.432 + 0.001)i \\ -0.251 \pm 0.001 - (0.432 + 0.001)i & 0.499 \pm 0.004 \end{pmatrix}$$

$$\rho_{|\psi_j^{d=3}(0,0)\rangle}^{exp} = \rho_{|\psi_j^{d=3}(0,0)\rangle}^{real} + i \rho_{|\psi_j^{d=3}(0,0)\rangle}^{imag},$$

$$\rho_{|\psi_j^{d=3}(0,0)\rangle}^{real} = \begin{pmatrix} 0.332 \pm 0.002 & 0.328 \pm 0.005 & 0.33 \pm 0.005 \\ 0.328 \pm 0.005 & 0.334 \pm 0.01 & 0.332 \pm 0.002 \\ 0.33 \pm 0.005 & 0.332 \pm 0.002 & 0.334 \pm 0.009 \end{pmatrix},$$

$$\rho_{|\psi_j^{d=3}(0,0)\rangle}^{imag} = \begin{pmatrix} 0 & 0.002 \pm 0.003 & 0.002 \pm 0.003 \\ -(0.002 \pm 0.003) & 0 & -(0.002 \pm 0.001) \\ -(0.002 \pm 0.003) & 0.002 \pm 0.001 & 0 \end{pmatrix}.$$

Для того чтобы определить точность воспроизведения генерируемых состояний, была вычислена величина (fidelity)

$$F = \left[Tr \left(\sqrt{\sqrt{\rho_{target}} \rho^{exp} \sqrt{\rho_{target}}} \right) \right]^2 \quad [6], \text{ где } \rho_{target} \text{ и } \rho^{exp} \text{ теоретическая и}$$

экспериментально восстановленные матрицы плотности. Для исследуемых квантовых состояний fidelity составили $F_{d=2} = 0.99 \pm 0.01$ и $F_{d=3} = 0.987 \pm 0.012$. Для определения чистоты генерируемых многомерных однофотонных состояний, мы вычислили собственные значения восстановленных матриц плотности. Для чистых состояний первое и наибольшее собственное значение должно быть равно 1. Для восстановленных матриц плотности наибольшие собственные значения составили $\lambda_{d=2} = 0.999$ и $\lambda_{d=3} = 0.993$, что соответствует высокой степени чистоты. Экспериментальные данные показывают, что полученные однофотонные состояния (1), (2), (3) воспроизводятся с высокой точностью и высокой степенью чистоты.

2.2. Квантовая функция хеширования на основе многомерных однофотонных состояний

В случае использования многомерных однофотонных состояний, квантовую функцию хеширования можно представить как последовательность изолированных кудитов:

$$|\Psi(x)\rangle = |\psi_1(x)\rangle \otimes |\psi_2(x)\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_m(x)\rangle, \quad (4)$$

где

$$|\psi_j(x)\rangle = |l_1\rangle + e^{i(2\pi s_{j,2}x/q)} |l_2\rangle + \dots + e^{i(2\pi s_{j,d}x/q)} |l_d\rangle, \quad (5)$$

где $|l_j\rangle$ – однофотонное состояние соответствующее моде Лаггера-Гаусса $LG_0^{l_j}$, d – размерность квантового состояния, q – размерность входного классического сообщения, $x \in \{0, 1, 2, \dots, q-1\}$ – классическое сообщение

которое кодируется в фазах m -ого кудита, $s_{i,d}$ – параметр, который отвечает за устойчивость к коллизиям. Основная идея устойчивости к коллизиям – обеспечить минимальную видность между двумя различными результатами хеширования с помощью минимального количества носителей информации. Однако необходимо поддерживать баланс между устойчивостью к коллизиям и вероятностью декодирования исходного классического сообщения из результата хеширования. В квантовом случае, видность между двумя результатами хеширования можно записать как:

$$|\langle \Psi(x_1) | \Psi(x_2) \rangle|^2 = \frac{1}{d^{2m}} \prod_{j=1}^m |1 + e^{i(2\pi s_{j,2}(x_1-x_2)/q)} + \dots + e^{i(2\pi s_{j,d}(x_1-x_2)/q)}|^2. \quad (6)$$

Набор параметров $\{s_{i,d}\}$ выбирался таким образом, чтобы выражение (6) между двумя хеш-функциями $|\Psi(x_1)\rangle$ и $|\Psi(x_2)\rangle$ было минимально для $x_1 \neq x_2$. В нашей работе, мы исследовали вероятность возникновения коллизий мультикудитной хеш-функции для $q = 256$, $d = 2$ и $m = 7$, $d = 3$ и $m = 5$, $d = 4$ и $m = 4$.

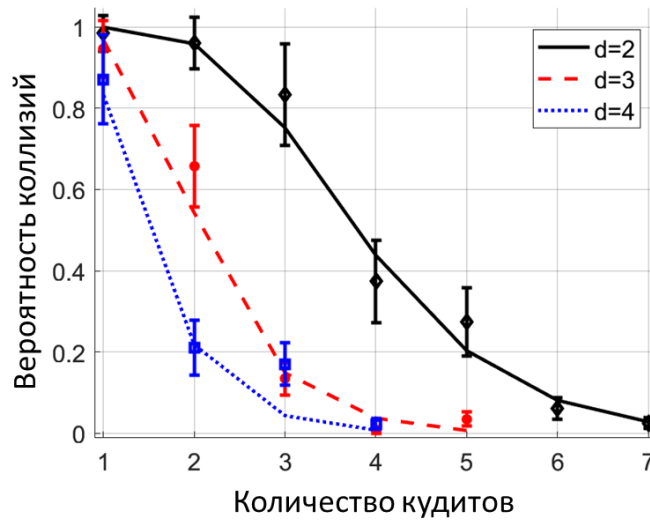


Рисунок 1. Вероятность возникновения коллизий для хеш-функций, построенных на кудитах различной размерности d .

Для экспериментальной реализации был рассмотрен случай, когда $x_2 = 0$, а x_1 подбирался таким образом, что выражение (6) принимало максимальное значение при оптимальных параметрах $\{s_{i,d}\}$.

На рисунке 1 представлены результаты измерения возникновения коллизий в зависимости от количества используемых кудитов для различных размерностей квантовых состояний. Полученные результаты показывают, что предлагаемая техника хеширования может быть полезной для квантового

хеширования малого объема информации. Кроме того, из экспериментальных данных видно, что при увеличении размерности квантовых состояний, количество носителей информации, которые необходимы для достижения оптимальных параметров, уменьшается. Например, если мы ограничимся вероятностью коллизий 0.25 и вероятностью извлечь информацию о входном сообщении 0.15 то, чтобы “хешировать” 8-бит классической информации, необходимо использовать $(d = 2, m = 5)$, $(d = 3, m = 3)$, $(d = 4, m = 2)$.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе были реализованные многомерные однофотонные состояния в базисе мод орбитального углового момента света. Было продемонстрировано, что генерируемые кудиты обладают высокой степенью чистоты. В работе впервые были реализованы квантовые хеш-функция на основе многомерных однофотонных состояний. В частности, были реализованы хеш-функции на основе кутритов $d = 3$ и $d = 4$ куквартов. Было показано, что при увеличении размерности квантовых состояний, количество носителей информации, которые необходимы для достижения оптимальных параметров, уменьшается.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. C. Paar, J. Pelzl, Understanding cryptography: a textbook for students and practitioners // Springer Science & Business Media, 2009.
2. J. Katz, Y. Lindell, Introduction to modern cryptography // CRC press, 2020.
3. D.A. Turaykhanov, Quantum hashing via single-photon states with orbital angular momentum // Physical Review A, 2021, v. 104. Iss. 5, P. 052606.
4. A. Mair, A. Vaziri, G. Weihs, A. Zeilinger, Entanglement of the orbital angular momentum states of photons // Nature, 2001, v. 412, Iss. 6844, P. 313-316.
5. M. Agnew, J. Leach, M. McLaren, F.S. Roux, R.W. Boyd, Tomography of the quantum state of photons entangled in high dimensions // Physical Review A, 2011, v. 84, Iss. 6, P. 062101.
6. R. Jozsa, Fidelity for mixed quantum states // Journal of modern optics, 1994, v. 41, Iss. 12, P. 2315-2323.

QUANTUM HASHING VIA HIGH-DIMENSIONAL STATES

**D.O Akat'ev^{1,2}, A.V Vasiliev^{1,2}, N.M Shafeev^{1,2}, F.M Ablayev¹,
A.A Kalachev^{1,2}**

¹ *Zavoisky Physical-Technical Institute, FRC Kazan Scientific Center, Russian
Academy of Sciences,*

(Sibirskij tract str., 10/7, Kazan, Russia, 420029)

² *Kazan Federal University,*

(Kremlyovskaya str., 18, Kazan, Russia, 420008)

e-mail: akatevdmirijj@gmail.com

In this work we construct a quantum hash via a sequence of high dimensional single-photon states with orbital angular momentum and perform a proof-of-principle experiment. As a result, we experimentally verify the collision resistance of the quantum hash function depending on the number of qudits in use. Moreover, we see that the number of information carriers will decrease with increases the dimension of quantum states for an optimal relation between collision probability and the decoding probability.

Keywords: single photons, quantum hashing, orbital angular momentum.

ИЗУЧЕНИЕ ДИНАМИКИ МОЗГОВОГО КРОВООБРАЩЕНИЯ ЛАБОРАТОРНЫХ ЖИВОТНЫХ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ СПЕКЛ-КОНТРАСТНОЙ ВИЗУАЛИЗАЦИИ

Н.В. Голубова¹, Е.С. Серёгина¹, Е.Ф. Шевцова²,
В.В. Дрёмин¹, Е.В. Потапова¹

¹Орловский государственный университет им. И.С. Тургенева,
Научно-технологический центр биомедицинской фотоники
(302026, г. Орел, ул. Комсомольская, 95)

²Институт физиологически активных веществ РАН,
Лаборатория биомолекулярного скрининга
(142432, Московская область, г. Черноголовка, Северный проезд, 1)
e-mail: nadin.golubova@inbox.ru

В работе описано применение метода лазерной спекл-контрастной визуализации в задачах картирования сосудов головного мозга лабораторных крыс и получения динамических характеристик церебрального кровотока у животных с введением физиологически активного вещества и без него. Показаны результаты проведения вейвлет-преобразования для полученных данных с целью анализа частотных ритмов у двух групп животных.

Ключевые слова: лазерная спекл-контрастная визуализация, мозговое кровообращение, вейвлет-преобразование.

В настоящее время для получения информации о кровотоке применяются различные методы оптической диагностики, в том числе методы лазерной доплеровской флоуметрии и лазерной спекл-контрастной визуализации (ЛСКВ) [1]. Оба метода позволяют определять уровень перфузии тканей кровью, а также производить частотный анализ получаемых сигналов. Однако анализ осцилляций для данных, полученных с помощью ЛСКВ, представляется более перспективным, поскольку обеспечивает визуализацию всей области исследования, а также высокое пространственное и временное разрешение [2].

Данные преимущества позволяют использовать ЛСКВ в задачах изучения воздействия различных фармацевтических препаратов на живые организмы. В частности, была поставлена задача оценки влияния мультитаргетного препарата ТГ-2112х, как перспективного кандидата для лечения

нейродегенеративных заболеваний [3], на микроциркуляцию мозга. Результаты такого исследования могут дать дополнительную информацию о физиологических механизмах действия, расширить спектр применения препарата, или же предоставить сведения о его потенциальной токсичности. Данные о влиянии на микроциркуляторную систему представляют особый интерес в связи с возможным применением нейропротектора ТГ-2112х при ишемических поражениях мозга.

Целью данной работы является визуализация сосудов головного мозга лабораторных крыс и получение динамических характеристик церебрального кровотока у лабораторных животных контрольной группы и группы с введением мультитаргетного препарата ТГ-2112х.

Для проведения исследования использовались лабораторные крысы линии Вистар возрастом 2 месяца. Животные были разделены на 2 группы: контрольная группа, и экспериментальная - с инъекцией препарата ТГ-2112х (в/б, 10 мг/кг). Для приготовления активного раствора сухая смесь ТГ-2112х растворялась в диметилсульфоксиде (ДМСО) и дополнялась физиологическим раствором (ФР) в пропорции 1/9 до общего объема 1 мл. Контрольная группа получала ДМСО/ФР в пропорции 1/9 в том же объеме.

Подготовка животного к регистрации данных включала в себя наркотизацию смесью Золетил/Ксила в стандартных пропорциях и дозах, подключение животного к хирургическому монитору для грызунов Rodent Surgical Monitor+ (Indus Instruments, США), фиксацию черепа крысы в стереотаксисе и удаление кожного покрова в области исследования. Запись данных длилась приблизительно 15 минут и производилась спустя 3 часа после введения раствора, так как согласно предварительным экспериментам в это время достигалась пиковая активность препарата. Все манипуляции с животными были одобрены этическим комитетом Орловского государственного университета (протокол № 10 от 16 октября 2018 г.).

Лазерная спекл-контрастная визуализация осуществлялась с помощью устройства, включающего в себя лазерный источник излучения LDM785 (Thorlabs, США) с длиной волны 785 нм, перед которым помещалась система оптических диффузоров. Спекл-картина регистрировалась монохромной камерой UI-3360CP-NIR-GL Rev 2 через объектив MVL25TM23 (Thorlabs, США) и линейный поляризатор для ближней инфракрасной области излучения.

На полученных изображениях для каждой крысы выделялись три области интереса. Обработка данных включала в себя получение значений спекл-

контраста для этих областей с помощью специально разработанного программного кода на языке Matlab, реализующего пространственно-временной алгоритм. Затем спекл-контраст пересчитывался в перфузию [4], и значения группировались в 2 массива данных, для контроля и препарата TG-2112x соответственно. Примененный к массивам тест Манна-Уитни показал статистически значимые различия между значениями перфузии для группы контроля и группы TG-2112x.

Следующим шагом было проведение вейвлет-преобразования данных перфузии с целью выявления частотных диапазонов, имеющих определенное физиологическое происхождение, и осуществления их количественного анализа. Частота пиков, соответствующих дыхательным и сердечным колебаниям кровотока крыс, была подтверждена с помощью данных, полученных на хирургическом мониторе для грызунов. При анализе амплитуды дыхательных и сердечных колебаний были выявлены различия в средних значениях между двумя группами животных.

Таким образом, полученные данные свидетельствуют о том, что средняя перфузия у животных с инъекцией TG-2112x была статистически значимо ниже по сравнению с перфузией у контрольных животных. Кроме того, амплитуды дыхательных и сердечных колебаний также оказались ниже у животных с инъекцией TG-2112x. Таким образом, при введении в организм мультитаргетного препарата TG-2112x происходят изменения в динамике микроциркуляции крови, которые коррелируют со снижением амплитуды дыхательных и сердечных колебаний. Каково физиологическое значение этого явления, механизм его запуска, предстоит выяснить в дальнейших экспериментах.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда в рамках проекта №22-75-10088.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Piavchenko, G., Kozlov, I., Dremin, V., Stavtsev, D., Seryogina, E., Kandurova, K., Shupletsov, V., Lapin, K., Alekseyev, A., Kuznetsov, S., Bykov, A., Dunaev, A., Meglinski, I. Impairments of cerebral blood flow microcirculation in rats brought on by cardiac cessation and respiratory arrest // *Journal of Biophotonics*. – 2021. – V.14, №12. – P. e202100216.
2. Basak, K., Manjunatha, M., Dutta, P.K. Review of laser speckle-based analysis in medical imaging // *Medical & Biological Engineering & Computing*. – 2012. – V.50, №6. – P. 547–558.

3. Angelova, P.R., Vinogradova, D., Neganova, M.E., Serkova, T.P., Sokolov, V.V., Bachurin, S.O., Shevtsova, E.F., Abramov, A.Y. Pharmacological Sequestration of Mitochondrial Calcium Uptake Protects Neurons Against Glutamate Excitotoxicity // *Molecular neurobiology*. – 2019. – V.56, №3. – P. 2244–2255.
4. Mizeva, I., Dremine, V., Potapova, E., Zherebtsov, E., Kozlov, I., Dunaev, A. Wavelet Analysis of the Temporal Dynamics of the Laser Speckle Contrast in Human Skin // *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*. – 2020. – V.67, №7. – P. 1882-1889.

STUDY OF CEREBRAL CIRCULATION DYNAMICS IN LABORATORY ANIMALS BY LASER SPECKLE CONTRAST IMAGING

**N.V. Golubova¹, E.S. Seryogina¹, E.F. Shevtsova²,
V.V. Dremine¹, E.V. Potapova¹**

*¹Orel State University named after I.S. Turgenev,
Research and Development Center of Biomedical Photonics
(Komsomolskaya st., 95, Orel, Russia, 302026)*

*²Institute of Physiologically Active Substances of the Russian
Academy of Sciences, Laboratory of Biomolecular Screening
(Northern driveway, 1, Chernogolovka, Russia, 142432)
e-mail: nadin.golubova@inbox.ru*

The paper describes the application of laser speckle-contrast imaging in the tasks of mapping the cerebral vascular system of laboratory rats and obtaining dynamic characteristics of cerebral blood flow in animals with and without the injection of a physiologically active substance. The results of the wavelet transform for the data obtained to analyze the frequency rhythms in two groups of animals are shown.

Keywords: laser speckle contrast imaging, cerebral blood flow, wavelet transform.

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК PbS, ПАССИВИРОВАННЫХ МОЛЕКУЛАМИ ТИОГЛИКОЛЕВОЙ КИСЛОТЫ

И.Г. Гревцева, О.В. Овчинников, М.С. Смирнов, К.С. Чирков,
Т.А. Чевычелова

*Воронежский государственный университет
(394018, г. Воронеж, Университетская пл., д. 1)
e-mail: grevtseva_ig@inbox.ru*

В работе представлены результаты исследований закономерностей ИК люминесценции коллоидных квантовых точек сульфида свинца (КТ PbS). Для КТ PbS средним размером 3 ± 0.5 нм продемонстрировано формирование двух пиков люминесценции с максимумами при 1100 нм и 1280 нм, соответственно. На основании данных спектров возбуждения люминесценции установлено, что коротковолновая полоса люминесценции возникает в результате излучательной аннигиляции экситона, а длинноволновая – рекомбинации носителей заряда на локализованных состояниях.

Ключевые слова: квантовые точки сульфида свинца, спектры люминесценции, спектры возбуждения.

1. ВВЕДЕНИЕ

Полупроводниковые коллоидные квантовые точки сульфида свинца (КТ PbS) обладают размерно-зависимыми люминесцентными свойствами в ближней и средней ИК областях, что делает их перспективными материалами для разработки и создания на их основе ИК люминесцентных сенсорных устройств для химических, биомедицинских, информационных и телекоммуникационных технологий [1,2]. Однако, несмотря на высокий практический и научный интерес к полупроводниковым КТ PbS, вопросы, связанные с установлением фотофизических процессов, определяющих люминесцентные свойства КТ PbS, системно не исследованы. В настоящее время большая часть работ посвящена исследованию размерных зависимостей в спектрах поглощения и экситонной люминесценции КТ PbS в различном поверхностном окружении [3,4]. При этом имеющиеся литературные данные весьма противоречивы и требуют уточнений для каждого конкретного случая. Важно отметить, что также отсутствуют подробные данные о люминесцентных свойствах КТ PbS с участием локализованных состояний

структурно-примесных дефектов, наличие которых обусловлено как отклонением состава КТ от нестехиометричности при уменьшении размера кристалла, так и поверхностным окружением. Таким образом, исследование люминесцентных свойств КТ PbS, а также установление механизмов их определяющих, является актуальной задачей современной нанопотоники.

В данной работе представлены результаты исследований закономерностей люминесценции коллоидных КТ PbS, пассивированных молекулами тиогликолевой кислоты (TGA).

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Коллоидные КТ PbS были получены в рамках водной методики синтеза с использованием молекул TGA в качестве пассивирующего лиганда. Для этого в водный раствор TGA (3 ммоль) вносили водный раствор $Pb(NO_3)_2$ (1.5 ммоль) с последующим доведением уровня pH до 9 добавлением NaOH (1 М). Далее в реакционную смесь добавляли водный раствор Na_2S (0.85 ммоль). Полученный коллоидный раствор выдерживали при температуре 25 °С и постоянном перемешивании (300 об./мин) в течении 30 минут.

Структурные исследования выполняли методами просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) и рентгеновской дифракции. Средние размеры КТ PbS в образцах определяли с помощью просвечивающего электронного микроскопа Libra 120 (CarlZeiss, Германия). Распределения по размерам КТ PbS в образце получали при цифровом анализе ПЭМ изображений. Исследования рентгеновской дифракции осуществляли на дифрактометре ARL X'TRA (Switzerland) с использованием излучения $K_{\alpha 1}$ меди.

Спектры поглощения регистрировали спектрометром USB2000+ (Ocean optics) с источником излучения USB-DT (Ocean optics). Спектры люминесценции в ИК области записывали с использованием фотоприёмника PDF 10C/M (ThorlabsInc., USA) с встроенным усилителем и дифракционного монохроматора с решёткой 600 mm^{-1} . Спектры люминесценции корректировали на спектральную характеристику аппаратуры, измеренную при помощи эталонной вольфрамовой лампы накаливания с известной цветовой температурой.

Для получения спектров возбуждения люминесценции использовалась лампа накаливания мощностью 400 Вт и второй монохроматор с решёткой 1200 mm^{-1} , что позволяло получить область возбуждения от 500 до 1300 нм.

Для регистрации спектра люминесценции исследуемого образца при

низких температурах, образец помещался в азотный криостат и охлаждался до 80 К.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЯ

Исследования, выполненные на ПЭМ Libra-120, показали формирование ансамблей отдельных КТ PbS средним размером 3.0 ± 0.5 нм и дисперсией 25-30% (рисунок 1(а)).

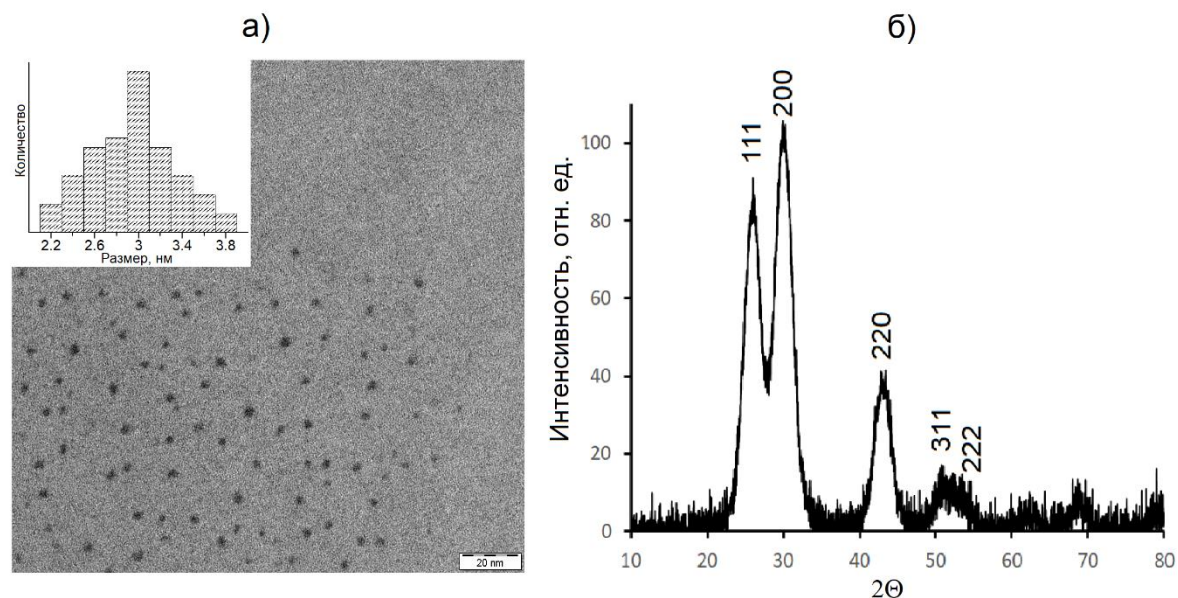


Рис. 1. ПЭМ изображение и гистограмма распределения по размерам КТ PbS (а). Рентгеновская дифракция от образца КТ PbS (б)

На рисунке 1(б) представлены данные рентгеновской дифракции коллоидных КТ PbS. Для всех образцов рефлексы оказались сильно уширены из-за размерного эффекта. Наблюдающиеся пики соотнесены с дифракцией от атомных плоскостей (111), (200), (220), (311), (222), что указывает на формирование нанокристаллов PbS в кубической кристаллической решётке.

На рисунке 2(а) представлены спектрально-люминесцентные свойства полученных образцов КТ PbS. Спектр оптического поглощения не имеет экситонной структуры, при этом заметное поглощение начинается в области длин волн менее 1300 нм (0.95 эВ). Таким образом, край поглощения для КТ PbS оказывается смещён в сторону меньших длин волн относительно края поглощения массивного кристалла PbS, расположенного в области ~ 3025 нм (0.41 эВ) [25], что является проявлением квантового ограничения. Характерный бесструктурный край спектра поглощения КТ PbS может быть обусловлен заметной дисперсией КТ в образце по размеру, а также примесным

поглощением, которое обусловлено высокой концентрацией дефектов в КТ и может быть сопоставимо по интенсивности с экситонным поглощением.

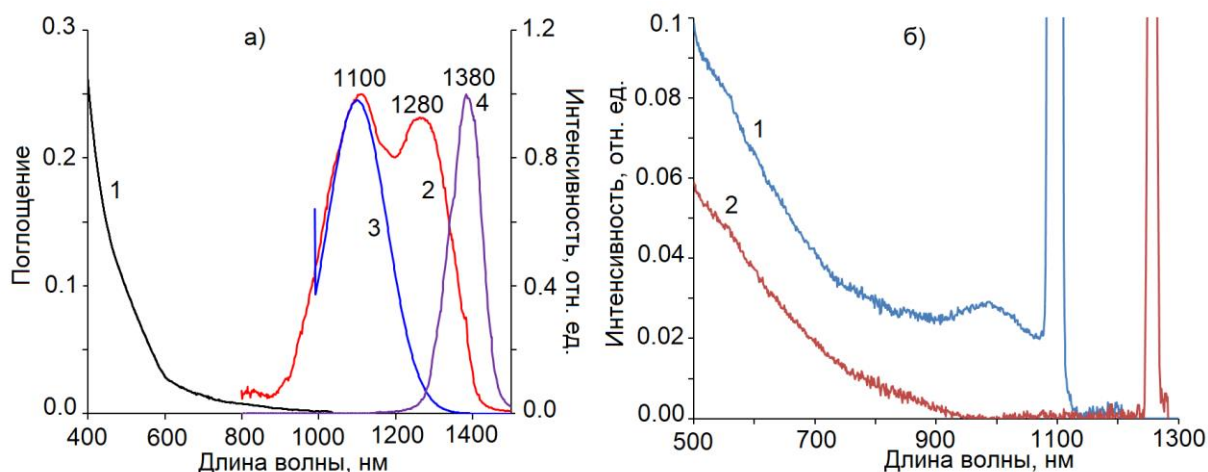


Рис. 2. Спектр поглощения (1) и спектры люминесценции КТ PbS при $T=300$ К возбуждаемые излучением с длиной волны 462 нм (2) и 950 нм (3) и при $T=80$ К (4) – а. Спектры возбуждения КТ PbS в полосе люминесценции 1100 нм (1) и 1280 (2).

При возбуждении коллоидных КТ PbS излучением с длиной волны 462 нм в спектре люминесценции возникает две полосы с максимумами 1100 нм и 1280 нм (рисунок 2(а)). Отсутствие экситонной структуры в спектре поглощения КТ PbS не позволяет установить величину стоковского сдвига для обнаруженных пиков люминесценции. Для установления механизмов свечения были рассмотрены спектры возбуждения люминесценции (рисунок 2(б)). В отличие от спектров поглощения, которые определяются поглощением каждого нанокристалла в образце, в формировании спектров возбуждения участвуют только те КТ, которые излучают на длине волны регистрации свечения. Это позволяет, изменяя длину волны регистрации свечения, в спектрах возбуждения люминесценции добиться селективности по длинам волн.

В спектре возбуждения люминесценции в полосе с максимумом при 1100 нм наблюдается особенность с пиком при 990 нм (рисунок 2(б)). Положение и форма этого пика позволяет его связать с поглощением в основное состояние экситона. В данном случае, стоковский сдвиг пика люминесценции относительно пика экситонного поглощения составляет величину 0.1 эВ. Эта величина характерна для экситонной люминесценции КТ PbS со средним размером около 3-3.5 нм. Напротив, в спектре возбуждения люминесценции в пике при 1280 нм экситонная структура не обнаруживается. Важно отметить, что

возбуждение полосы люминесценции при 1280 нм из пика экситонного поглощения оказывается малоэффективным (рисунок 2 (а)). При этом край полосы возбуждения расположен в области 950 нм, а величина стоксова сдвига возрастает до 0.3 эВ. Это позволяет связать длинноволновую полосу люминесценции с излучательной рекомбинацией носителей заряда на локализованных состояниях.

Если предложенные механизмы люминесценции коллоидных КТ PbS (рекомбинационная и экситонная полосы) верны, и оба пика люминесценции принадлежат каждой КТ в образце, а не отдельным нанокристаллам разного размера, то между интенсивностью полос люминесценции должна существовать некоторая связь. Действительно, при охлаждении образца коллоидных КТ PbS до 80 К полоса люминесценции с максимумом при 1100 нм исчезает, а свечение в полосе с максимумом 1280 нм постепенно смещается в длинноволновую сторону к 1380 нм, т.е. на 0.07 эВ.

Представленные закономерности свидетельствуют о том, что наличие двух пиков в спектре люминесценции при комнатной температуре объясняется тем, что при возбуждении КТ PbS излучением с длиной волны 462 нм преимущественно происходит захват носителей заряда на возбуждённое состояние ловушки. Впоследствии носители заряда могут переходить на экситонный уровень в результате термической активации. Таким образом, носители заряда могут рекомбинировать, как с ловушечного, так и с экситонного уровней. При возбуждении КТ излучением с длиной волны 950 нм происходит прямое возбуждение экситона. Захват носителей заряда на центр рекомбинационной люминесценции, в таком случае, является менее эффективным, чем излучательная аннигиляция экситона, что и объясняет ослабление пика люминесценции, отнесенного к люминесценции от ловушки. Термическая активация перехода на экситонный уровень также может объяснять отсутствие экситонного пика в спектре люминесценции при охлаждении образца до температуры 80 К. Термическое возбуждение носителей заряда с центра люминесценции до экситонного состояния способствует росту заселённости последнего и разгоранию экситонной люминесценции при повышении температуры.

Таким образом, обнаруженная для КТ PbS интенсивная ИК люминесценция в двух полосах – при 1100 нм и 1280 нм соответствует излучательной аннигиляции экситона и рекомбинации носителя заряда на локализованных состояниях.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлены новые закономерности в ИК люминесценции коллоидных КТ PbS, пассивированных молекулами TGA. Обнаружено два пика люминесценции с максимумами при 1100 нм и 1280 нм. При этом в спектрах возбуждения фотолюминесценции коротковолнового пика люминесценции присутствует экситонная структура, а для длинноволнового пика люминесценции экситонная структура в спектре возбуждения не обнаружена. Стоксов сдвиг для коротковолновой полосы составляет 0.1 эВ, а для длинноволновой 0.3 эВ. При этом возбуждение люминесценции непосредственно из области прямого возбуждения экситона приводит к тушению длинноволновой полосы и разгоранию коротковолновой полосы люминесценции. Понижение температуры исследуемого образца КТ PbS до 80 К, способствует тушению коротковолнового пика люминесценции и смещению длинноволнового пика от 1280 нм к 1380 нм. На основании полученных экспериментальных данных вывод о том, что природа коротковолнового пика (1100 нм) связана с излучательной аннигиляцией экситона, а длинноволновый пик (1280 нм) возникает в результате рекомбинации носителей заряда на локализованных состояниях. Сформулирована эмпирическая схема фотопроцессов, учитывающая термическое перераспределение заселённостей экситонного состояния и центра рекомбинационной люминесценции, а также особенности прямого возбуждения рекомбинационной люминесценции.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 22-72-00098

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chen F., Lin Q., Shen H., et. al. Blue quantum dot-based electroluminescent light-emitting diodes. // *Material Chemistry Frontiers*. 2020, v. 4, p. 1340-1365.
2. Peng Y., Wang G., Yuan C., et. al. Influences of oxygen vacancies on the enhanced nonlinear optical properties of confined ZnO quantum dots. // *Journal of Alloys and Compounds*, 2018, v. 739, p. 345-352.
3. Nakashima S., Hoshino A., Cai J., et. al. Thiol-stabilized PbS quantum dots with stable luminescence in the infrared spectral range. // *Journal of Crystal Growth*, 2013, v. 378, p. 542–545.
4. Kolobkova E., Lipatova Z., Abdrshin A., et. al. Luminescent properties of fluorine phosphate glasses doped with PbSe and PbS quantum dots. // *Optical Materials*, 2017, v. 65, p. 124-128.

LUMINESCENT PROPERTIES OF COLLOIDAL PbS QUANTUM DOTS PASSIVATED BY THIOGLYCOLIC ACID MOLECULES

**I.G. Grevtseva, O.V. Ovchinnikov, M.S. Smirnov, K.S. Chirkov,
T.A. Chevychelova**

*Voronezh State University
(394018, Voronezh, Universitetskaya sq., 1)
e-mail: grevtseva_ig@inbox.ru*

The paper presents the results of studies of the regularities of IR luminescence of colloidal lead sulfide quantum dots (PbS QDs). For PbS QDs with an average size of 3 ± 0.5 nm, the formation of two luminescence peaks with maxima at 1100 nm and 1280 nm, respectively, was demonstrated. Based on the data of luminescence excitation spectra, it was established that the short-wavelength luminescence band arises as a result of radiative annihilation of an exciton, and the long-wavelength band arises from the recombination of charge carriers on localized states.

Keywords: lead sulfide quantum dots, luminescence spectra, excitation spectra.

СИНТЕЗ [5]-ГЕЛИЦЕНА В ГАЗОВОЙ ФАЗЕ

М.М. Евсеев¹, О.В. Кузнецов¹, В.Н. Азязов¹

¹Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева РАН
(443011, г. Самара, ул. Ново-Садовая, 221)
e-mail: mihail.evseev.2011@mail.ru

В течение последних десятилетий гелицены — орто-соединённые полициклические ароматические углеводороды (ПАУ), в которых бензольные строительные блоки закружаются под углом в 60°, образуя спиральные молекулы — привлекают значительное внимание учёных, занятых в таких областях науки, как органическая и физическая химия и материаловедение, в силу их уникальных применений в оптике (хироптическая активность, нелинейная оптика и циркулярная поляризация) и хиральном зондировании (химические сенсоры), а также необычных свойств в органокатализе. Здесь мы раскрываем универсальный путь образования гелиценов с помощью направленной винилацетилен-опосредованной газофазной химии. В отличие от традиционных методов синтеза, инновационный газофазный синтез заключается в низкобарьерных реакциях целенаправленного, поэтапного расширения кольца при участии реакций свободных радикалов промежуточных соединений. Мы раскрываем механизм синтеза [5]-гелицена вместе с атомарным водородом в газовой фазе посредством бимолекулярной реакции [4]-гелиценильного радикала с винилацетиленом. Энергии и молекулярные параметры локальных минимумов и переходных состояний, участвующих в реакции, рассчитаны на уровне теории G3(MP2,CC)//B3LYP/6-311G(d,p) с химической точностью 3–6 кДж/моль для относительных энергий и 0.01–0.02 Å для длин связей, а также 1–2 ° для валентных углов. Простой путь синтеза [5]-гелицена посредством реакции [4]-гелиценильного радикала с винилацетиленом представляет собой универсальный путь, который может быть распространён на высшие гелицены.

Ключевые слова: квантовая химия, гелицены.

1. ВВЕДЕНИЕ

Происхождение биологической гомохиральности остается весьма спорной темой [1] с момента её открытия Луи Пастером в 1848 году. На Земле живые организмы выработали строгую гомохиральность с D-сахарами и L-аминокислотами, включенными в рибонуклеиновые кислоты и полипептиды

соответственно. Распространенные пути к гомохиральности подразумевают распространение первичных энантиомерных избытков, таких как идентификация D-обогащенных сахарных спиртов и сахарных кислот, таких как арабиноновая кислота, наряду с L-обогащенными аминокислотами изовалином, α -метилнорвалином, α -метил валин и α -метилнорлейцин в метеоритах Мерчисон и Мюррей. Эти пути могут быть инициированы рацемическими смесями хиральных органических молекул, таких как аминокислоты, сахара и эпоксиды, синтезированных в межзвездной среде на покрытых льдом наночастицах (межзвездных песчинках) внутри молекулярных облаков. Если бы в молекулярном облаке существовал изначальный избыток энантиомеров, этот избыток мог бы передаваться через области звездообразования своим потомкам (планетам, лунам, кометам, метеоритам), что привело бы к гомохиральности жизни на Земле, какой мы ее знаем. Существуют убедительные доказательства доставки энантиомерно обогащенных органических веществ из таких метеоритов, как Мерчисон и Мюррей, на Землю, однако остается открытым вопрос, как D-сахара и L-аминокислоты превосходят по численности L-сахара и D-аминокислоты. Чтобы ответить на этот вопрос, требуется фундаментальное понимание основных путей на молекулярном, микроскопическом уровне.

В настоящей работе расчеты электронной структуры раскрывают путь синтеза рацемических гелиценов – орто-конденсированных полициклических ароматических углеводородов (ПАУ), в которых бензольные строительные блоки образуют спиральные молекулы. Простейший гелицен служит эталоном для раскрытия газофазных химических реакций, ведущих к легкому низкотемпературному образованию 22- π -электронной ароматической молекулы [5]-гелицена ($C_{22}H_{14}$) с атомарным водородом. Молекулярная картина безбарьерных, низкотемпературных процессов роста молекулярной массы гелиценов в холодных молекулярных облаках, таких как ТМС-1 и ОМС-1, возникает в результате ступенчатого аннелирования кольца по одному кольцу за раз посредством бимолекулярных газофазных реакций ароматического гелиценильного радикала с винилацетилен. Ранее предполагалось, что эти процессы протекают только при повышенных температурах в несколько 1000 К, преобладающих в околозвездных оболочках богатых углеродом звезд и планетарных туманностей как их потомков, поскольку входные барьеры, эквивалентные нескольким 100 К, запрещают эти реакции в холодных молекулярных облаках. Хотя раскрытый здесь газофазный механизм приводит к рацематам [5]-гелицена, то есть к смеси

равных количеств энантиомеров, ультрафиолетовое излучение с круговой поляризацией, обнаруженное в направлении области формирования массивных звезд Ориона, может фотолизировать энантиомеры с разной эффективностью в газовой фазе межзвездной среды. Этот процесс может инициировать сложную цепочку реакций, что в конечном итоге приведет к энантиомерному избытку биорелевантных молекул, таких как D-сахара и L-аминокислоты, и, возможно, к гомохиральности в нашей Солнечной системе.

2. МЕТОДЫ

Геометрические структуры, колебательные частоты, энергии локальных минимумов и переходных состояний, участвующих в реакции [4]-гелиценильного радикала с винилацетиленом, рассчитаны на G3(MP2,CC)//B3LYP/6-311G(d,p) уровне теории [2–4]. Этот двухуровневый вычислительный подход включает оптимизацию геометрии и расчет частот колебаний на уровне теории функционала плотности B3LYP с базисным набором 6-311G(d,p). Затем одноточечные энергии оптимизированных структур были уточнены в рамках композитного метода G3(MP2,CC). Для расчетов методом связанных кластеров степень многореферентности волновых функций контролировалась с помощью T1-диагностики. Используемый теоретический метод способен обеспечить химическую точность 3–6 кДж/моль для относительных энергий и 0,01–0,02 Å для длин связей, а также 1–2° для валентных углов. Для расчетов B3LYP и G3(MP2,CC) использовались пакеты программ GAUSSIAN 09 [5] и MOLPRO 2021 [6].

3. РАСЧЁТЫ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ

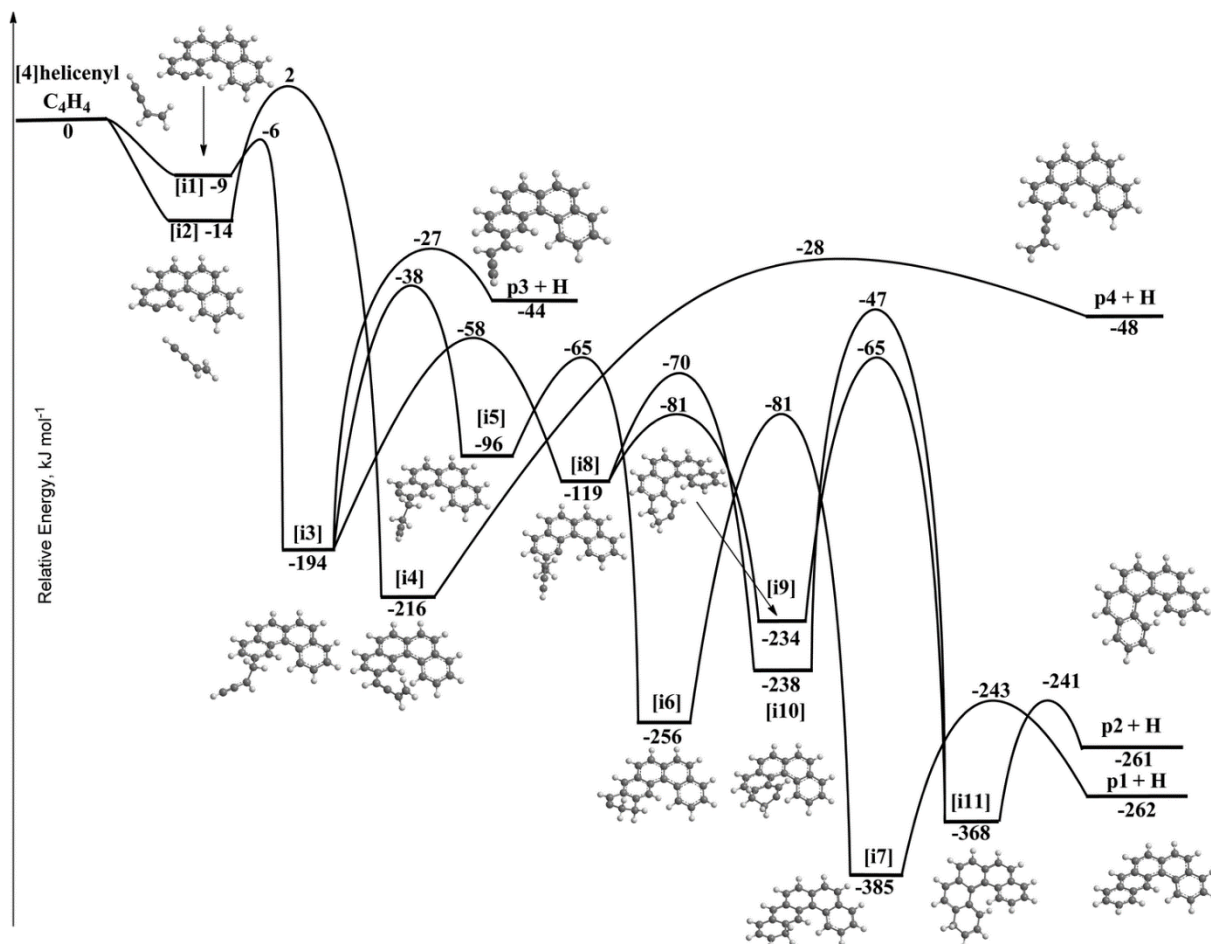


Рис. 1. Поверхность потенциальной энергии реакции [4]-гелиценила ($C_{18}H_{11}$) с винилацетиленом (C_4H_4). Поверхность была рассчитана на уровне теории $G3(MP2,CC)//B3LYP/6-311G(d,p)$. Относительные энергии даны в кДж/моль

Расчеты показывают, что [4]-гелиценильный радикал может безбарьерно приближаться к винилацетиленовому реагенту, что приводит к образованию двух возможных ван-дер-ваальсовых комплексов [i1] и [i2]. Эти комплексы стабилизированы на 9 и 14 кДж/моль по отношению к разделённым реагентам и характеризуются углерод-углеродным расстоянием между радикальным центром бензо[с]фенантрен-2-ильного радикала с винильным (C1) и ацетиленовым (C4) атомами углерода винилацетилена 409 и 388 п.м. соответственно. Комплексы Ван-дер-Ваальса могут изомеризоваться путем присоединения радикального центра к винильному (C1) и ацетиленовому (C4) фрагментам через барьеры 3 и 16 кДж/моль с образованием интермедиатов [i3] и [i4]. Ключевой особенностью присоединения к атому углерода C1 является то, что переходное состояние к присоединению лежит на 6 кДж/моль ниже энергии разделяющихся реагентов. Следовательно, барьер присоединения

существует, но его энергия ниже, чем у разделенных реагентов, и поэтому он называется скрытым барьером [46]. В то время как [i3] и [i4] могут подвергаться мономолекулярному распаду с потерей атомарного водорода до 2-((E)-бут-1-ен-3-инил)[4]гелицена (p3) и 2-(бут-3-ен-1-инил)[4]хелицен (p4), соответственно, резонансно стабилизированный дублет-радикальный промежуточный продукт [i3] является основным в образовании [5]гелицена (p2) и бензо[а]тетрафена (p1). Доступ к бензо[а]тетрафену (p1) можно получить с помощью последовательности реакций [i3] → [i5] → [i6] → [i7] → p1 + H, тогда как [5]гелицен (p2) можно получить с помощью [i3] → [i8] → [i9]/[i10] → [i11] → p2 + H, включающая сдвиги атомов водорода и замыкание шестичленного цикла, оканчивающееся потерями атомов водорода из метиленовых (CH₂) фрагментов в [i7] и [i11] через плотные переходные состояния, расположенные на 19 и 20 кДж/моль выше энергии разделяющихся продуктов в суммарных экзотергических реакциях. Наличие погруженного барьера имеет решающее значение, поскольку низкие температуры эффективно блокируют реакции, протекающие через переходные состояния, расположенные выше энергии разделяемых реагентов, такие как изомеризация [i2] в [i4], тем самым ингибируя образование 2-(бут-3-эн-1-инил)[4]хелицен (p4). Интересно отметить, что в случае хирального [4]гелиценильного реагента его реакция с винилацетиленом должна образовывать рацемическую смесь [5]гелицена. Память о конкретной хиральности реагента теряется в интермедиате [i8], который демонстрирует плоскую геометрию четырех ароматических колец из-за отсутствия атома Н в наиболее скученном положении на одном из концевых колец. [i8] все еще является хиральным из-за присутствия боковой цепи CH₂CH₂ССН, но он может легко превращаться в другой энантиомер за счет легкого вращения вокруг одинарной связи С-СН₂ вне кольца. Следовательно, предполагается, что два разных энантиомера [i11] образуются почти в равных количествах, и эти энантиомеры после потери атома водорода должны давать рацемическую смесь продукта [5]-гелицена (p2). Альтернативно, особая хиральность реагента сохраняется на протяжении всего пути реакции по направлению к p1; здесь хиральность бензо[а]тетрафена будет совпадать с хиральностью [4]гелиценильного реагента.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Наши расчеты предоставили убедительные доказательства универсального, безбарьерного процесса роста молекулярной массы до гелиценов путем аннелиции колец в холодных молекулярных облаках (10 К) в

результате бимолекулярных реакций гелиценильных радикалов с винилацетиленом в газовой фазе. Синтез гелиценов в газовой фазе может иметь большое значение для происхождения хиральной асимметрии жизни и современных биорелевантных молекул, таких как правосторонние сахара и левосторонние аминокислоты. Хотя описанный здесь газофазный процесс образует рацемат [5]-гелиценов, в глубоком космосе ультрафиолетовое излучение с круговой поляризацией может фотолизировать энантиомеры с разной эффективностью; этот процесс может привести к преобладанию одного энантиомера (энантиомерный избыток), которое может распространяться путем дальнейшего роста.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. R.I. Kaiser, L. Zhao, W. Lu, M. Ahmed, M.M. Evseev, V.N. Azyazov, A.M. Mebel, R.K. Mohamed, F.R. Fischer, X. Li, Gas-phase synthesis of racemic helicenes and their potential role in the enantiomeric enrichment of sugars and amino acids in meteorites. // *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2022, v. 24, p. 25077- 25087.
2. L.A. Curtiss, K. Raghavachari, P.C. Redfern, V. Rassolov, J.A. Pople, Gaussian-3 (G3) theory for molecules containing first and second-row atoms. // *J. Chem. Phys.*, 1998, v. 109, p. 7764-7776.
3. A.G. Baboul, L.A. Curtiss, P.C. Redfern, K. Raghavachari, Gaussian-3 theory using density functional geometries and zero-point energies. // *J. Chem. Phys.*, 1999, v. 110, p. 7650–7657.
4. L.A. Curtiss, K. Raghavachari, P.C. Redfern, A.G. Baboul, J.A. Pople, Gaussian-3 theory using coupled cluster energies. // *Chem. Phys. Lett.*, 1999, v. 314, p. 101–107.
5. M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H.P. Hratchian, A.F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J.L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J.J.A. Montgomery, J.E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J.J. Heyd, E. Brothers, K.N. Kudin, V.N. Staroverov, T. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J.C. Burant, S.S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J.M. Millam, M. Klene, J.E. Knox, J.B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R.E. Stratmann, O. Yazyev, A.J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J.W. Ochterski, R.L. Martin, K. Morokuma, V.G. Zakrzewski, G.A. Voth, P. Salvador, J.J. Dannenberg, S. Dapprich, A.D. Daniels, O. Farkas, J.B. Foresman, J.V. Ortiz, J. Cioslowski, D.J. Fox, *Gaussian 09, Revision A.1*, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
6. H.J. Werner, P.J. Knowles, G. Knizia, F.R. Manby, M. Schütz, P. Celani, W. Györffy, D. Kats, T. Korona, R. Lindh, A. Mitrushenkov, G. Rauhut, K.R. Shamasundar, T.B. Adler, R.D. Amos, S.J. Bennie, A. Bernhardsson, A. Berning, D.L. Cooper, M.J.O. Deegan, A.J. Dobbyn, F. Eckert, E. Goll, C. Hampel, A.

Hesselmann, G. Hetzer, T. Hrenar, G. Jansen, C. Köppl, S.J.R. Lee, Y. Liu, A.W. Lloyd, Q. Ma, R.A. Mata, A.J. May, S.J. McNicholas, W. Meyer, T.F.M. III, M.E. Mura, A. Nicklass, D.P. O'Neill, P. Palmieri, D. Peng, T. Petrenko, K. Pflüger, R. Pitzer, M. Reiher, T. Shiozaki, H. Stoll, A.J. Stone, R. Tarroni, T. Thorsteinsson, M. Wang, M. Welborn, MOLPRO, version 2021.2, A Package of Ab Initio Programs, 2021.

GAS PHASE SYNTHESIS OF [5]-HELICENE

M.M. Evseev¹, O.V. Кузнецов¹, V.N. Azyazov¹

¹*Lebedev Physical Institute, Samara Branch
(Novo-Sadovaya str., 221, Samara, Russia, 443011)
e-mail: mihail.evseev.2011@mail.ru*

During the last decades, helicenes—ortho-fused polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs), in which benzene building blocks are annulated at an angle of 60° to form helically-shaped molecules—have received considerable attention from the organic, and physical chemistry, and material science communities due to their unique features in optics (chiroptical activity, nonlinear optics, and circular polarization) and chiral sensing (chemical sensors) along with exceptional properties in organocatalysis and distinctive molecular structures. Here, we reveal a versatile route to form helicenes via a directed, vinylacetylene mediated gas phase chemistry. In contrast to traditional routes, the innovative gas phase synthesis encompasses low-barrier reactions through targeted, stepwise ring expansion mechanisms involving free radical reaction intermediates. We reveal the hitherto unknown gas phase chemistry synthesizing [5]-helicene along with atomic hydrogen via the bimolecular reaction of the [4]-helicenyl radical with vinylacetylene. The energies and molecular parameters of the local minima and transition states involved in the reaction were computed at the G3(MP2,CC)//B3LYP/6-311G(d,p) level of theory with a chemical accuracy of 3–6 kJ mol⁻¹ for the relative energies and 0.01–0.02 Å for bond lengths as well as 1–2° for bond angles. The facile route to synthesize [5]-helicene through the reaction of the [4]-helicenyl radical with vinylacetylene represents a versatile pathway that could in principle be extended to higher helicenes.

Keywords: quantum chemistry, helicenes.

ОСТРАЯ ФОКУСИРОВКА СВЕТА С КРУГОВОЙ ПОЛЯРИЗАЦИЕЙ ЛИНЗАМИ С РАЗНОЙ ЧИСЛОВОЙ АПЕРТУРОЙ

В.Д. Зайцев^{1,2}

¹ИСОИ РАН – филиал ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
(443001, г. Самара, ул. Молодогвардейская 151)

²Самарский национальный исследовательский университет,
(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)
e-mail: zaicev-vlad@yandex.ru

В данной работе с помощью формул Ричардса-Вольфа исследована фокусировка света с круговой поляризацией плоскими дифракционными линзами. Было показано, что при увеличении числовой апертуры линзы размер фокусного пятна сначала уменьшается, а потом начинает расти. При дальнейшем увеличении числовой апертуры линзы, рост продольной составляющей приводит к увеличению размера фокусного пятна.

Ключевые слова: острая фокусировка, формулы Ричардса-Вольфа, круговая поляризация.

1. ВВЕДЕНИЕ

Острая фокусировка привлекает внимание исследователей благодаря различным эффектам, которые не проявляются (или же проявляются слабо) при фокусировке света линзами с малыми числовыми апертурами. Например, в фокусе можно наблюдать сложные картины поперечных потоков энергии [1–4], конверсию поляризации [5–7], а при рассмотрении интенсивности в фокусе можно наблюдать фокусные пятна различной формы [8–10], в частности пятна с плоской вершиной (англ. flat-top focus) [11–13]. В таких фокусных пятнах форма пятна приближается к супер-гауссову распределению. Пучки с плоской вершиной необходимы в литографии [14,15] или оптической передаче данных через атмосферу [16].

В данной работе с помощью уравнений Ричардса-Вольфа рассмотрена фокусировка света с круговой поляризацией плоскими дифракционными линзами.

2. ФОКУСИРОВКА СВЕТА ПЛОСКОЙ ДИФРАКЦИОННОЙ ЛИНЗОЙ

2.1. Теория

Поле вблизи острого фокуса может быть описано с помощью интеграла Ричардса-Вольфа [5]:

$$\mathbf{U}(\rho, \psi, z) = -\frac{if}{\lambda} \int_0^{\theta_0} \int_0^{2\pi} B(\theta, \varphi) T(\theta) \mathbf{P}(\theta, \varphi) \times \exp\{ik[\rho \sin \theta \cos(\varphi - \psi) + z \cos \theta]\} \sin \theta d\theta d\varphi, \quad (1)$$

где $\mathbf{U}(\rho, \psi, z)$ — напряжённость электрического или магнитного поля, $B(\theta, \varphi)$ — амплитуда электрического или магнитного поля в выходном зрачке широкоапертурной оптической системы (θ — полярный угол, φ — азимутальный), $T(\theta)$ — функция аподизации линзы, f — фокусное расстояние, $k = 2\pi/\lambda$ — волновое число, λ — длина волны (в моделировании считалась равной 633 нм), θ_0 — максимальный полярный угол, определяемый числовой апертурой линзы ($\text{NA} = \sin \theta_0$), $\mathbf{P}(\theta, \varphi)$ — вектор поляризации, для напряжённости электрического и магнитного полей имеющий вид:

$$\mathbf{P}(\theta, \varphi) = \begin{bmatrix} 1 + \cos^2 \varphi (\cos \theta - 1) \\ \sin \varphi \cos \varphi (\cos \theta - 1) \\ -\sin \theta \cos \varphi \end{bmatrix} a(\theta, \varphi) + \begin{bmatrix} \sin \varphi \cos \varphi (\cos \theta - 1) \\ 1 + \sin^2 \varphi (\cos \theta - 1) \\ -\sin \theta \sin \varphi \end{bmatrix} b(\theta, \varphi), \quad (2)$$

где $a(\theta, \varphi)$ и $b(\theta, \varphi)$ — функции, описывающие состояние поляризации x - и y -компонент напряжённостей фокусируемого пучка.

Так как интенсивность и осевой поток энергии для света с левой и правой круговой поляризацией одинаковы, то будем рассматривать только одну правую поляризацию, вектор Джонса для которой имеет вид:

$$\mathbf{E}_R = \begin{pmatrix} a(\theta, \varphi) \\ b(\theta, \varphi) \end{pmatrix} = \frac{A(\theta)}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где $A(\theta)$ - начальная амплитуда поля, зависящая только от полярного угла.

2.2. Результаты численного моделирования

С помощью формулы (1) промоделируем фокусировку света с круговой поляризацией (3) плоской дифракционной линзой, функция аподизации которой имеет вид $T(\theta) = \cos^{-3/2}\theta$. Будем считать, что фокусируется плоская волна $A(\theta) = 1$, с длиной волны $\lambda = 532$ нм. Ранее исследователями острой фокусировки отмечалось, что именно с помощью плоских дифракционных

линз удастся получить фокусное пятно с меньшими размерами фокуса, чем при фокусировке апланатическим объективом [17].

На рис. 1 показано изменение диаметра фокусного пятна по полуспаду интенсивности (FWHM) при увеличении числовой апертуры линзы.

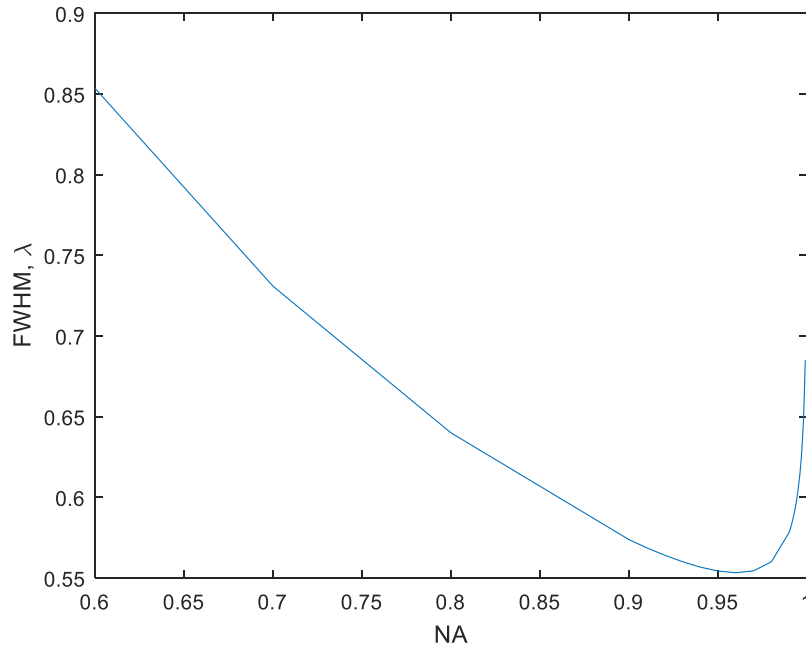


Рис. 1. Зависимость диаметра фокусного пятна по полуспаду интенсивности от числовой апертуры линзы при фокусировке плоской волны с круговой поляризацией

Из рис. 1 видно, что при увеличении числовой апертуры линзы размер фокусного пятна сначала уменьшается, а потом начинает расти. При $NA = 0,96$ наблюдается минимальное фокусное пятно, диаметр пятна по полуспаду интенсивности составил $FWHM = 0,55\lambda$.

Рост размера фокусного пятна объясняется перераспределением энергии между поперечной и продольной составляющими интенсивности таким образом, что продольная составляющая, имеющая вид кольца, увеличивается, уширяя пятно. На рисунках 2 и 3 для наглядности показано распределение интенсивности и отдельных ее составляющих для числовых апертур равных 0,8 (рисунок 2) и 0,999 (рисунок 3).

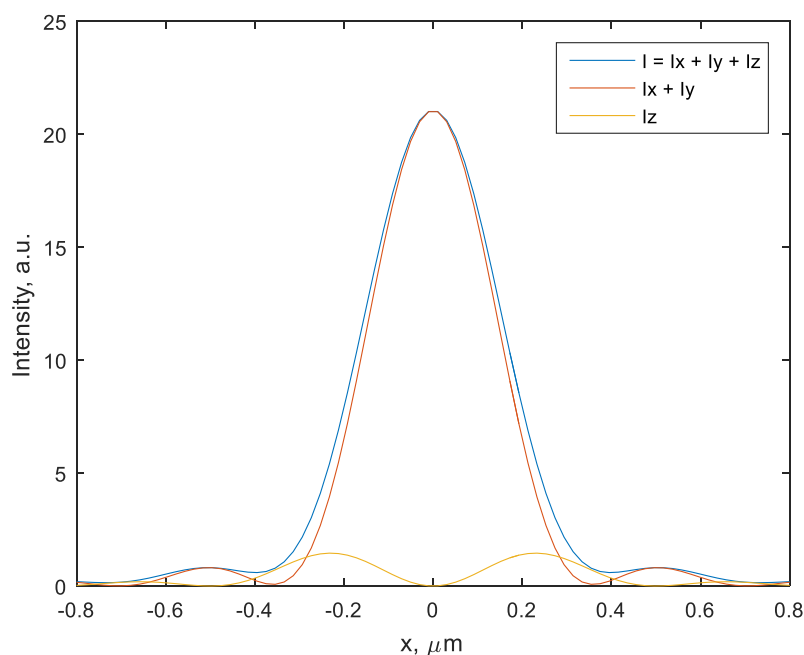


Рис. 2. Распределение в фокусе интенсивности и отдельных составляющих интенсивности при фокусировке плоской дифракционной линзой с $NA=0,8$

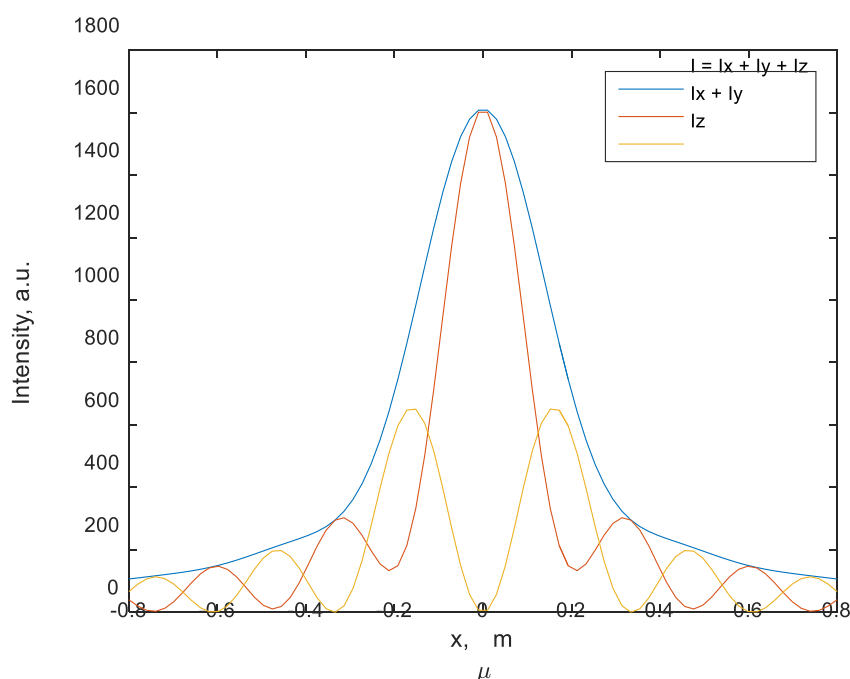


Рис. 3. Распределение в фокусе интенсивности и отдельных составляющих интенсивности при фокусировке плоской дифракционной линзой с $NA=0,999$

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе, используя формулы Ричардса-Вольфа, исследована фокусировка света с круговой поляризацией плоскими дифракционными линзами. Было показано, что размер фокусного пятна при увеличении

числовой апертуры линзы, сначала уменьшается, а потом начинает расти. Минимальное фокусное пятно наблюдается при $NA = 0,96$ ($FWHM = 0,55\lambda$). При дальнейшем увеличении числовой апертуры линзы рост продольной составляющей приводит к увеличению размера фокусного пятна.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 18-19-00595).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Z. Man, X. Dou, H.P. Urbach, The evolutions of spin density and energy flux of strongly focused standard full Poincaré beams. // *Opt. Commun.*, 2020, v. 458, p. 124790.
2. Z. Man, Z. Bai, S. Zhang, X. Li, J. Li, X. Ge, Y. Zhang, S. Fu, Redistributing the energy flow of a tightly focused radially polarized optical field by designing phase masks. // *Opt. Express*, 2018, v. 26, p. 23935.
3. X.-Z. Gao, Y. Pan, G.-L. Zhang, M.-D. Zhao, Z.-C. Ren, C.-G. Tu, Y.-N. Li, H.-T. Wang, Redistributing the energy flow of tightly focused ellipticity-variant vector optical fields. // *Photonics Res.*, 2017, v. 5, p. 640.
4. X. Jiao, S. Liu, Q. Wang, X. Gan, P. Li, J. Zhao, Redistributing energy flow and polarization of a focused azimuthally polarized beam with rotationally symmetric sector-shaped obstacles. // *Opt. Lett.*, 2012, v. 37, p. 1041.
5. B. Richards, E. Wolf, Electromagnetic Diffraction in Optical Systems. II. Structure of the Image Field in an Aplanatic System. // *Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.*, 1959, v. 253, p. 358–379.
6. S.S. Stafeev, A.G. Nalimov, A.A. Kovalev, V.D. Zaitsev, V. V. Kotlyar, Circular Polarization near the Tight Focus of Linearly Polarized Light. // *Photonics*, 2022, v. 9, p. 196.
7. T. Bauer, P. Banzer, E. Karimi, S. Orlov, A. Rubano, L. Marrucci, E. Santamato, R.W. Boyd, G. Leuchs, Observation of optical polarization Möbius strips. // *Science*, 2015, v. 347, p. 964–966.
8. H. Wang, L Shi., B. Lukyanchuk, C. Sheppard, C.T. Chong, Creation of a needle of longitudinally polarized light in vacuum using binary optics. // *Nat. Photonics*, 2008, v. 2, p. 501–505.
9. R. Dorn, S. Quabis, G. Leuchs, Sharper Focus for a Radially Polarized Light Beam. // *Phys. Rev. Lett.*, 2003, v. 91, p. 233901.
10. T. Grosjean, I. Gauthier, Longitudinally polarized electric and magnetic optical nano-needles of ultra high lengths. // *Opt. Commun.*, 2013, v. 294, p. 333–337.

11. X. Wang, B. Zhu, Y. Dong, S. Wang, Z. Zhu, F. Bo, X. Li, Generation of equilateral-polygon-like flat-top focus by tightly focusing radially polarized beams superposed with off-axis vortex arrays. // *Opt. Express*, 2017, v. 25, p. 26844–26852.
12. C. Ping, Ch. Liang, F. Wang, Y. Cai, Radially polarized multi-Gaussian Schell-model beam and its tight focusing properties. // *Opt. Express*, 2017, v. 25, p. 32475–32490.
13. H. Chen, S. Tripathi, K.C. Toussaint, Demonstration of flat-top focusing under radial polarization illumination. // *Opt. Lett.*, 2014, v. 39, p. 834–837.
14. J.J. Kasinski, R.L. Burnham, Near-diffraction-limited laser beam shaping with diamond-turned aspheric optics. // *Opt. Lett.*, 1997, v. 22, p. 1062.
15. Y. Li, Light beams with flat-topped profiles. // *Opt. Lett.*, 2002, v. 27, p. 1007.
16. H.T. Eyyuboglu, Ç. Arpali, Y.K. Baykal, Flat topped beams and their characteristics in turbulent media. // *Opt. Express*, 2006, v. 14, p. 4196.
17. V.V. Kotlyar,; A.G. Nalimov,; S.S. Stafeev, Exploiting the circular polarization of light to obtain a spiral energy flow at the subwavelength focus. // *J. Opt. Soc. Am. B*, 2019, v. 36, p. 2850–2855.

SHARP FOCUSING OF LIGHT WITH CIRCULAR POLARIZATION BY LENSES WITH DIFFERENT NUMERICAL APERTURES

V.D. Zaitsev^{1,2}

¹*IPSI RAS – Branch of the FSRC “Crystallography and Photonics” RAS,
(Molodogvardeyskaya str., 151, Samara, Russia, 443001)*

²*Samara National Research University,
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)*

e-mail: zaicev-vlad@yandex.ru

In this paper, using the Richards-Wolf formulas, the focusing of circularly polarized light by flat diffractive lenses is considered. It was shown that as the numerical aperture of the lens increases, the size of the focal spot first decreases and then begins to grow. With a further increase in the numerical aperture of the lens, the growth of the longitudinal component leads to an increase in the size of the focal spot.

Keywords: sharp focusing, Richards-Wolf formulas, circular polarization

ПЕРЕПУТЫВАНИЕ МЕЖДУ ИЗОЛИРОВАННЫМ КУБИТОМ И КУБИТОМ В РЕЗОНАТОРЕ С КЕРРОВСКОЙ СРЕДОЙ В МОДЕЛИ ДЖЕЙНСА-КАММИНГСА.

Р.К. Захаров¹, Е.К. Башкиров¹

¹*Самарский национальный исследовательский университет,
(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)
e-mail: rk.zakharov@yandex.ru*

В данной работе мы рассматриваем динамику двух дипольно-связанных двухуровневых атомов (кубитов). Первый из них заключен в резонатор без потерь с керровской средой и нерезонансно взаимодействует с тепловым полем резонатора. Второй кубит находится вне резонатора. Получено точное решение рассматриваемой модели. На его основе мы вычисляем отрицательность как меру перепутывания. Показано, что при определенных условиях керровская нелинейность может усиливать максимальную степень кубит-кубитного перепутывания, индуцированного тепловым полем и устранять мгновенную смерть перепутывания.

Ключевые слова: кубиты, перепутывание, керровская нелинейность, отрицательность, тепловое поле, квантовая информатика.

1. ВВЕДЕНИЕ

Перепутывание играет центральную роль в квантовой информатике, квантовых вычислениях и коммуникациях, а также в квантовой криптографии [1]. Теоретические исследования систем основаны на модели Джейнса-Каммингса или многоатомной модели Тависа-Каммингса (ТСМ) и ее обобщениях [2] Квантовые устройства требуют максимально перепутанных состояний. Однако взаимодействие с окружающей средой происходит всегда, и они ухудшают качество перепутывания. Хотя взаимодействие между окружающей средой и квантовыми системами может привести к декогеренции, оно также может вызвать запутанность. Ким и др. исследовали атом-атомное перепутывание в системе двух идентичных двухуровневых атомов с однофотонным переходом, индуцируемым одномодовым тепловым полем [3]. Они показали, что хаотическое поле с минимальной информацией может запутывать атомы, подготовленные изначально в сепарабельном состоянии. Позже многие авторы исследовали роль расстройки, диполь-дипольного взаимодействия, штарковского сдвига и т.д. в тепловом

перепутывании между кубитами в рамках различных обобщений двухатомной модели Джейнса-Каммингса (см. Ссылки в [4]). В работах [5,6] проведено исследование теплового перепутывания в двухатомной модели Тависа-Каммингса с керровской нелинейностью. Также двухатомная ТКМ с вырожденными и невырожденными переходами исследовалась в [7,8]. Ху и соавторы рассмотрели свойства перепутывания в системе двух двухуровневых атомов, резонансно взаимодействующих с одномодовым тепловым полем, для сепарабельных когерентных начальных состояний атома [9]. Результаты показывают, что начальная атомная когерентность может увеличить степень запутанности.

В [10] мы рассмотрели динамику перепутывания между двумя кубитами, один из которых захвачен в резонаторе без тепловых потерь, а другой находится вне резонатора, с учетом прямого диполь-дипольного взаимодействия между кубитами. В данной работе мы продолжаем исследование динамики рассматриваемой модели с учетом среды Керра в резонаторе. На практике нелинейности Керра в атомных системах малы по сравнению со скоростью потери фотонов из резонатора, поэтому в таких условиях трудно наблюдать влияние нелинейности Керра на динамику атомов в резонаторе. В то же время, как было показано экспериментально, для сверхпроводящих кубитов в копланарных резонаторах с керровскими средами было возможно находиться в пределах однофотонного режима Керра [11]. Представляет интерес изучить влияние среды Керра на взаимодействие кубитов, один из которых захвачен в резонаторе, а другой находится вне резонатора.

2. МОДЕЛЬ И ЕЕ ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ

Мы рассматриваем два идентичных искусственных атома или кубита (сверхпроводящие джозефсоновские схемы, спины или квантовые точки) с энергетическим зазором $\hbar\omega_0$ и одномодовым квантовым электромагнитным тепловым полем. Первый атом захвачен в идеальном резонаторе со средой Керра и резонансно взаимодействует с полем резонатора с частотой ω . Вторым атомом находится вне резонатора. В системе отсчета, вращающейся с частотой поля, гамильтониан для системы в приближении вращающейся волны может быть записан как $H = \hbar g(\sigma_1^+ a + a^+ \sigma_1^-) + X a^{+2} a^2$,

где $\sigma_i^+ = |+\rangle_i \langle -|$ и $\sigma_i^- = |-\rangle_i \langle +|$ - операторы перехода между возбужденным $|+\rangle_i$ и основным $|-\rangle_i$ состояниями для i -го кубита ($i=1,2$), a^+ и a^- - операторы

рождения и уничтожения фотонов резонаторной моды, g - константа связи между кубитами и модой резонатора, X - дисперсионная часть нелинейности третьего порядка керровской среды в резонаторе.

В качестве начального состояния кубитов мы рассматриваем белловские перепутанные состояния $|\psi(0)\rangle_A = \cos\theta|+, -\rangle + \sin\theta|-, +\rangle$.

Также мы будем полагать, что резонаторное поле в начальный момент времени находится в одномодовом тепловом состоянии и описывается матрицей плотности вида $\rho_F(0) = \sum_n p_n |n\rangle\langle n|$, где $p_n = \frac{\bar{n}^n}{(1+\bar{n})^{n+1}}$ - коэффициенты теплового распределения Бозе-Эйнштейна, \bar{n} - среднее число фотонов в моде резонатора.

Следовательно, начальная матрица плотности всей системы, состоящей из двух кубитов и моды теплового поля, примет следующий вид:

$$\rho(0) = \rho_A(0)\rho_F(0) = \sum_n p_n |\psi(0)\rangle\langle\psi(0)| |n\rangle\langle n|$$

Для того, чтобы найти точные решения для теплового начального состояния поля, мы будем базироваться на решении динамической задачи в случае фоковского представления. В этом случае в качестве базиса для записи временной волновой функции можно выбрать полный набор атом-полевых функций вида $|-, -, n+2\rangle$, $|+, -, n+1\rangle$, $|-, +, n+1\rangle$, $|+, +, n\rangle$. В указанном базисе собственные функции (так называемые «одетые состояния») гамильтониана системы есть

$$|\psi_{in}(t)\rangle = C_{in} (x_{i1n} |-, -, n+2\rangle + x_{i2n} |+, -, n+1\rangle + x_{i3n} |-, +, n+1\rangle + x_{i4n} |+, +, n\rangle)$$

Здесь $C_{in} = 1/\sqrt{|x_{i1n}|^2 + |x_{i2n}|^2 + |x_{i3n}|^2 + |x_{i4n}|^2}$ - нормировочные константы,

$$x_{11n} = -\frac{n\chi + \sqrt{1+n+n^2\chi^2}}{\sqrt{1+n}}, \quad x_{12n} = 0, \quad x_{13n} = 1, \quad x_{14n} = 0, \quad x_{21n} = -\frac{n\chi - \sqrt{1+n+n^2\chi^2}}{\sqrt{1+n}},$$

$$x_{22n} = 0, \quad x_{23n} = 1, \quad x_{24n} = 0, \quad x_{31n} = 0,$$

$$x_{32n} = -\frac{1}{\sqrt{2+n}} \left((1+n)(2+n)\chi + \frac{1}{2}(-2\chi - 4n\chi - 2n^2\chi + 2\sqrt{(\sqrt{1+n}\sqrt{2+n} + \chi^2 + 2n\chi^2 + n^2\chi^2)}) \right),$$

$$x_{33n} = 0, \quad x_{34n} = 1, \quad x_{41n} = 0,$$

$$x_{42n} = \frac{1}{\sqrt{2+n}} ((1+n)(2+n)\chi + \frac{1}{2}(-2\chi - 4n\chi - 2n^2\chi - 2\sqrt{(\sqrt{1+n}\sqrt{2+n} + \chi^2 + 2n\chi^2 + n^2\chi^2)})),$$

$$x_{43n} = 0, x_{44n} = 1$$

Соответствующие собственные значения гамильтониана есть

$$E_{1n} = n^2\chi - \sqrt{1+n+n^2\chi^2}, E_{2n} = n^2\chi + \sqrt{1+n+n^2\chi^2},$$

$$E_{3n} = \frac{1}{2}(2\chi + 4n\chi + 2n^2\chi - 2\sqrt{(\sqrt{1+n}\sqrt{2+n} + \chi^2 + 2n\chi^2 + n^2\chi^2)}),$$

$$E_{4n} = \frac{1}{2}(2\chi + 4n\chi + 2n^2\chi + 2\sqrt{(\sqrt{1+n}\sqrt{2+n} + \chi^2 + 2n\chi^2 + n^2\chi^2)}),$$

Для описания динамики системы, нами были найдены собственные значения и собственные вектора гамильтониана системы кубиты + поле в базисе $|+, -, 0\rangle, |-, +, 0\rangle$, Зависящая от времени волновая функция принимает соответственно примет вид

$$|\Psi(t)\rangle = C_{12} |-, -, 1\rangle + C_{22} |+, -, 0\rangle + C_{32} |-, +, 0\rangle,$$

$$|\Psi(t)\rangle = C_{13} |-, -, 1\rangle + C_{23} |+, -, 0\rangle + C_{33} |-, +, 0\rangle.$$

Значения коэффициентов не приводим ввиду их громоздкости.

Используя волновую функцию, мы можем получить зависящую от времени матрицу плотности для всей системы $\rho(t) = \sum_{n=0}^{\infty} p_n |\psi_n(t)\rangle\langle\psi_n(t)|$. Взяв след по полевым переменными, мы можем получить редуцированную атомную матрицу плотности $\rho_A(t) = Tr_F \rho(t)$.

3. ВЫЧИСЛЕНИЕ ПАРАМЕТРА ПЕРЕПУТЫВАНИЯ

Для двухкубитных систем, описываемых редуцированной матрицей плотности $\rho_A(t)$, в качестве меры перепутывания может быть использована отрицательность.

$$\varepsilon = -2 \sum \mu_i^-,$$

где μ_i^- – отрицательные собственные значения частично транспонированной атомной матрицы плотности ($\rho_A^{T_1}$).

Частично транспонированная по переменным одного кубита матрица имеет вид

$$\rho_A^T(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(t) & 0 & 0 & \rho_{23}(t)^* \\ 0 & \rho_{22}(t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33}(t) & 0 \\ \rho_{23}(t) & 0 & 0 & \rho_{44}(t) \end{pmatrix}.$$

Матрица имеет всего одно собственное значение, которое может быть отрицательным. Соответственно отрицательность для рассматриваемых начальных атомных состояний может быть представлена в виде

$$\varepsilon(t) = \sqrt{(\rho_{11}(t) - \rho_{44}(t))^2 + 4|\rho_{23}(t)|^2} - \rho_{11}(t) - \rho_{44}(t).$$

Результаты численных расчетов отрицательности для различных параметров модели с гамильтонианом представлены на рисунках 1,2.

4. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

На рисунках 1, 2 представлены временные зависимости отрицательности для различных значений параметра керровской нелинейности и среднего числа тепловых фотонов.

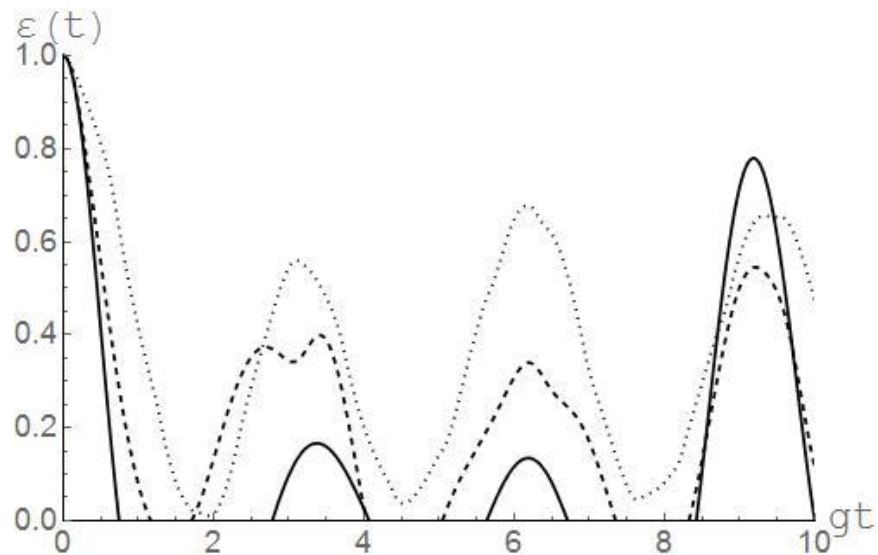


Рис. 1. Временные зависимости отрицательностей ε от приведенного времени gt для начального состояния кубитов $1/\sqrt{2}(|+, -\rangle + |-, +\rangle)$. Параметр керровской нелинейности $\chi=0$ (сплошная линия), 1 (штриховая линия) и 5 (точечная линия). Среднее число тепловых фотонов $\bar{n} = 1$.

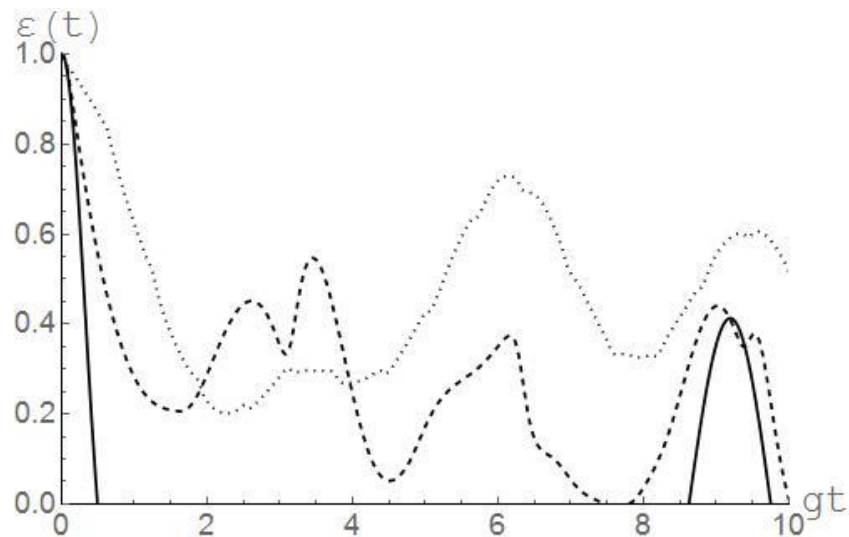


Рис. 2. Временные зависимости отрицательностей ε от приведенного времени gt для начального состояния кубитов $1/\sqrt{2}(|+, -\rangle + |-, +\rangle)$. Параметр керровской нелинейности $\chi=0$ (сплошная линия), 1 (штриховая линия) и 5 (точечная линия). Среднее число тепловых фотонов $\bar{n}=3$.

Из графиков видно, что для перепутанного начального состояния кубитов включение нелинейности Керра приводит к стабилизации колебаний и к исчезновению эффекта мгновенной смерти перепутывания.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе мы исследовали динамику перепутывания двух идентичных двухуровневых атома, один из которых нерезонансно взаимодействует с модой теплового поля идеального одномодового резонатора, а другой находится вне резонатора. Нами найдено точное решение данной модели и рассчитана временная зависимость отрицательности для белловских перепутанных начальных состояний кубитов и различных параметров данной модели.

Мы показали, что для сильных тепловых полей включение керровской среды приводит к разрушению периодичности квантовых корреляций, к стабилизации степени атом-атомного перепутывания и к исчезновению эффекта мгновенной смерти перепутывания.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. I. M. Georgescu, S. Ashhab, F. Nori, Quantum simulation. // Rev. Mod. Phys., 2014, v. 88, p. 153-185.
2. B. W. Shore, P. L. Knight, The Jaynes-Cummings Model. // J. Mod. Opt., 1992, v. 40, №7, p. 1195-1238.

3. M. S. Kim, J. Lee, D. Ahn, P. L. Knight, Entanglement induced by a single-mode heat environment. // *Phys. Rev.*, 2002, v. A65, № 040101(R), p. 1-4.
4. L. S. Aguiar, P. P. Munhoz, A. Vidiella-Barranco, J. A. Roversi, The entanglement of two dipole–dipole coupled atoms in a cavity interacting with a thermal field. // *J. Opt.*, 2005, v. B7, p. S769-S771.
5. M. M. Evseev, E. K. Bashkirov, Thermal entanglement in Tavis-Cummings model with Kerr nonlinearity // *Proceedings of ITNT 2020 – 6th IEEE International Conference on Information Technology and Nanotechnology*, 2020, № 9253347, p. 1-5.
6. E. K. Bashkirov, Entanglement in Tavis-Cummings model with Kerr nonlinearity induced by a thermal noise // *Proc. SPIE.*, 2021, № 11846 (11846W).
7. L. Zhou, H. S. Song, Entanglement induced by a single-mode thermal field and criteria for entanglement. // *J. Opt.*, 2002, v. B4, p. 425-429.
8. E. K. Bashkirov, Entanglement induced by the two-mode thermal noise. // *Laser Phys. Lett.*, 2006, v. 3, p. 145-150.
9. Y. H. Hu, C. L. Jiang, K. Zeng, Coherence-enhanced entanglement between two atoms at high temperature // *Chin. Phys.*, 2008, v. 17, p. 1784-1790.
10. E. K. Bashkirov, Entanglement between two dipole-coupled qubits interacting with two independent slightly detuned cavity modes. // *J. Theor. Phys.*, 2019, v. 58, p. 2346-2356.
11. G. Kichmair et al., Observation of quantum state collapse and revival due to the single-photon kerr effect. // *Nature*, 2013, v. 495, p. 205-209.

ENTANGLEMENT BETWEEN AN ISOLATED QUBIT AND AUBIT IN A CAVITY WITH A KERR-MEDIUM IN THE JANES-CUMMINGS MODEL.

R.K. Zakharov¹, E.K. Bashkirov¹

¹*Samara National Research University,
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)
e-mail: rk.zakharov@yandex.ru*

In this paper, we consider the dynamics of two dipole-coupled two-level atoms (qubits). The first of them is trapped in a lossless cavity with Kerr media and resonantly interacts with the thermal cavity field. The second qubit is outside the cavity. We obtain the exact solution of the model under consideration. On its basis we calculate the negativity as a measure of qubit-qubit entanglement. It is shown that, under certain conditions, the Kerr nonlinearity and direct dipole dipole interaction of qubits can enhance the maximum degree of qubit-qubit entanglement induced by the thermal field and can eliminate the sudden death of entanglement.

Keywords: qubits, entanglement, Kerr nonlinearity, negativity, thermal field, quantum informatics.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТОВ ВТОРОГО ПОРЯДКА МЕТОДОМ ГОЛОГРАФИЧЕСКОЙ ИНТЕРФЕРОМЕТРИИ

А.С. Абдулина, А.А. Шмидт, А.О. Злобин, Н.И. Буримов, С.М. Шандаров

*Томский государственный университет систем управления и
радиоэлектроники*

(634050, г. Томск, пр. Ленина, 40)

andrei.o.zlobin@tusur.ru

Метод адаптивной голографической интерферометрии, основанный на попутном взаимодействии сильного стационарного опорного пучка со слабым фазово-модулированным сигнальным пучком на индуцируемых ими динамических голограммах в образце силиката висмута среза (110), использован для оценки его материальных параметров, определяющих вклад обратного флексоэлектрического и флексогирационного эффектов в выходной сигнал фазовой демодуляции. Теоретический анализ и экспериментальные измерения проведены для ориентации вектора фоторефрактивной решетки вдоль кристаллографического направления $[\bar{1}11]$

Ключевые слова: силлениты, фоторефрактивный эффект, попутное взаимодействие, флексоэлектрический эффект, флексогирация

1. ВВЕДЕНИЕ

Перспективность использования методов голографической интерферометрии для определения вклада слабых вторичных эффектов в выходной сигнал фазовой демодуляции продемонстрирована в [1]. В настоящем сообщении представлены результаты теоретического анализа и экспериментального исследования фазовой демодуляции при попутном взаимодействии волн с одинаковой циркулярной поляризацией в кристалле силиката висмута среза (110). Для ориентации вектора фоторефрактивной решетки $\vec{K}||[\bar{1}11]$ проведена оценка эффективного флексогирационного параметра кристалла $\beta^{eff} = \beta_{1111} + \beta_{1122} + \beta_{2211} - \beta_{2323} - \beta_{2332}$, определяемого приведенной комбинацией компонент тензора флексогирации β_{klmn} .

2. ЭФФЕКТ ФАЗОВОЙ ДЕМОДУЛЯЦИИ

Взаимодействие на фоторефрактивной голограмме сильной стационарной опорной волны со слабой фазово-модулированной сигнальной

волной приводит к эффекту фазовой демодуляции. При гармоническом модулирующем сигнале с частотой Ω интенсивность сигнальной волны на выходной грани кристалла может быть представлена в виде ряда [1]

$$I_S(\varphi_m, t) = I_{S0} [M^{(0)}(\varphi_m) + M^{(1)}(\varphi_m) \sin \Omega t + M^{(2)}(\varphi_m) \cos 2\Omega t + \dots]. \quad (1)$$

Значения относительных амплитуд $M^{(n)}$ зависят как от материальных параметров кристалла и векторных характеристик поляризации взаимодействующих волн, так и от типа фоторефрактивного отклика, ориентации и толщины образца и глубины фазовой модуляции φ_m . Применение подхода, описанного в [2-4], позволяет получить в случае среза (110) кристалла симметрии 23 и чисто циркулярной поляризации взаимодействующих волн следующие выражения для относительных амплитуд первой и второй гармоник в выходном сигнале фазовой демодуляции:

$$M^{(1)}(\varphi_m) = 4J_0(\varphi_m)J_1(\varphi_m) \exp\left(-\frac{\Gamma_E}{2}d\right) \sin\left(\frac{\Gamma_f}{2}d\right) \quad (2)$$

$$= 4J_0(\varphi_m)J_1(\varphi_m)M_{1m},$$

$$M^{(2)}(\varphi_m) = -4J_0(\varphi_m)J_2(\varphi_m) \left(1 - \exp\left(-\frac{\Gamma_E}{2}d\right) \cos\left(\frac{\Gamma_f}{2}d\right)\right) \quad (3)$$

$$= 4J_0(\varphi_m)J_2(\varphi_m)M_{2m},$$

где J_0, J_1 и J_2 — функции Бесселя соответствующих порядков и d — длина взаимодействия световых пучков в кристалле, M_{1m}, M_{2m} — эффективные параметры демодуляции на частоте первой и второй гармоники. Как отмечалось в [1], коэффициент связи Γ_E характеризует вклад в попутное взаимодействие волн с одинаковой циркулярной поляризацией, связанный с эффектами первого порядка: линейным электрооптическим эффектом Поккельса и электрогирацией. Эффекты второго порядка описываются коэффициентом связи Γ_f , отличным от нуля благодаря обратному флексоэлектрическому эффекту и флексогирации.

Для исследуемой геометрии взаимодействия коэффициенты связи были получены в следующем виде:

$$\Gamma_E^{l,r} = \frac{2\pi}{\lambda} n_0^3 \left(\left(\frac{r_{41}^S}{2\sqrt{3}} + \frac{e_{14}}{\sqrt{3}} \cdot \frac{p_{11} + p_{12} + p_{13} + p_{44}^E}{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}^E} \right) \cos \theta \pm \right. \quad (4)$$

$$\left. \pm \frac{\gamma_{41}}{\sqrt{3}} \right) \cos^2 \theta E_{SC},$$

$$\Gamma_f^{l,r} = \frac{2\pi}{\lambda} n_0^3 \left(\sqrt{3} \frac{p_{11} + p_{12} + p_{13} + p_{44}^E}{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}^E} f \cos \theta \mp \frac{1}{\sqrt{3}} (\beta_{1111} + \beta_{1122} + \beta_{2211} - \beta_{2323} - \beta_{2332}) \right) \cos^2 \theta K E_{SC}, \quad (5)$$

где λ — длина волны для взаимодействующих лазерных пучков; n_0 — показатель преломления для невозмущенного кристалла; r_{41}^S — компонента электрооптического тензора механически зажатого кристалла; p_{11} , p_{12} , p_{13} и p_{44}^E — его упругооптические коэффициенты; E_{SC} — эффективное поле пространственного заряда фоторефрактивной голограммы [2]; C_{11} , C_{12} , C_{44}^E — компоненты тензора модулей упругости кристалла в сокращенной форме записи и $\Lambda = 2\pi/|\vec{K}|$ — пространственный период данной голограммы. Угол между волновыми векторами взаимодействующих световых волн в кристалле считается здесь равным 2θ , а его биссектриса — направленной вдоль кристаллографической оси [110].

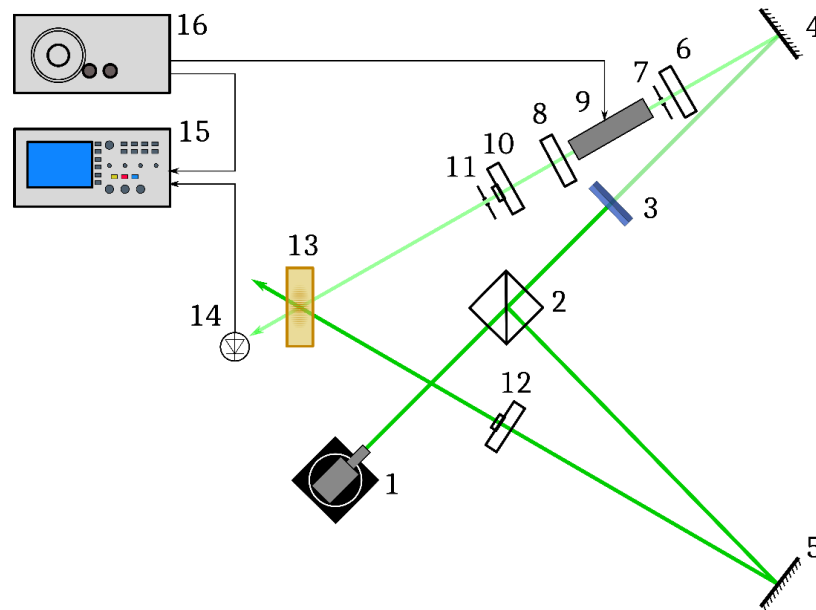


Рис. 1. Схема экспериментальной установки

3. ЭКСПЕРИМЕНТ

В экспериментах использовалась установка со схемой, представленной на рис. 1 и аналогичной описанной в [1]. Запись фоторефрактивных голограмм осуществлялась в образце $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$ (BSO) среза (110) с просветленными гранями, имеющем толщину $d = 2,2$ мм и поперечные размеры 15×15 мм².

В качестве источника излучения 1 использовался лазер LCM-S-111 с длиной волны $\lambda = 532$ нм, мощностью 5 мВт и апертурой пучка 1,1 мм. Делительный куб 2 разделял лазерный пучок с вектором поляризации, ортогональной плоскости рисунка, на опорный (I_p) и сигнальный (I_s) пучки; при этом интенсивность последнего уменьшалась до уровня $I_s \approx I_p/60$ набором светофильтров 3. Стационарные зеркала 4 и 5 и кристалл 13 размещались в углах равностороннего треугольника, чтобы обеспечить симметричную геометрию с углом падения пучков на входную грань $\theta \approx \pm 30^\circ$. Поляризатор 6 корректировал поляризацию света на входе электрооптического модулятора МЛ-102А 9 для обеспечения его работы в режиме чисто фазовой модуляции. Поляризатор 8 в сочетании с четвертьволновой пластиной 10 позволял получить модулированный по фазе на частоте $\Omega/2\pi = 1200$ Гц сигнальный пучок с правой или левой циркулярной поляризацией. Такая же четвертьволновая пластина 12 использовалась для задания стационарному опорному пучку циркулярной поляризации, правой или левой, одинаковой по знаку с поляризацией сигнального пучка. Диафрагмы 7 и 10 подавляли оптические пучки, возникающие из-за переотражений в модуляторе и прочих оптических элементах. Интерферируя между собой, сигнальный и опорный пучки формировали в исследуемом кристалле стационарную фоторефрактивную голограмму, которая и позволяла преобразовать фазовую модуляцию входного сигнального пучка в его модуляцию по интенсивности на выходе образца. После взаимодействия модулированный по интенсивности сигнальный пучок детектируется фотоприемником 14 (фотодиод ВРW-34, сопротивление нагрузки 51 кОм, напряжение смещения 12 В). Электрический сигнал фазовой демодуляции, в соответствии с соотношением (1) представляющий набор временных гармоник, поступал на открытый вход цифрового осциллографа Keysight 15. Гармонический сигнал с генератора 16 подавался на первый канал осциллографа 15 для синхронизации и на модулятор 9, на входе которого был смонтирован RC-фильтр верхних частот с сопротивлением $R = 100$ кОм и ёмкостью $C = 1$ нФ.

Образец BSO помещался в держателе, позволявшем поворачивать его вокруг кристаллографической оси [110], совпадающего с биссектрисой угла между взаимодействующими пучками. Положение кристалл при этом определяется в лабораторной системе координат углом θ_G между вектором фоторефрактивной решетки и осью [001] образца.

Методика эксперимента заключается в следующем. Для нескольких значений напряжения на модуляторе, которое считается линейно связанным с

амплитудой фазовой модуляции сигнальной волны, фиксируется по 60 осциллограмм выходного сигнала интерферометра. Осциллограммы подвергаются разложению в ряд Фурье, и для первой и второй гармоники выполняется расчет средних значений и среднеквадратического отклонения от них. Полученные экспериментальные зависимости относительных амплитуд гармоник от амплитуды фазовой модуляции аппроксимировались расчетными кривыми, определяемыми соотношениями (2) и (3), что позволило определить коэффициенты связи $\Gamma_E^{l,r}$ и $\Gamma_f^{l,r}$.

Результаты измерения эффективных параметров демодуляции для правой (M_{1m}^r, M_{2m}^r) и левой (M_{1m}^l, M_{2m}^l) циркулярной поляризации взаимодействующих пучков для ориентации образца $\vec{K} || [\bar{1}11]$ ($\theta_G = 55^\circ$) представлены в таблице 1.

Таблица 1 Эффективные параметры фазовой демодуляции при ориентации вектора решётки \vec{K} вдоль направления $[\bar{1}11]$ в образце BSO среза (110)

| Параметр | Значение |
|------------|--------------------------------|
| M_{1m}^r | $(1 \pm 0,7) \cdot 10^{-3}$ |
| M_{2m}^r | $(-92 \pm 1,4) \cdot 10^{-3}$ |
| M_{1m}^l | $(-4,8 \pm 1,6) \cdot 10^{-3}$ |
| M_{2m}^l | $(-96 \pm 1) \cdot 10^{-3}$ |

Из данных Таблицы 1 можно сделать заключение, что значения эффективных параметров систематически зависят от знака поляризации, и наблюдаемые различия находятся за пределами погрешности измерений.

Приведённые в таблице экспериментальные данные и выражения (2) и (3) позволили получить следующие значения коэффициентов связи: $\Gamma_E^l = 92 \text{ м}^{-1}$, $\Gamma_E^r = 87,7 \text{ м}^{-1}$, $\Gamma_f^l = -4,8 \text{ м}^{-1}$ и $\Gamma_f^r = 1,03 \text{ м}^{-1}$.

Из них на основании формул (4) и (5) была получена следующая оценка для эффективного флексогирационного параметра кристалла силиката висмута: $\beta_{1111} + \beta_{1122} + \beta_{2211} - \beta_{2323} - \beta_{2332} = 11 \cdot 10^{-20} \text{ м}^2/\text{В}$.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты теоретического анализа и экспериментального исследования дали возможность оценить величину эффективного флексогирационного параметра $\beta_{1111} + \beta_{1122} + \beta_{2211} - \beta_{2323} - \beta_{2332}$ гиротропного кристалла силиката висмута для данной геометрии взаимодействия.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Госзадания на 2020–2022 годы (задание FEWM-2020-0038/3).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. С.М. Шандаров, А.О. Злобин, А.А. Шмидт, Н.И. Буримов, К.П. Мельник, С.С. Шмаков, А.В. Макаревич, В.Н. Навныко, М.А. Брюшинин, И.А. Соколов // Оптика и спектроскопия, 2021, Т. 129, № 4. С. 413–417
2. Шандаров С.М., Шмаков С.С., Буримов Н.И., Сюваева О.С., Каргин Ю.Ф., Петров В.М. // Письма в ЖЭТФ. 2012. Т. 95. № 12. С. 699–702
3. Шандаров С.М., Шмаков С.С., Зуев П.В., Буримов Н.И., Каргин Ю.Ф., Шепелевич В.В., Ропот П.И., Гуделев В.Г. // Оптический журнал. 2013. Т. 80. № 7. С. 5–12.
4. Шандаров С.М., Буримов Н.И., Шмаков С.С., Зуев П.В., Урбан А.Е., Горбачев В.С., Каргин Ю.Ф., Шепелевич В.В. // Известия РАН. Серия физическая. 2012. Т. 76. № 12. С. 1452–1455.

INVESTIGATION OF SECOND-ORDER EFFECTS USING METHOD OF HOLOGRAFIC INTERFEROMETRY

A.S. Abdulina, A.A. Shmidt, A.O. Zlobin, N.I. Burimov, S.M. Shandarov

Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics

(40, prospect Lenina, 634050, Tomsk, Russia)

e-mail: andrei.o.zlobin@tusur.ru

Adaptive holographic interferometry method based on codirectional interaction of strong stable pump wave and weak phase-modulated signal wave on dynamic hologram formed by themselves in bismuth silicate crystal (110)-cut is used in order to measure crystal constants, connected with reverse flexoelectric and flexogyration effects. Theoretical analysis and experimental research made under condition of collinearity of grating vector and crystallographic direction $[\bar{1}11]$

Keywords: sillenites, flexoelectric effect, photorefractive effect, flexogyration, codirectional interaction.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПЕНСАЦИИ МАСКИРУЮЩИХ ДВИЖЕНИЙ БИОТКАНИ В КОНТАКТНОЙ ОПТИЧЕСКОЙ КОГЕРЕНТНОЙ АНГИОГРАФИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРОЦЕДУРЫ ФУРЬЕ СДВИГА

А.А. Зыков, А.Л. Матвеев, Л.А. Матвеев, В.Ю. Зайцев

*Институт прикладной физики РАН
(603950, г. Нижний Новгород, ул. Ульянова, 46)
e-mail: 119_lex@mail.ru*

Визуализация микрокровотока в оптической когерентной ангиографии (ОКА) основана на выделении движения эритроцитов относительно окружающей неподвижной биоткани. В действительности окружающая биоткань не является статичной, и её движение необходимо компенсировать до ангиографической обработки. Мы представляем метод компенсации больших деформаций, создаваемых контрактующим с поверхностью ОКТ-зондом, когда использование фазовой компенсации недостаточно, и необходима фазово-амплитудная компенсация деформационно-обусловленной декорреляции.

Ключевые слова: оптическая когерентная томография, оптическая когерентная ангиография, ОКТА, кровеносные сосуды

1. ВВЕДЕНИЕ

Оптическая когерентная томография (ОКТ) - один из методов медицинской диагностики. В ОКТ помимо структурной визуализации существуют различные модальности: поляризационно чувствительная ОКТ, ОКТ эластография – визуализация модуля Юнга ткани и ОКТ ангиография (ОКТА) – визуализация кровеносных сосудов. В ОКТА выделение сосудов на фоне окружающей их “неподвижной” биоткани основано на оценке временной изменчивости спеклов ОКТ-изображений. Высокая изменчивость соответствует кровеносным сосудам. Эритроциты являются основными рассеивателями внутри кровеносных сосудов, и именно их движение приводит к повышенной изменчивости спеклов. Для оценки изменчивости ОКТА методы используют такие подходы как: расчёт дисперсии интенсивности или фазы, оценку декорреляции между В-сканами и др.

В данной работе применяется метод высокочастотной Фурье фильтрации, подробно описанный в [1]. В нём используется паттерн сканирования с плавным смещением от В-скана к В-скану с 10-14-кратным перекрытием в

плоскости перпендикулярной В-сканам. В таком случае «статичная» биоткань слабо изменяется от кадра к кадру, поэтому она соответствует низким частотам в Фурье спектре (полученном вдоль направления медленного сканирования), тогда как кровеносные сосуды обладают высокой изменчивостью, поэтому соответствуют высоким частотам. Подавляя низкие частоты, мы подавляем «статичную» биоткань.

Так как все ОКТА методы основаны на оценке изменчивости сигнала, важной проблемой является то, что окружающая «статичная» биоткань на практике подвержена движениям из-за дыхания, сердцебиения и т.д. Такие маскирующие движения дают «ложный ОКТА сигнал», что значительно снижает качество визуализации сосудов. В данной статье мы предлагаем новый метод компенсации маскирующих движений, основанный на теореме о Фурье сдвиге, и сравниваем его с фазовой компенсацией.

2. МОДЕЛЬ

В данной работе используется модель формирования ОКТ-сканов, описанная в [2]. В ней используется приближение баллистического рассеяния от набора дискретных рассеивателей, которые могут испытывать произвольные смещения между последовательными В-сканами. Благодаря этому, модель может легко имитировать кровоток, а также маскирующие движения окружающих тканей.

Параметры для моделирования соответствуют параметрам типичной экспериментальной установки: центральная длина волны спектра - 1,3 мкм в воздухе, ширина спектра ~100 нм, радиус зондирующего пучка ~15 мкм. Размер пикселя составляет 4 мкм в глубину и 16 мкм ширину. Шаг между В-сканами равен 2,14 мкм, что в ~ 14 раз меньше диаметра пучка.

3. ФАЗОВАЯ КОМПЕНСАЦИЯ МАСКИРУЮЩИХ ДВИЖЕНИЙ

Как упоминалось выше, критически важной задачей в ОКТА является подавление естественных движений живых объектов. Данная работа посвящена контактному методу получения изображений. Этот подход позволяет подавить крупномасштабные движения ткани относительно ОКТ-зонда, однако это вызывает деформации ткани. В таком случае смещения рассеивателей в ткани являются пространственно неоднородными, и их компенсация производится фазовым методом с использованием скользящего окна усреднения:

$$\Delta\hat{\varphi}(z, x) = \arg\left(\sum_{z'=z}^{z+Z_p-1} \sum_{x'=x}^{x+X_p-1} B_1(z', x')B_2^*(z', x')\right) \quad (1)$$

$$B_2'(z, x) = B_2(z, x)\exp(i\Delta\hat{\varphi}(z, x)) \quad (2)$$

где z и x - индексы пикселя в аксиальном и боковом направлениях; Z_p и X_p - размеры скользящего окна в пикселях; B_1 и B_2 - исходный и деформированный В-сканы, B_2' это В-скан после компенсации, символ * означает комплексное сопряжение, символ ^ над разностью фаз $\Delta\varphi$ означает, что величина является усреднённой. Для наглядной визуализации результатов мы также вычисляем неусреднённую разность фаз между исходным В-сканом и В-сканом после компенсации:

$$\Delta\varphi'(z, x) = \arg(B_2'(z, x)B_1^*(z, x)) \quad (3)$$

На рисунке 1, показана разность фаз до и после компенсации между парой модельных В-сканов, проходящих через поперечные сечения трех сосудов.

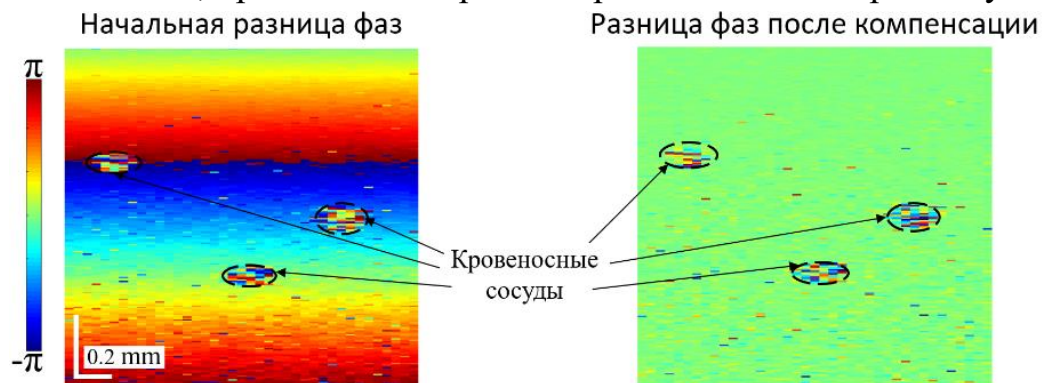


Рис. 1. Разность фаз между В-сканами до и после компенсации

Фазовая компенсация хорошо работает при малых деформациях, но при больших деформациях качество компенсации ухудшается. Это можно объяснить следующим образом. Небольшие деформации приводят к малым смещениям рассеивателей, и большинство из них не покидают свои пиксели. Такие смещения в основном приводят к изменениям фазы. С увеличением деформации большинство рассеивателей покидают свои пиксели, т.е. их сигнал «перетекает» в соседние пиксели. Это приводит к высокому декорреляционному шуму, который наглядно виден на рисунке 2.

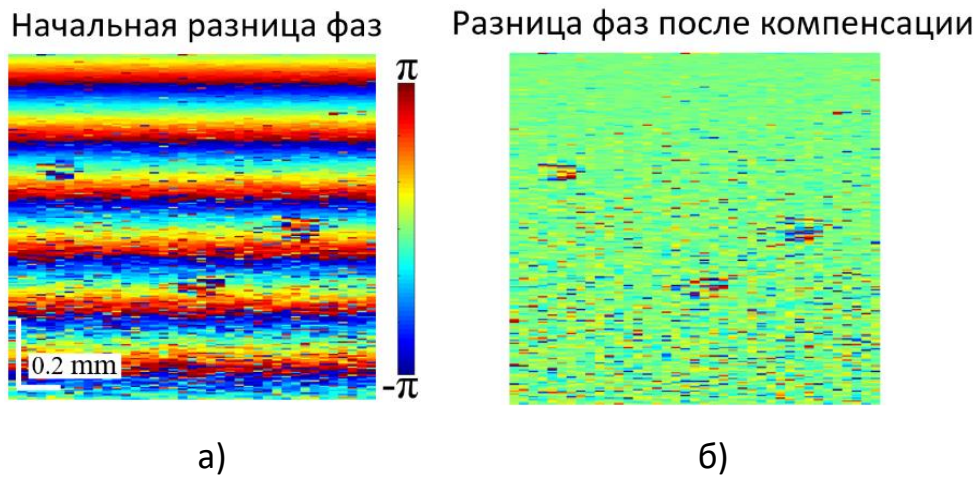


Рис. 2. Разность фаз между В-сканами: а) до и б) после компенсации

Для компенсации объемных движений в случае больших деформаций, мы разработали новый метод, использующий не только фазовую компенсацию, но комбинацию амплитудной и фазовой компенсаций, что позволяет значительно уменьшить межкадровую декорреляцию.

4. ФУРЬЕ КОМПЕНСАЦИЯ МАСКИРУЮЩИХ ДВИЖЕНИЙ

Для понимания идеи метода, сначала рассмотрим одиночный А-скан. Амплитудно-фазовая компенсация основана на теореме Фурье о сдвиге:

$$FFT(A(z - \Delta z)) = FFT(A(z))e^{-ik\Delta z} \quad (4)$$

Таким образом, трансляционное смещение А-скана запишется как:

$$A_{shift}(z - \Delta z) = IFFT(FFT(A(z))e^{-ik\Delta z}) \quad (5)$$

Следует отметить, что, используя уравнение (5), возможно выполнять сдвиг с субпиксельной точностью. Если Δz кратно размеру пикселя H_{px} , то сдвиг идеален, как на рисунке 3(а), в противном же случае комплексная амплитуда несколько изменяется, как показано на рисунке 3(б). Отметим, что профиль А-скана изменяется не потому, что Фурье сдвиг «работает с ошибками», а из-за свойств формирования пиксельного изображения.

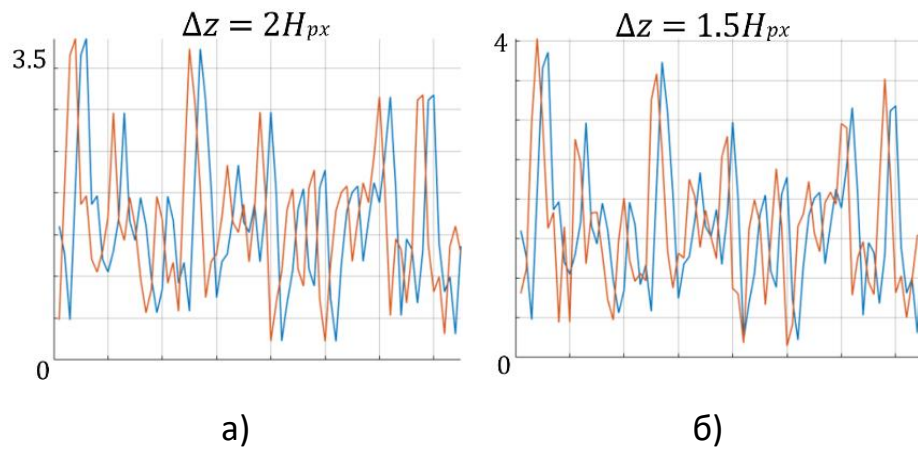


Рис. 3. Фурье сдвиг А-скана: а) сдвиг кратен размеру пикселя б) сдвиг не кратен размеру пикселя

Отметим, что применять теорему о сдвиге ко всему А-скану имеет смысл только в случае, когда сдвиг не зависит от глубины. В противном случае, когда $\Delta z = \Delta z(z)$, А-скан должен быть разделён на небольшие части, где требуемый сдвиг Δz является почти постоянным, и, следовательно, теорема о Фурье сдвиге является применимой.

Для демонстрации возможностей метода, были сгенерированы два А-скана до и после деформации. Смещения рассеивателей задавались как $\Delta z = z \cdot s$ и вблизи нижней части А-скана они достигают размера пикселя. На рисунке 4(а) видно изменение амплитудного профиля деформированного А-скана. На рисунке 4(б) изображены исходный А-скан и А-скан после описанной выше процедуры Фурье сдвига со скользящим окном. В результате оба А-скана выглядят гораздо более похожими.

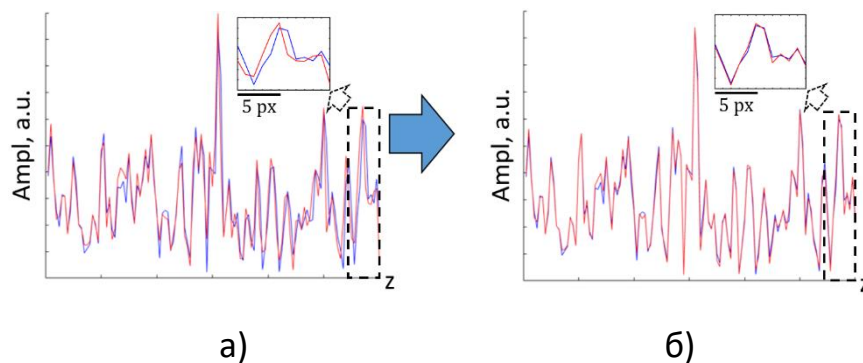


Рис. 4. Демонстрация возможностей неоднородного Фурье сдвига

Полный алгоритм сдвиговой компенсации имеет следующие шаги:

1. Вначале с помощью уравнения (1) рассчитывается векторно усреднённая разность фаз $\Delta \hat{\phi}_{iii}(z, x)$.

2. На основе рассчитанной усреднённой разности фаз вычисляются смещения $\Delta z(z, x)$ вызванные деформацией. Этот шаг реализуется с помощью процедуры снятия неоднозначности фазы:

$$\Delta z(z, x) = \text{unwrap}(\Delta \hat{\phi}_{init}(z, x) / 2k_0) \quad (6)$$

3. Выполняется описанный выше неоднородный Фурье сдвиг для каждого А-скана с помощью уравнения (5), используя вычисленное $\Delta z(z, x)$. В результате получается В-скан B_{2_shift} , сдвинутый на исходное положение. Подчеркнём, что сдвиг приводит к смещению изображения, а не самих рассеивателей. Это означает, что, хотя изображение рассеивателей смещено в исходное положение перед деформацией, его фаза соответствует деформированному положению. Поэтому необходима фазовая компенсация.

4. Далее повторно вычисляется усредненная разность фаз, но на этот раз между исходным сканом B_1 и сдвинутым В-сканом B_{2_shift} :

$$\Delta \hat{\phi}_{fin}(z, x) = \arg \left(\sum_{z'=z}^{z+Zp-1} \sum_{x'=x}^{x+Xp-1} B_1(z', x') B_{2_shift}^*(z', x') \right) \quad (7)$$

5. Последним шагом является фазовая компенсация для B_{2_shift} :

$$B'_{2_shift}(z, x) = B_{2_shift}(z, x) \exp(i \Delta \hat{\phi}_{fin}(z, x)) \quad (8)$$

На рисунке 5 сравниваются результаты сдвиговой и фазовой компенсаций. Предложенный метод приводит к значительному уменьшению декорреляционного шума.

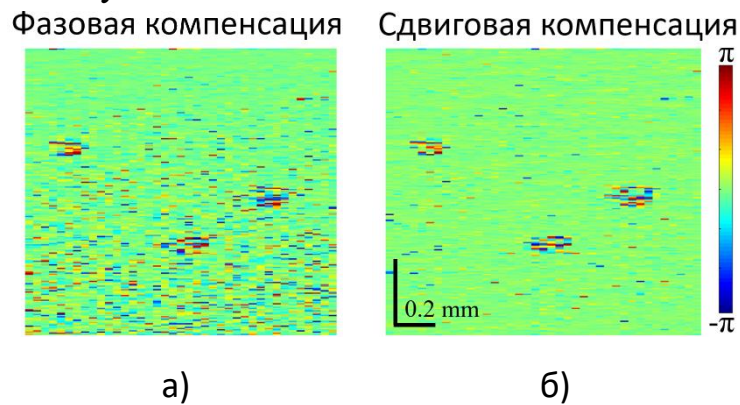


Рис. 5. Результаты а) фазовой и б) сдвиговой компенсаций

5. РЕЗУЛЬТАТЫ

Сравнения фазовой и сдвиговой компенсаций производилось на модельном 3D изображении размером 1000x400x270 мкм с диагональным кровеносным сосудом диаметром 46 мкм. Эритроциты моделируются как

точечные рассеиватели, текущие в одном направлении и совершающие броуновское движение. Маскирующие движения задавались как межкадровые деформации со случайной амплитудой с Гауссовым распределением вероятности с нулевым средним и стандартным отклонением $СКО = 2 * 10^{-3}$. Фазовая компенсация выполнялась скользящим окном 6×6 .

ОКТА изображения, полученные с помощью метода высокочастотной фильтрации и двух описанных выше компенсаций показаны на рисунке 6. Они представлены в виде проекции максимальной амплитуды ОКТА сигнала на горизонтальную *en face* плоскость. Изображение, полученное с использованием сдвиговой компенсации, имеет гораздо меньше артефактов, вызванных маскирующими движениями. Т.к. в модельных данных мы точно знаем положение сосуда, мы можем надёжно количественно сравнить два метода компенсации. Для этого мы вычисляем отношение среднего сигнала внутри сосуда к среднему сигналу вне сосуда:

$$\alpha = \frac{\sum S_{\text{сосуд}} / N_{px_{\text{сосуд}}}}{\sum S_{\text{фон}} / N_{px_{\text{фон}}}} \quad (9)$$

Суммирование ОКТА сигнала выполняется по общему количеству пикселей (N_{px}) внутри и вне сосуда на *en face* изображении. Контраст для фазовой компенсации составляет $\alpha = 5,3$, а для сдвиговой компенсации $\alpha = 16,6$.

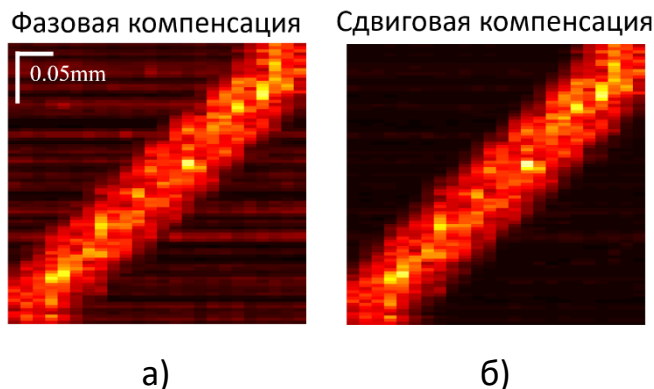


Рис. 6. *En face* изображения

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В этой работе мы представляем новый метод компенсации деформационных маскирующих движений биоткани, возникающих в контактном режиме получения изображений. Предлагаемый метод основан на теореме Фурье о сдвиге, позволяющей сдвигать фрагменты изображений на их исходное положение, что значительно снижает вызванный большими смещениями декорреляционный шум. В сравнение с обычной фазовой

компенсацией сдвиговая компенсация показывает более высокое качество ОКТА визуализации, меньший уровень шумов и артефактов.

Исследование поддержано грантом РФФИ № 22-22-00952.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. A. Moiseev et al. Optical coherence tomography-based angiography device with real-time angiography B-scans visualization and hand-held probe for everyday clinical use. // J. Biophotonics, 2018, v. 11(10), p. e201700292.
2. A. Zykov, A. Matveyev, L. Matveev, A. Sovetsky, and V. Zaitsev, Flexible Computationally Efficient Platform for Simulating Scan Formation in Optical Coherence Tomography with Accounting for Arbitrary Motions of Scatterers. // J-BPE, 2021, v. 7(1), p. 010304.

NUMERICAL SIMULATION OF COMPENSATION OF MASKING MOTION OF BIOLOGICAL TISSUES IN CONTACT-MODE OPTICAL COHERENT ANGIOGRAPHY USING THE FOURIER SHIFT PROCEDURE

A.A. Zykov, A.L. Matveev, L.A. Matveyev, V.Y. Zaitsev

Institute of Applied Physics of the Russian Academy of Sciences

(Ulyanova str., 46, Nizhny Novgorod, Russia, 603950)

e-mail: 119_lex@mail.ru

Visualization of microcirculation in optical coherent angiography (OCTA) is based on the discrimination of the of red blood cells motion relative to the surrounding static biological tissue. In fact, the surrounding biological tissue is not static, and its movement must be compensated before angiographic processing. We present a method for compensating large deformations created by an OCT probe contacting the surface, when the usage of phase compensation is insufficient and phase-amplitude compensation of deformation-induced decorrelation is necessary.

Keywords: optical coherence tomography, optical coherence angiography, OCTA, blood vessels, bulk motion compensation, microvasculature visualization

ВЛИЯНИЕ ОБРАТНОЙ СВЯЗИ НА КОЭФФИЦИЕНТ ОТРАЖЕНИЯ ЧЕТЫРЕХВОЛНОВОГО ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ ИЗЛУЧЕНИЯ НА РЕЗОНАНСНОЙ И ТЕПЛОВОЙ НЕЛИНЕЙНОСТЯХ

А.А. Акимов, В.В. Ивахник, К.Г. Казакова

*Самарский национальный исследовательский университет имени академика
С. П. Королева,
кафедра оптики и спектроскопии
(443011, г. Самара, ул. Академика Павлова, 1)
e-mail: kazakova.cen@yandex.ru*

Проанализированы амплитудные характеристики четырехволнового преобразователя излучения на резонансной и тепловой нелинейностях в схеме с обратной связью. Показано, что с ростом интенсивности волн накачки происходит увеличение выигрыша в коэффициенте отражения четырехволнового преобразователя.

Ключевые слова: четырехволновой преобразователь, резонансная нелинейность, тепловая нелинейность, обратная связь.

1. ВВЕДЕНИЕ

Одним из способов повышения эффективности четырехволновых преобразователей излучения является наложение обратной связи на взаимодействующие волны [1]. Например, реализация обратной связи на сигнальную и объектную волны позволила на порядки повысить коэффициент отражения четырехволнового преобразователя излучения на керровской, тепловой нелинейностях [2].

Наличие в среде нескольких механизмов нелинейности может оказывать существенное влияние на коэффициент отражения четырехволнового преобразователя. Например, наряду с тепловой нелинейностью, обусловленной температурной зависимостью показателя преломления вещества, может реализовываться резонансная нелинейность, связанная с насыщением резонансного перехода между энергетическими уровнями среды [3].

В работе исследуется влияние обратной связи, реализуемой при помощи кольцевого резонатора, на амплитудный коэффициент отражения четырехволнового преобразователя излучения на тепловой и резонансной нелинейностях.

2. ВЫВОД ОСНОВНЫХ ВЫРАЖЕНИЙ

В нелинейной среде навстречу друг другу распространяются две волны накачки с комплексными амплитудами A_1 и A_2 , сигнальная и объектная волны с комплексными амплитудами A_3 и A_4 .

Будем рассматривать четырехволновое взаимодействие в приближении заданного поля по волнам накачки ($|A_{3,4}| \ll |A_{1,2}|$) и малого коэффициента отражения ($|A_4| \ll |A_3|$).

При малом коэффициенте отражения учитывается динамическая решетка, возникающая при интерференции первой волны накачки и сигнальной волны, т. е

$$I = I_0 + A_1 A_3^* + A_1^* A_3,$$

где $I_0 = A_1 A_1^* + A_2 A_2^* = I_1 + I_2$.

Дифференциальное уравнение для пространственного спектра объектной волны ($\tilde{A}'_4(\kappa, z)$) по толщине нелинейного слоя, будет иметь вид:

$$\frac{d\tilde{A}'_4}{dz} = \frac{ik}{n_0} \frac{dn}{dT} \delta\tilde{T}_{31} \tilde{A}'_{20} \exp[-i(k_{2z} - k_{4z})z] - \frac{\alpha_0 b \tilde{A}'_{10} \tilde{A}'_{20} \tilde{A}'_3^* \exp[-2C_1(z)] \exp[-i\Delta z]}{(1 + bI_0)^2}, \quad (1)$$

где n_0 – среднее значение показателя преломления, k – волновое число, $\frac{dn}{dT}$ –

термооптический коэффициент, α_0 – начальный коэффициент поглощения, b –

параметр, характеризующий резонансную нелинейность, $\tilde{A}'_3 = \tilde{A}_3 \cdot \exp[C(z)]$, $\tilde{A}'_4 = \tilde{A}_4 \cdot \exp[C(\ell) - C(z)]$, $C(z) = C_1(z) + C_2(z)$,

$C_1(z) = \int_0^z \frac{\alpha_0}{1 + bI_0(z_1)} dz_1$, $C_2(z) = \frac{ik}{n_0} \frac{dn}{dT} \int_0^z \delta T_0(z_1) dz_1$, $\tilde{A}'_{10} = \tilde{A}_1(z=0)$,

$\tilde{A}'_{20} = \tilde{A}_2(z=\ell)$, δT_0 – медленно меняющаяся составляющая температуры, $\delta\tilde{T}_{31}$ – пространственный спектр температурной решетки, $\Delta = k_{1z} + k_{2z} - k_{3z} - k_{4z}$ – проекция волновой расстройки на ось Z.

В параксиальном приближении при распространении волн накачки вдоль оси Z имеем

$$k_{1z} - k_{3z} = \frac{\kappa^2}{2k}, \quad k_{2z} - k_{4z} = -\frac{\kappa^2}{2k}, \quad \Delta = 0,$$

где κ – пространственная частота.

Изменения по толщине нелинейной среды интенсивностей первой и второй волн накачки описываются следующими уравнениями

$$\begin{cases} \frac{dI_1}{dz} + \frac{2\alpha_0}{1+bI_0} I_1 = 0, \\ \frac{dI_2}{dz} - \frac{2\alpha_0}{1+bI_0} I_2 = 0. \end{cases} \quad (2)$$

Уравнения для медленно меняющейся составляющей температуры и пространственного спектра температурной решетки запишутся в следующем виде

$$\nabla^2 \delta T_0 + \frac{2\alpha_0 I_0}{\Lambda c_p \nu (1+bI_0)} = 0, \quad (3)$$

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - \kappa^2 \right) \delta \tilde{T}_{31} + \frac{2\alpha_0 \tilde{A}_{10}^0 \tilde{A}_3'^* \exp[-i(k_{1z} - k_{3z})z - 2C_1(z)]}{\Lambda c_p \nu (1+bI_0)^2} = 0, \quad (4)$$

где Λ – коэффициент температуропроводности, c_p – удельная теплоемкость, ν – объемная плотность вещества.

При расположении нелинейной среды внутри кольцевого резонатора граничные условия на спектры сигнальной и объектной волн есть:

$$\begin{aligned} \tilde{A}'_3(\kappa, z=0) &= \sqrt{1-r_1} \tilde{A}_{30}(\kappa) + \\ &+ \sqrt{r_1 r_2} \exp\left(-i\Delta_0 + i\frac{\kappa^2}{2k}L\right) \exp\{-C(\ell)\} \tilde{A}'_3(\kappa, z=\ell), \end{aligned} \quad (5)$$

$$\tilde{A}'_4(\kappa, z=0) \sqrt{r_1 r_2} \exp\left(-i\Delta_0 + i\frac{\kappa^2}{2k}L\right) \exp\{-C(\ell)\} = \tilde{A}'_4(\kappa, z=\ell), \quad (6) \text{ где}$$

r_1 – коэффициент отражения полупрозрачного зеркала связи, r_2 – коэффициент отражения сферических зеркал резонатора, осуществляющих перенос пространственного распределения поля из плоскости $z=0$ на плоскость, расположенную на расстоянии L – от задней грани нелинейного слоя ($z=\ell$), $\tilde{A}_{30}(\kappa)$ – пространственный спектр сигнальной волны в плоскости $z=0$ при отсутствии кольцевого резонатора, Δ_0 – постоянный фазовый набег.

Граничные условия на составляющие изменения температуры записывались из условия неизменности температуры на гранях нелинейного слоя.

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Для характеристики эффективности четырехволнового преобразователя излучения введем амплитудный коэффициент отражения

$$R = \sqrt{1 - r_1} \left| \frac{A_4(\kappa = 0, z = 0)}{A_{30}^*} \right|. \quad (7)$$

Введем безразмерный параметр $P = \frac{2}{n_0} \frac{dn}{dT} \frac{\ell}{b\Lambda c_p v}$, характеризующий соотношение между тепловой и резонансной нелинейностями.

На рис.1 при условии равных интенсивностей волн накачки на гранях нелинейного слоя ($I_{10} = I_{20}$, где $I_{10} = |\tilde{A}_{10}^0|^2$, $I_{20} = |\tilde{A}_{20}^0|^2$) приведены характерные зависимости коэффициента отражения от нормированной интенсивности волн накачки как при наличии (кривые 1, 2), так и при отсутствии (кривые 1', 2') обратной связи на объектную и сигнальную волны.

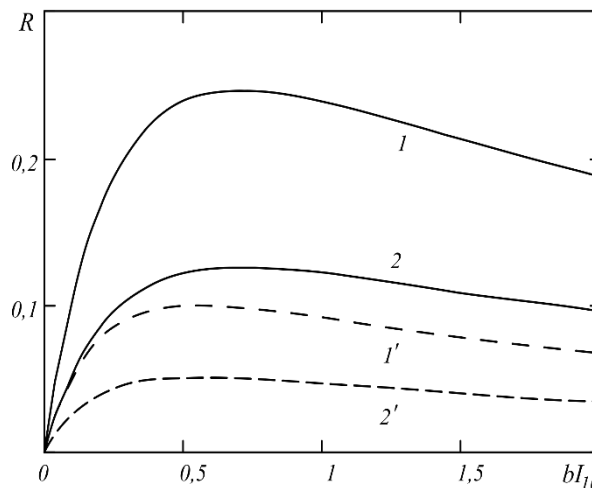


Рис.1. Зависимость коэффициента отражения четырехволнового преобразователя излучения от интенсивности волн накачки при

$$\alpha_0 \ell = 0.1, \quad k\ell = 5 \cdot 10^3, \quad P = 0.02(1,1'); \quad 0.01(2,2'),$$

$$r_1 = 0.8(1,2), \quad r_2 = 0.7(1,2), \quad r_1 = r_2 = 0(1',2')$$

С ростом интенсивности волн накачки коэффициент отражения увеличивается достигает наибольшего значения, а затем медленно уменьшается. Существует оптимальное значение интенсивности волн накачки, при которой коэффициент отражения принимает максимальное значение.

При фиксированной интенсивности волн накачки увеличение составляющей тепловой нелинейности приводит к монотонному увеличению коэффициента отражения четырехволнового преобразователя излучения, как

при наличии, так и при отсутствии обратной связи на объектную и сигнальную волны.

Выигрыш в коэффициенте отражения при наличии и отсутствии обратной связи по сигнальной и объектной волнам

$$\xi = \frac{R(r_1 \neq 0)}{R(r_1 = 0)}, \quad (9)$$

возрастает с увеличением интенсивности волн накачки (рис.2).

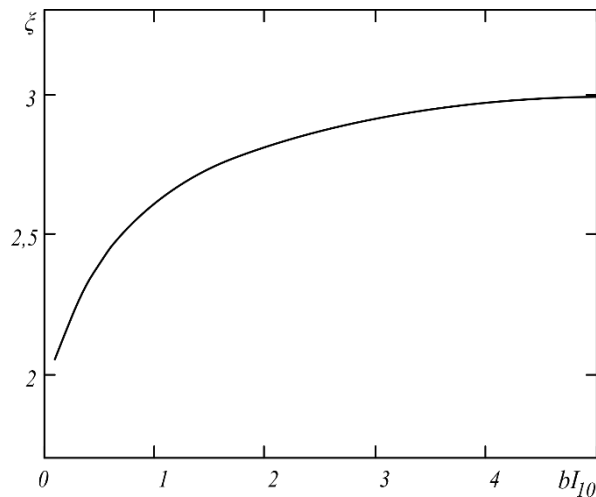


Рис.2. Зависимость выигрыша в коэффициенте отражения от интенсивности волн накачки при $\alpha_0 l = 0.1$, $kl = 5 \cdot 10^3$, $P = 0.01$, $r_1 = 0.8$, $r_2 = 0.7$

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Показано увеличение выигрыша в коэффициенте отражения четырехволнового преобразователя излучения при наличии обратной связи на объектную и сигнальную волны с ростом интенсивности волн накачки;

2. Установлено, что значение коэффициента отражения четырехволнового преобразователя излучения с увеличением соотношения между тепловой и резонансной нелинейностями возрастает.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. В.В. Ивахник, Обращение волнового фронта при четырехволновом взаимодействии. // Самара: Самарский университет, 2010, 246 с.
2. А.А. Акимов, С.А. Гузаиров, В.В. Ивахник, Качество преобразования излучения при четырехволновом взаимодействии на тепловой нелинейности с учетом обратной связи. // Компьютерная оптика, 2021, Т.45, № 5, с. 667-672.

3. V.V. Kabanov, A.S. Rubanov, Dynamic gratings and four-wave phase conjugation in dye solutions. // IEEE Journal of Quantum Electronics, 1990, V.26, №11, p. 1990-1998.

**THE INFLUENCE OF FEEDBACK ON THE REFLECTION
COEFFICIENT OF A FOUR-WAVE RADIATION CONVERTER ON
RESONANT AND THERMAL NONLINEARITIES**

A.A. Akimov, V.V. Ivakhnik, K.G. Kazakova

*Samara National Research University,
Optics and Spectroscopy department
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)
e-mail: kazakova.cen@yandex.ru*

The amplitude characteristics of the four-wave radiation converter on resonant and thermal nonlinearities in a scheme with feedback have been analyzed. It was shown, that the gain in the reflection coefficient of the four-wave converter increases with a growth in the pumping waves intensities.

Keywords: four-wave converter, resonant nonlinearity, thermal nonlinearity, feedback.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ВКЛАДА ФЛУОРОФОРОВ В СПЕКТРЫ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ У ПАЦИЕНТОВ С РАЗЛИЧНЫМИ ЗАБОЛЕВАНИЯМИ ПЕЧЕНИ

К.Ю. Кандурова¹, Д.С. Сумин^{1,2}, А.В. Мамошин^{1,2}, Е.В. Потапова¹

*¹Научно-технологический центр биомедицинской фотоники,
Орловский государственный университет имени И.С. Тургенева
(302026, г. Орёл, ул. Комсомольская, 95)*

*²Орловская областная клиническая больница
(302028, г. Орёл, б-р Победы, 10)*

В работе описаны результаты исследования функционального состояния печени методом флуоресцентной спектроскопии у пациентов с различными заболеваниями. Проводится сравнение результатов измерений флуоресценции у пациентов с механической желтухой и пациентов с заболеваниями, не связанных с закупоркой желчевыводящих путей. Для анализа спектров использовался метод деконволюции. При разложении спектров обнаружена разница во вкладе основных флуорофоров (NADH и билирубин), характеризующих функциональные изменения паренхимы печени. Предложенный подход может быть использован для дальнейшей разработки диагностического критерия оценки печеночной дисфункции.

Ключевые слова: оптическая биопсия, механическая желтуха, флуоресцентная спектроскопия.

1. ВВЕДЕНИЕ

Диагностика и лечение заболеваний органов гепатопанкреатодуоденальной зоны, осложнённых обструкцией желчевыводящих путей, остаётся актуальной проблемой медицины. Синдром механической желтухи развивается при нарушении оттока желчи по желчевыводящим путям в двенадцатиперстную кишку. Непроходимость желчевыводящей системы может быть вызвана различными причинами, в том числе желчнокаменной болезнью, воспалительными процессами, а также доброкачественными и злокачественными новообразованиями органов гепатопанкреатодуоденальной зоны [1].

Блок оттока желчи вызывает значительные нарушения обменных процессов, изменения общей и локальной гемодинамики, приводящие к функциональным и морфологическим нарушениям печени и других жизненно

важных органов [2]. Прогрессирование холестаза при отсутствии своевременного лечения ведет к печеночной недостаточности. Для выбора способа дальнейшей терапии, прогнозирования течения заболевания и достижения лучших результатов лечения, важно иметь представление об изменениях, происходящих в паренхиме печени вследствие печеночной недостаточности [3]. Для оценки тяжести печеночной дисфункции используются клинические и биохимические показатели, а также прогностические шкалы и системы, но они дают приблизительные косвенные результаты, что определяет актуальность поиска дополнительных объективных критериев и разработки технологий для оценки функционального состояния паренхимы печени в режиме реального времени.

Перспективным направлением оценки функционального состояния тканей является метод флуоресцентной спектроскопии (ФС), обладающий высокой чувствительностью к метаболическим изменениям в ткани. Этот метод дает информацию о содержании основных флуорофоров, что позволяет оценить метаболизм печени *in vivo* [4,5]. Кроме того, измерения флуоресценции можно технически осуществить, во время выполнения антеградной декомпрессии желчных протоков, с помощью оптических зондов малого диаметра.

Таким образом, целью работы явилось *in vivo* исследование функционального состояния паренхимы печени при синдроме механической желтухи методом флуоресцентной спектроскопии и оценка вклада основных флуорофоров тканей в состав регистрируемых спектров флуоресценции.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Исследования проводились на базе хирургического отделения Орловской областной клинической больницы и были одобрены этическим комитетом Орловского государственного университета (протокол №14 от 24.01.2019). Все пациенты подписывали информированное согласие на добровольное участие в исследовании.

В работе приняли участие 8 пациентов с синдромом механической желтухи: 5 пациента с холедохолитиазом и 3 пациента со злокачественными новообразованиями. Оптические измерения проводились во время проведения антеградной декомпрессии желчевыводящих путей под ультразвуковым и рентгенотелевизионным контролем. В качестве группы сравнения были использованы результаты флуоресцентной спектроскопии паренхимы печени у больных (8 пациентов) без механической желтухи, полученные во время

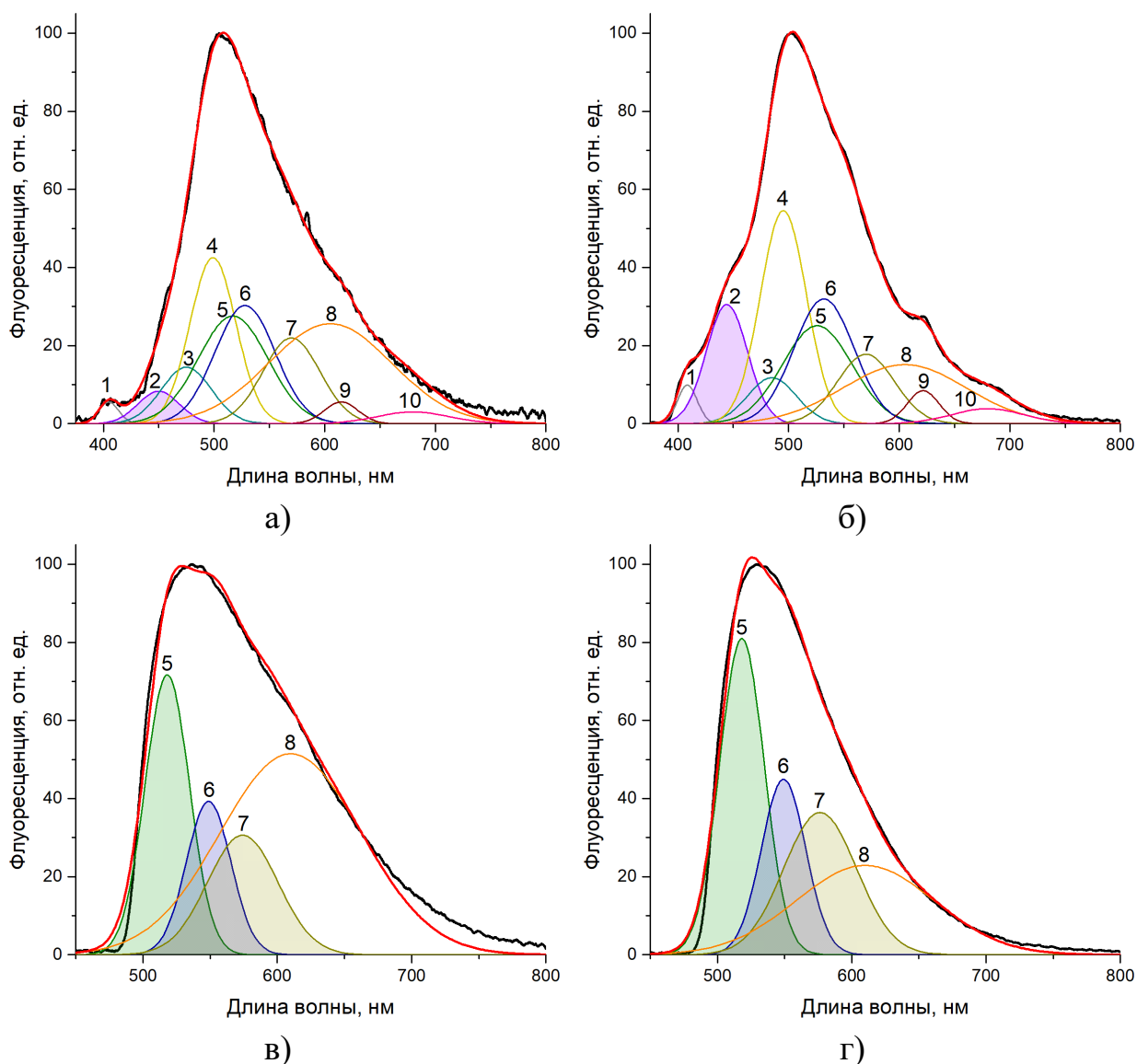
проведения пункционной биопсии очаговых образований печени. Данные спектры флуоресценции зарегистрированы в интактных тканях печени по ходу движения тонкоигольного зонда к очагу [5].

Измерения проводились с помощью специально разработанной установки для оптической биопсии. В качестве источников монохроматического излучения использовались светодиод на длине волны 365 нм и лазерный диод на длине волны 450 нм. Для регистрации спектров флуоресценции использовался ПЗС-спектрометр FLAME T-VIS-NIR-ES (Ocean Optics, США), регистрирующий спектры в диапазоне 350-1000 нм. Для ослабления обратного рассеянного излучения от монохроматических источников перед спектрометром были установлены отсекающие фильтры 400 нм и 495 нм (Thorlabs Inc., США). Для доставки излучения от источников к тканям и сбора вторичного оптического излучения от тканей использовался специально разработанный оптический зонд малого диаметра.

Спектры флуоресценции анализировались в программной среде OriginPro. Обработка данных включала нормирование спектров в масштабе 0-100, сглаживание фильтром Савицкого-Голая и процедуру деконволюции путем итерационного нелинейного подбора на основе алгоритма Левенберга-Марквардта комбинаций гауссовых кривых, отражающих вклад характерных флуорофоров ткани печени в общий сигнал [6, 7]. Качество сходимости кривых проверялось по значению коэффициента детерминации.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

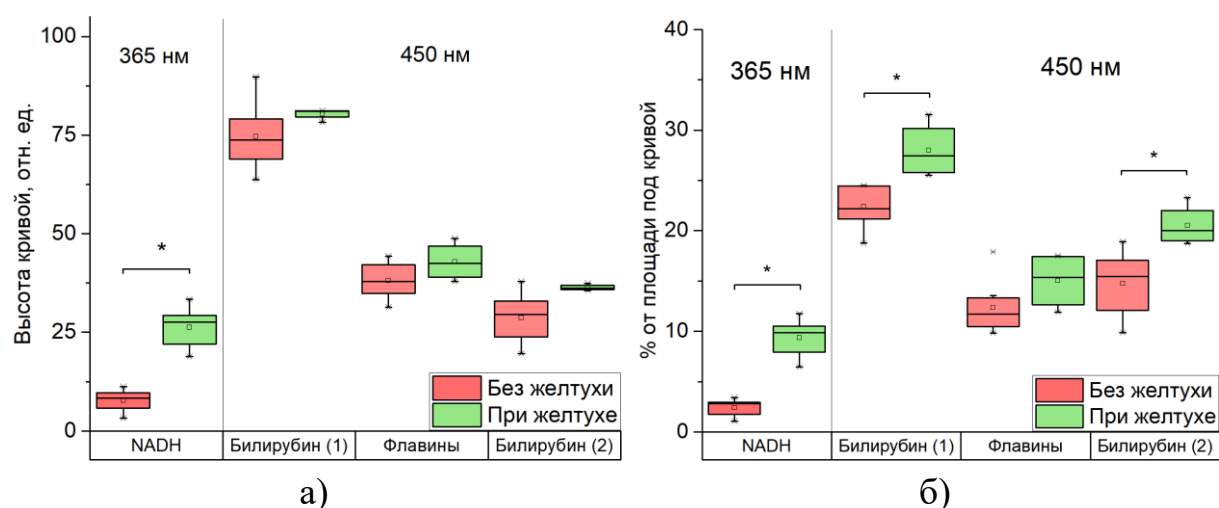
На рисунке 1 показаны примеры результатов разложения спектров флуоресценции. Анализируемыми параметрами являлись высоты гауссовых кривых, площади под гауссовыми кривыми и их относительный вклад в общую площадь под кривой спектра. На графиках цветом под кривыми отмечены следующие флуорофоры: NADH (445 нм), флавины (530-550 нм) и билирубин (517-521 и 565-575 нм). Выбор данных кривых и, следовательно, целевых флуорофоров, был обоснован целью изучения метаболического состояния ткани печени при механической желтухе.



1 – коллаген; 2 – NADH; 3 – жирные кислоты; 4 – витамин А;
 5, 7 – билирубин; 6 – флавины; 8 – липофусцины; 9 – протопорфирин IX;
 10 – производные порфирина

Рис. 1. Примеры деконволюции спектров флуоресценции тканей печени для возбуждающего излучения на длине волны 365 нм: а) группа сравнения без механической желтухи, б) пациенты с механической желтухой; и 450 нм: в) группа сравнения, г) пациенты с механической желтухой

Анализ параметров кривых (рисунок 2) показал статистически значимое преобладание NADH для обоих параметров (высота и площадь) в спектрах, возбужденных излучением на длине волны 365 нм. Анализ кривых, полученных для спектров, возбужденных излучением на длине волны 450 нм, показал характерное увеличение процента площади обеих кривых билирубина в группе пациентов с механической желтухой.



* Статистические значимые различия для $p < 0,05$

Рис. 2. Сравнение параметров кривых основных флуорофоров: а) высота гауссовых кривых, б) процент площади под гауссовыми кривыми флуорофоров в общей площади под кривой спектра флуоресценции

Полученные результаты отражают метаболические изменения, связанные со сдвигами в содержании основных флуорофоров тканей печени. Преобладание NADH может указывать на нарушения утилизации кислорода и, следовательно, гипоксию, возникающую в тканях из-за тяжелой дисфункции гепатоцитов, которая в свою очередь приводит к печеночной недостаточности. Также у больных с синдромом механической желтухи наблюдается значительное накопление билирубина из-за препятствия для оттока желчи из печеночных ацинусов и её накопления в тканях печени.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, описанные представленные свидетельствуют о возможности применения метода ФС для получения данных о функциональном состоянии паренхимы печени. Уровни NADH и билирубина могут быть использованы для дальнейшего изучения как возможные диагностические и прогностические маркеры течения печеночной недостаточности.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках проекта №21-15-00325.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. В.И. Подолужный, Механическая желтуха: принципы диагностики и современного хирургического лечения // *Фундаментальная и клиническая медицина*, 2018, т. 3, № 2, с. 82-92.
2. T.C. See, Acute biliary interventions // *Clinical Radiology*, 2020, v. 75, №. 5, p. 398.e9-398.e18.
3. S. Lukmonov, Minimally invasive biliary decompression methods in management of obstructive jaundice of malignant etiology // *HPB*, 2018, v. 20 (S2), p. S730.
4. K. Kandurova, V. Dremin, E. Zherebtsov et al. Fiber-optic system for intraoperative study of abdominal organs during minimally invasive surgical interventions // *Applied Sciences*, 2019, v. 9, № 2, 217.
5. V. Dremin, E. Potapova, E. Zherebtsov et al., Optical percutaneous needle biopsy of the liver: a pilot animal and clinical study // *Scientific Reports*, 2020, v. 10, 14200.
6. A.C. Croce, A. Ferrigno, G. Santin et al. Autofluorescence of liver tissue and bile: organ functionality monitoring during ischemia and reoxygenation // *Lasers in surgery and medicine*, 2014, v. 45, № 5, p. 412-421.
7. A.C. Croce, A. Ferrigno, G. Bottiroli et al. Autofluorescence-based optical biopsy: An effective diagnostic tool in hepatology // *Liver International*, 2018, v. 38, № 7, p. 1160-1174.

COMPARATIVE ANALYSIS OF FLUOROPHORE CONTRIBUTION TO FLUORESCENCE SPECTRA IN PATIENTS WITH VARIOUS LIVER DISEASES

K.Y. Kandurova¹, D.S. Sumin^{1,2}, A.V. Mamoshin^{1,2}, E.V. Potapova¹

¹Research and Development Center of Biomedical Photonics,

Orel State University named after I.S. Turgenev

(Komsomolskaya st., 95, Orel, Russia, 302026)

²Orel Regional Clinical Hospital

(Pobedy blvd., 10, Orel, Russia, 302028)

The article describes the results of liver functional state study by fluorescence spectroscopy in patients with various diseases. We compare results of fluorescence measurements in patients with obstructive jaundice and patients with diseases not related to biliary tract obstruction. To analyze spectra we used deconvolution method. The difference in contribution of main fluorophores (NADH and bilirubin) characterizing functional changes of liver tissues was revealed. The proposed approach can be used for further development of diagnostic criteria for assessment of hepatic dysfunction.

Keywords: optical biopsy, obstructive jaundice, fluorescence spectroscopy.

ПОВЕРХНОСТЬ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ ЭТИЛОВОГО РАДИКАЛА С МОНООКТИДОМ УГЛЕРОДА

М. М. Евсеев^{1,2}, О. В. Кузнецов^{1,2}

¹*Самарский национальный исследовательский университет имени академика*

С.П. Королева

(443086 Россия, Самарская область, Самара, Московское шоссе, 34Б)

²*Самарский филиал Физического Института Академии Наук им. П.Н.*

Лебедева

(443110 Россия, Самарская область, Самара, ул. Ново-Садовая, 221)

email: kuznetsovov.lab@gmail.com

В настоящей работе рассматривается поверхность потенциальной энергии системы $C_2H_5 + CO$ и ее возможные продукты, получаемые отрывами водорода. Поверхность потенциальной энергии и геометрии входящих молекул были получены на уровне теории CCSD(T)-F12/cc-pVTZ-f12//ВЗРЛУР/6-311G**, обеспечивающим точность по относительной энергии порядка 1 ккал/моль. Результаты работы можно использовать для моделирования химической реакции в холодных молекулярных облаках и предсказания относительных концентраций различных продуктов системы $C_2H_5 + CO$.

Ключевые слова: монооксид углерода, этиловый радикал, квантовая химия, сложные органические молекулы, космический лед, поверхность потенциальной энергии, теория функционала плотности.

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение образования сложных органических молекул (СОМ) является актуальной задачей современной науки. На сегодняшний день известно более 200 молекул, находящихся в межзвездной среде, большинство из которых органические [1]. Сложные органические молекулы могут образовываться в ходе газофазных реакций в молекулярных облаках. Ввиду сверхнизких температур в молекулярных облаках молекулы образуются в основном в ходе радикал-радикальных и ионных реакций, хотя некоторые нейтрал-нейтральные реакции также могут протекать в таких условиях при наличии дополнительных источников энергии – фотонов и галактических космических лучей. Однако только газофазные реакции являются недостаточными для

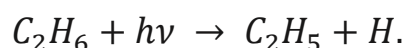
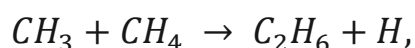
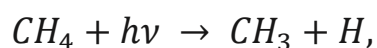
объяснения наблюдаемой картины химического разнообразия в межзвездной среде.

Согласно современным астрохимическим моделям, СОМ главным образом образуются на частицах межзвездной пыли [2]. Двумя основными путями химических реакций в твердой фазе являются ассоциация адсорбированных радикалов на поверхности пылевых частиц, и фотохимические реакции внутри оболочки льда, инициированные ультрафиолетовыми фотонами и космическими лучами [3]. Значимость этих путей подтвердилась обнаружением СОМ в ходе миссий космических аппаратов к кометам 67P / Чурюмова-Герасименко [4] и 81 P / Вильда 2 [5].

При гравитационном коллапсе молекулярного облака оно нагревается, и СОМ сублимируются с поверхности пылинок в газовую фазу, где их можно обнаружить спектроскопическими методами. Подавляющее большинство СОМ были обнаружены

в молекулярных облаках. Так например в молекулярном облаке Стрелец В2 был обнаружен гликоальдегид – простейший сахар [6]. После этого открытия альдегиды и кетоны приобрели большой интерес для астрохимического сообщества, поскольку они по своей структуре близко связаны с альдозами и кетозами, и могут являться промежуточными стадиями синтеза сахаров в межзвездной среде [7]. Изучение механизмов образования альдегидов и кетонов является важным шагом для понимания формирования сложных биологически значимых молекул в межзвездной среде.

В настоящей работе рассматривается поверхность потенциальной энергии системы $C_2H_5 + CO$, многие молекулы и продукты которой представляют астрохимический интерес. Так, акролеин (пропеналь) был обнаружен в молекулярном облаке Стрелец В2 [8], а метилкетен и циклопропанон были обнаружены в лабораторных экспериментах с космическими льдами. Реагенты, в особенности монооксид углерода, также присутствуют в МЗС в большом количестве. Этиловый радикал может образовываться посредством реакций радикального замещения и фотодиссоциации из метана во льдах МЗС:



2. МЕТОДИКА

Молекулярные параметры реагентов, продуктов, локальных минимумов и переходных состояний были оптимизированы на уровне теории функционала плотности с трёхпараметрическим функционалом Бекке и корреляционным функционалом Ли–Янга–Парра B3LYP [10,11] и базисным набором Попла 6-311G(d,p). На этом же уровне теории были рассчитаны гармонические колебательные частоты и энергии нулевых колебаний. Для подтверждения предполагаемой связности найденных интермедиатов через соответствующие переходные комплексы проводились расчёты, основанные на понятии внутренней координаты реакции (IRC). Уточнение электронных энергий производилось методом связанных кластеров с одиночными, двойными и тройными (в рамках теории возмущений) возбуждениями CCSD(T) [12,13] с базисным набором Даннинга cc-pVTZ [14]. Данный подход позволил достичь химической точности по относительным энергиям на уровне 1 кКал/моль, по длинам связи – 0.01-0.02 Å, по валентным углам – 1-2°, по двугранным углам – 2-4°.

Для проведения *ab initio* расчётов электронной структуры использовались программные пакеты GAUSSIAN 09 и MOLPRO 2015.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Профиль поверхности потенциальной энергии предложенного механизма реакции радикала этилена C₂H₅ (**r1**) с оксидом углерода II CO (**r2**), приводящего к формированию циклопропанона (**p1**), проп-1-ин-1-ола (**p6**), метилкетена (**p2**), пропа-1,2-диен-1-ола (**p3**), 2-циклопропенола (**p4**) и 1-циклопропенола (**p5**), приведён на рисунке 1. На первом шаге реакции, при сближении реагентов, образуется CC связь между атомами углерода в CO и в CH₂ фрагменте C₂H₅ через барьер **tspo-1** в 6.3 ккал/моль и образование интермедиата **w1** с энергией -7.7 ккал/моль. В дальнейшем происходит ветвление реакции.

Из интермедиата **w1** через барьер **ts1-p2** в 38.5 ккал/моль может происходить формирование метилкетена **p2** посредством отрыва атома водорода от CH₂ группы.

Интермедиат **w1** может изомеризоваться сдвигом 1 2 атома водорода с CH₂ группы на соседний атом углерода через переходное состояние **ts1-4** высотой 37.5 ккал/моль с образованием интермедиата **w5**, который может посредством перехода 1 – 4 атома водорода с CH₃ фрагмента на атом кислорода через барьер **ts4-5** в 28.1 ккал/моль перейти в интермедиат **w6**. Из

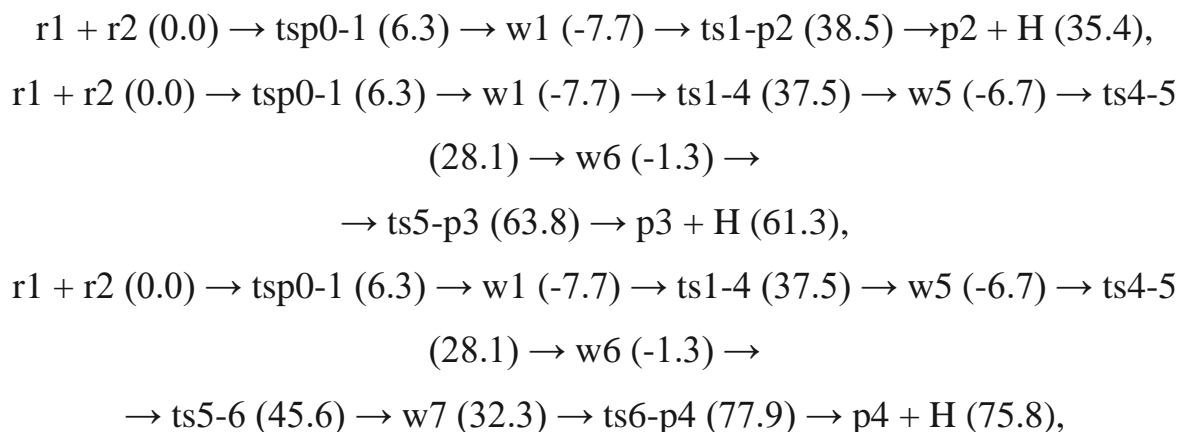
интермедиата **w5** через барьер **ts5-p7** в 38.6 ккал/моль может происходить формирование акролеина **p7** посредством отрыва атома водорода от CH_3 группы.

Из интермедиата **w6** возможно формирование пропа-1,2-диен-1-ола **p3** отрывом атома водорода от CH группы C_2H_3 фрагмента через переходное состояние **ts5-p3** высотой 63.8 ккал/моль. Также возможен переход в интермедиат **w7** закрытием трёхчленного цикла из атомов углерода, образованием $\text{C}-\text{C}$ связи между крайними атомами, через барьер **ts5-6** в 45.6 ккал/моль. Из интермедиата **w7** могут формироваться 2-циклопропенол **p4**, 1-циклопропенол **p5** посредством отрывов атома водорода от атомов углерода в группах CH_2 , CHOH через барьеры **ts6-p4**, **ts6-p5** в 77.9, 82.9 ккал/моль, соответственно. Альтернативно, возможен переход в состояние **w4** сдвигом 1 – 2 атома водорода с атома углерода в CHOH группе на соседний атом углерода CH группы через переходное состояние **ts6-3** высотой 77.8 ккал/моль с последующим формированием циклопропанона **p1** отрывом атома водорода от атома кислорода через барьер **ts3-p1** в 66.4 ккал/моль.

Посредством сдвига 1 – 4 атома водорода с CH_3 группы на атом кислорода через барьер **ts1-2** в 69.1 ккал/моль возможен переход из состояния **w1** в состояние **w2**, которое, в свою очередь, может перейти в состояние **w4** посредством закрытия трёхчленного цикла из атомов углерода через базбарьерное переходное состояние **ts2-3**.

Также из интермедиата **w1** возможна изомеризация переходом 1 – 3 атома водорода с CH_2 группы на атом кислорода через барьер **ts17** в 79.1 ккал/моль с образованием интермедиата **w8** и последующим формированием проп-1-ин-1-ола **p6** посредством отрыва атома водорода от CH группы через барьер **ts7-p6** в 67.5 ккал/моль.

В результате были найдены следующие каналы реакции (в скобках приведена энергия в ккал/моль относительно уровня реагентов):



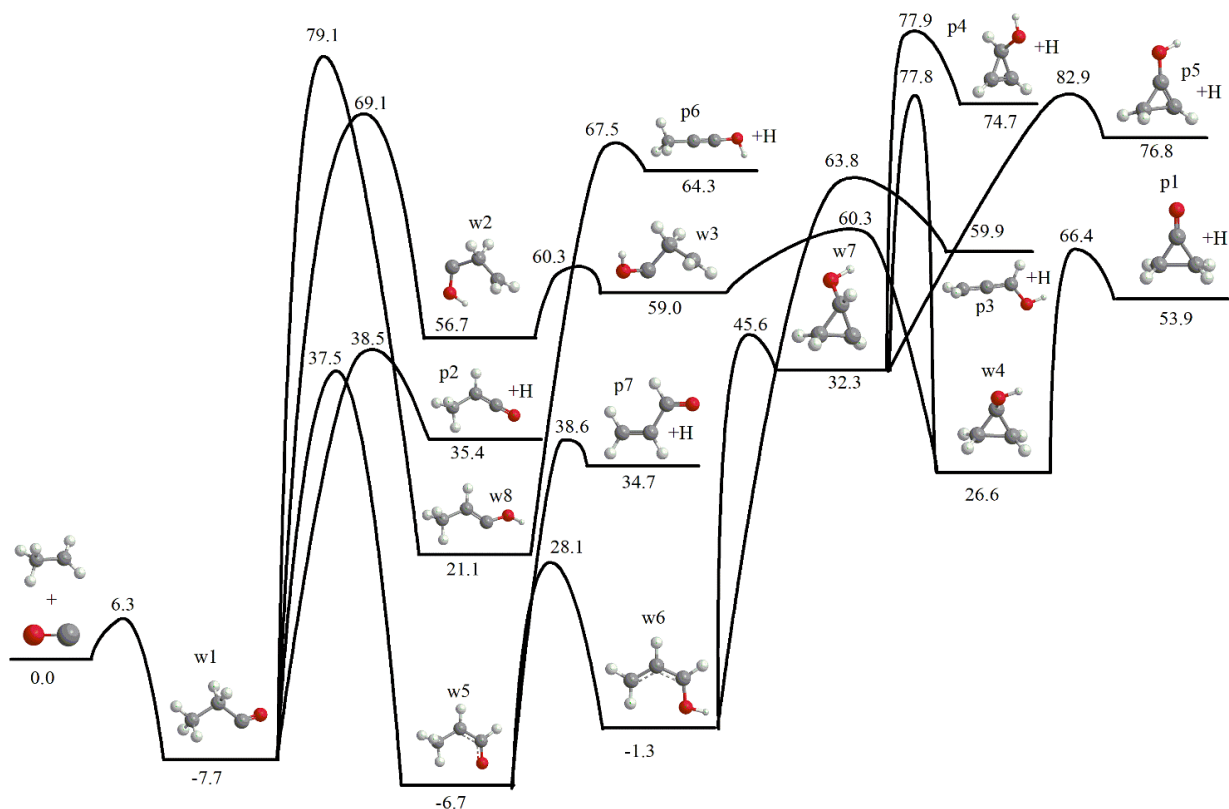
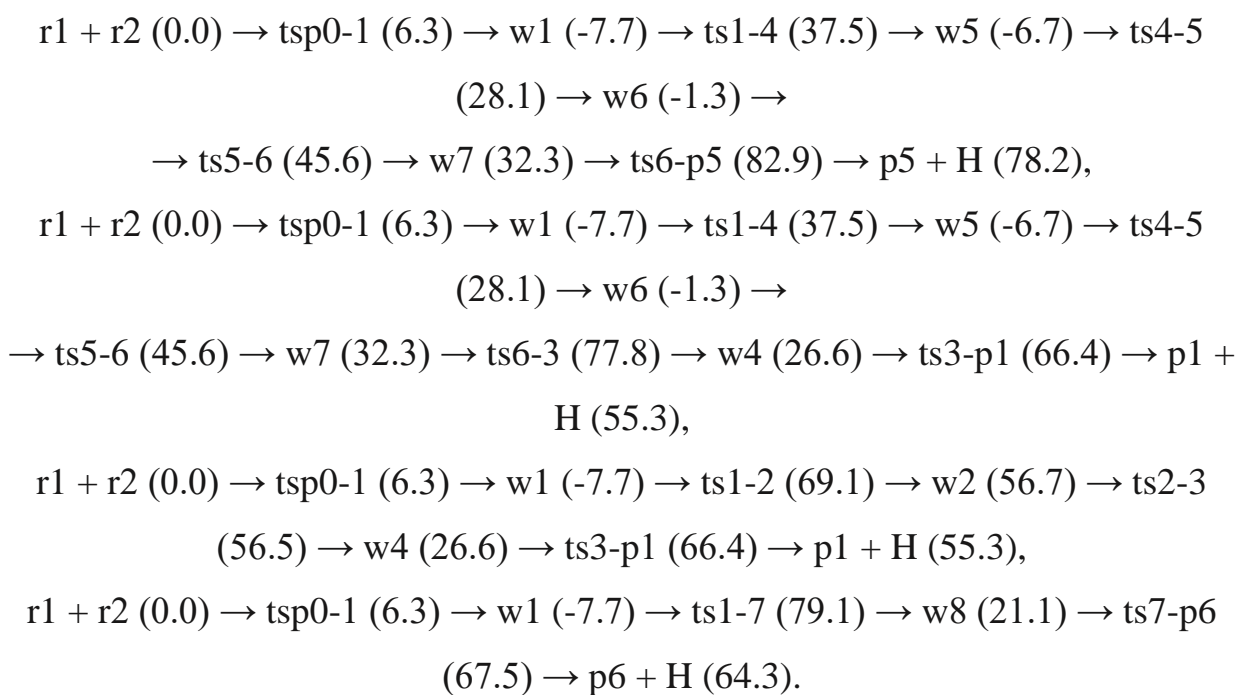


Рис. 1. Поверхность потенциальной энергии реакции радикала этилена с CO

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках настоящей работы был построен профиль поверхности потенциальной энергии для реакции этилового радикала с оксидом углерода (II) на уровне теории CCSD(T)-F12/cc-pVTZ-f12//B3LYP/6-311G(d,p).

Проведенные расчеты показывают, что циклопропанон может образовываться в рамках данной реакции. Тем не менее, анализ поверхности показывает, что доминирующим продуктом, вероятно, будет являться продукт **p2**, в виду энергетической и энтропийной выгод пути реакции к нему. Циклопропанон (**p1**) может образовываться в данной реакции наряду с метилкетеном (**p2**), проп-1-ин-1-олом (**p6**), пропа-1,2-диен-1-олом (**p3**), 2-циклопропенолом (**p4**) и 1-циклопропенолом (**p5**). Полученные результаты могут помочь в объяснении разнообразия сложных органических молекул в межзвездной среде.

Работа выполнена в рамках гранта № 075-15-2021-597 «Происхождение и эволюция органических молекул в нашей Галактике».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. E. Herbst, "Chemistry in the cold, warm, and hot interstellar medium." AIP Conference Proceedings. Vol. 1543. No. 1. American Institute of Physics, 2013.
2. C. Walsh, T. J. Millar, H. Nomura, E. Herbst, S. W. Weaver, Y. Aikawa, J. C. Laas and A. Vasyunin. "Complex organic molecules in protoplanetary disks." *Astronomy & Astrophysics* 563 (2014): A33.
3. Öberg, Karin I. "Photochemistry and astrochemistry: Photochemical pathways to interstellar complex organic molecules." *Chemical Reviews* 116.17 (2016): 9631-9663.
4. F. Capaccioni and G. Filacchione (on behalf of Rosetta collaboration). "The organic-rich surface of comet 67P/Churyumov-Gerasimenko as seen by VIRTIS/Rosetta." *Science* 347.6220 (2015): aaa0628.
5. J. Westphal, S. C. Fakra, Z. Gainsforth, M. A. Marcus, R. C. Ogliore, & A. L. Butterworth, "Mixing fraction of inner solar system material in Comet 81P/Wild2." *The Astrophysical Journal* 694.1 (2009): 18.
6. Coutens A. et al. Detection of glycolaldehyde toward the solar-type protostar NGC 1333 IRAS2A // *Astronomy & Astrophysics*. – 2015. – Т. 576. – С. A5.
7. Hollis J. M., Lovas F. J., Jewell P. R. Interstellar glycolaldehyde: The first sugar // *The Astrophysical Journal*. – 2000. – Т. 540. – №. 2. – С. L107.
8. Manigand S. et al. The ALMA-PILS survey: first detection of the unsaturated 3-carbon molecules Propenal (C₂H₃CHO) and Propylene (C₃H₆) towards IRAS 16293–2422 B // *Astronomy & Astrophysics*. – 2021. – Т. 645. – С. A53.
9. Abplanalp M. J. et al. On the formation and isomer specific detection of propenal (C₂H₃CHO) and cyclopropanone (c-C₃H₄O) in interstellar model ices—a combined FTIR and reflectron time-of-flight mass spectroscopic study // *The Astrophysical Journal*. – 2015. – Т. 814. – №. 1. – С. 45.

10. Axel, D. Becke. (1993). Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. *The Journal of chemical physics*, 98.7, 5648-5652.
11. Lee, C., Yang, W., & Parr, R. G. (1988). Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Physical review B*, 37(2), 785.
12. Adler, T. B., Knizia, G., & Werner, H. J. (2007). A simple and efficient CCSD (T)-F12 approximation. *The Journal of chemical physics*, 127(22), 221106.
13. Knizia, G., Adler, T. B., & Werner, H. J. (2009). Simplified CCSD (T)-F12 methods: Theory and benchmarks. *The Journal of chemical physics*, 130(5), 054104.
14. Dunning Jr, T. H. (1989). Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. I. The atoms boron through neon and hydrogen. *The Journal of chemical physics*, 90(2), 1007-1023.

THE SURFACE OF THE POTENTIAL ENERGY OF THE CHEMICAL REACTION OF AN ETHYL RADICAL WITH CARBON MONOXIDE

M. M. Evseev^{1,2}, O. V. Kuznetsov^{1,2}

¹*Samara National Research University named after Academician S.P. Korolev
(443086 Russia, Samara region, Samara, Moskovskoe shosse, 34B)*

²*Samara branch of the Physical Institute of the Academy of Sciences named after
P.N. Lebedev
(443110 Russia, Samara region, Samara, Novo-Sadovaya str., 221)
email: kuznetsovov.lab@gmail.com*

In this paper, the surface of the potential energy of the C₂H₅ +CO system and its possible products obtained by hydrogen separation are considered. The surface of the potential energy and geometry of the incoming molecules were obtained at the theory level CCSD(T)-F12/cc-pVTZ-f12//B3PLYP/6-311G**, providing accuracy in relative energy of the order of 1 kcal/mol. The results of the work can be used to simulate a chemical reaction in cold molecular clouds and predict the relative concentrations of various products of the C₂H₅ +CO system.

Keywords: carbon monoxide, ethyl radical, quantum chemistry, complex organic molecules, space ice, potential energy surface, density functional theory.

ПРОФИЛЬ ПОВЕРХНОСТИ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ МОНОМОЛЕКУЛЯРНОГО РАСПАДА МОЛЕКУЛЫ ГЛИОКСАЛЯ

А.А. Кузнецова¹, Д.П. Порфирьев^{1,2}

¹Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева РАН
(443011, г. Самара, ул. Ново-Садовая, 221)

²Самарский национальный исследовательский университет,
(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)
e-mail: malina-jun@yandex.ru

В данной работе представлены результаты квантово-химического исследования путей мономолекулярного распада молекулы глиоксаля. Был построен профиль поверхности потенциальной энергии, включающий энергетически наиболее выгодные пути, полученные на уровне теории CCSD(T)-F12/cc-pVTZ-F12//B3LYP/6-311G(d,p). Данные методы обеспечивают химическую точность по относительным энергиям и молекулярным параметрам.

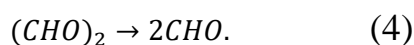
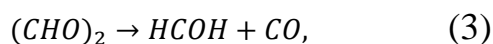
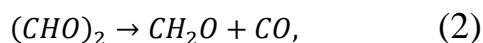
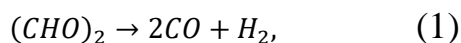
Ключевые слова: конкурс-конференция, глиоксаль, мономолекулярный распад, поверхность потенциальной энергии, квантовая химия.

1. ВВЕДЕНИЕ

Мономолекулярная диссоциация глиоксаля ($C_2H_2O_2$) была предметом многих экспериментальных и теоретических исследований, и продолжительное время оставались вопросы относительно преобладающего пути распада [1, 2, 3]. Так, исследования фотодиссоциации в экспериментах с молекулярным пучком идентифицировали основным путь, приводящий к образованию формальдегида (CH_2O) и монооксида углерода (CO) (формальдегидный путь) [4]. С другой стороны, эксперименты по термическому разложению и теоретические исследования предсказывали преобладание пути, ведущего непосредственно к образованию H_2 и $2CO$ (путь тройного удара) [5, 6]. В исследовании [7] было показано, что при высоких температурах оказывается преобладающим канал тройного удара, что согласуется с результатами высокотемпературных экспериментов по термическому разложению, в то время как формальдегидный канал является преобладающим при низких температурах, что согласуется с продуктами, получаемыми в исследованиях фотодиссоциации.

На сегодняшний день известны еще два канала диссоциации глиоксаля – гидроксиметиленовый и распад на два радикала [8, 9]. Характерной особенностью гидроксиметиленового пути является получение в качестве продуктов распада гидроксиметилена (изомера формальдегида) НСОН и монооксида углерода СО из транс-изомера глиоксаля. При диссоциации на два радикала, продуктами распада являются 2СНО.

Таким образом, глиоксаль может диссоциировать следующими путями



В настоящей работе результаты квантово-химических расчетов для вышеупомянутых путей мономолекулярного распада молекулы глиоксаля, полученные с использованием методов CCSD(T)-F12/cc-pVTZ-F12 и V3LYP/6-311G(d,p), представлены в сравнении с более ранними исследованиями в этой области.

2. МЕТОДИКА

В настоящей работе оптимизация молекулярных параметров реагентов, продуктов, локальных минимумов и переходных состояний была реализована на уровне теории функционала плотности с трёхпараметрическим функционалом Бекке, корреляционным функционалом Ли-Янга-Парра V3LYP [10, 11] и базисным набором Попла 6-311G(d,p). Также, на этом же уровне теории были рассчитаны гармонические колебательные частоты и энергии нулевых колебаний. Связность найденных стационарных состояний через соответствующие переходные состояния, была подтверждена IRC расчетами. Уточнение электронных энергий производилось методом связанных кластеров с одиночными, двойными и тройными (в рамках теории возмущений) возбуждениями CCSD(T) [12, 13] с явно коррелированным базисным набором Даннинга cc-pVTZ [14].

Данный подход позволил достичь химической точности по относительным энергиям на уровне 1 кКал/моль [15], по длинам связи – 0.01-0.02 Å, по валентным углам – 1-2°, по диэдральным углам – 2-4°. Для проведения ab initio расчётов электронной структуры использовались программные пакеты GAUSSIAN 09 и MOLPRO 2015.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рисунке 1 представлен профиль поверхности потенциальной энергии для путей мономолекулярного распада молекулы глиоксаля. В качестве нулевого значения энергии был выбран изомер глиоксаля с наименьшей энергией – транс-глиоксаль.

Механизм тройного удара обозначен номером I, имеет барьер с энергией активации 59.53 ккал/моль и, на основании полученных численных результатов, является преобладающим каналом распада. Для получения распада через канал тройного удара, необходимо учесть, что атомы водорода должны находиться относительно близко друг к другу, чтобы образовать продукт диссоциации.

Формальдегидный путь представлен номером II, имеет энергию активации 77.47 ккал/моль, что значительно выше канала тройного удара, и является двухстадийной реакцией с образованием продуктов: CH_2O и CO – на первом этапе, и, H_2 и 2CO – на втором этапе в результате возможной диссоциации формальдегида. Данная реакция была предметом споров и продолжительное время предполагалось, что диссоциация по данному пути маловероятна. В рамках данного исследования дальнейшая диссоциация формальдегида не рассматривалась, поэтому поверхность потенциальной энергии ограничена первым этапом реакции.

Гидроксиметиленовый путь впервые рассматривался в работе [7]. Данный канал обозначен на рисунке номером III, имеет энергию активации равную 61.57 ккал/моль, и представляет собой также двухстадийную реакцию распада транс-изомера глиоксаля, приводящую к образованию гидроксиметилена НСОН и CO на первом этапе, с возможностью дальнейшей изомеризации или диссоциации гидроксиметилена на втором этапе. Дальнейшие преобразования гидроксиметилена на поверхности не представлены. Распад глиоксаля на два радикала 2СНО представлен номером IV. Данный распад происходит без переходного состояния.

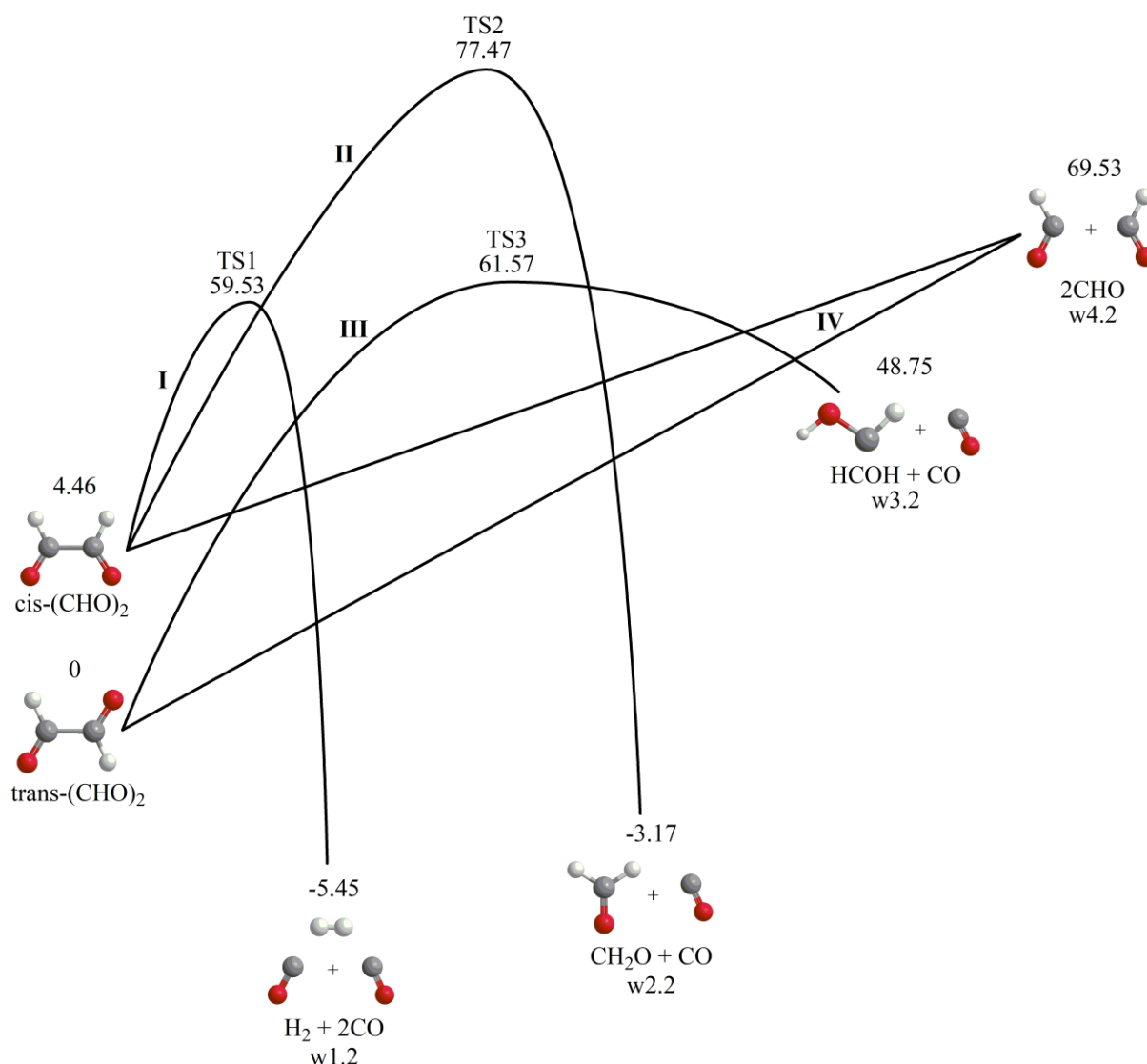


Рис.1. Поверхность потенциальной энергии мономолекулярной диссоциации молекулы глиоксаля. Энергия указана в ккал/моль.

В таблице 1 представлены значения потенциальной энергии для стационарных и переходных состояний путей мономолекулярного распада глиоксаля, полученные методами G3//MP2(full)/6-31G* [7] и CCSD(T)-F12/cc-pVTZ-F12//B3LYP/6-311G(d,p). Из сравнения видно, что разность между значениями для различных методов лежит в интервале 1-22%, за исключением TS2, для которого различие составляет 29%. Однако, необходимо заметить, что в исследовании [7] было показано, что формальдегидный путь имеет три варианта барьера активации: 55.1, 74.0 и 76.7 ккал/моль. Таким образом, вероятным является объяснение, что авторами было найдено переходное состояние с наиболее высокой энергией активации.

Таблица 1. Потенциальная энергия стационарных и переходных состояний, полученных различными методами. Cis-(CHO)₂ и Trans-(CHO)₂ являются стационарными состояниями. Энергия указана в ккал/моль.

| | G3//MP2(full)/6-31G* | CCSD(T)-F12/cc-pVTZ-F12//B3LYP/6-311G(d,p) |
|--------------------------------|-----------------------------|---|
| Cis-(CHO)₂ | 4.6 | 4.46 |
| Trans-(CHO)₂ | 0 | 0 |
| w1.2 | -7.0 | -5.45 |
| w2.2 | -3.9 | -3.17 |
| w3.2 | 48.4 | 48.75 |
| TS1 | 60.0 | 59.53 |
| TS2 | 55.1 | 77.47 |
| TS3 | 60.3 | 61.57 |

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе построен профиль поверхности потенциальной энергии путей мономолекулярного распада молекулы глиоксаля, включающий энергетически наиболее выгодные пути, полученные на уровне теории CCSD(T)-F12/cc-pVTZ-F12//B3LYP/6-311G(d,p). Наиболее энергетически выгодным каналом распада оказался путь тройного удара. Результаты приведены в сравнение с более ранними работами в этой области и хорошо согласуются.

Работа выполнена в рамках гранта № 075-15-2021-597 «Происхождение и эволюция органических молекул в нашей Галактике».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Steacie E. W. R., Hatcher W. H., Horwood J. F. The Kinetics of the Decomposition of Gaseous Glyoxal //The Journal of Chemical Physics. – 1935. – Т. 3. – №. 5. – С. 291-295.

2. Calvert J. G., Layne G. S. The Photolysis of Glyoxal Vapor at Wave Length 3130 Å //Journal of the American Chemical Society. – 1953. – T. 75. – №. 4. – C. 856-859.
3. Parmenter C. S. Primary Photochemical Processes in Glyoxal at 4358 Å //The Journal of Chemical Physics. – 1964. – T. 41. – №. 3. – C. 658-665.
4. Loge G. W., Parmenter C. S. Collision-free dissociation after excitation of single rotational levels in S1 glyoxal //The Journal of Physical Chemistry. – 1981. – T. 85. – №. 12. – C. 1653-1662.
5. Osamura Y., Schaefer III H. F. Internal rotation barrier and transition state for glyoxal //The Journal of Chemical Physics. – 1981. – T. 74. – №. 8. – C. 4576-4580.
6. Osamura Y. et al. A unimolecular reaction $ABC \rightarrow A + B + C$ involving three product molecules and a single transition state. Photodissociation of glyoxal: $HCOHCO \rightarrow H_2 + CO + CO$ //The Journal of Chemical Physics. – 1981. – T. 75. – №. 12. – C. 5828-5836.
7. Koch D. M., Khieu N. H., Peslherbe G. H. Ab initio studies of the glyoxal unimolecular dissociation pathways //The Journal of Physical Chemistry A. – 2001. – T. 105. – №. 14. – C. 3598-3604.
8. Goddard J. D., Yamaguchi Y., Schaefer III H. F. Features of the H₂CO potential energy hypersurface pertinent to formaldehyde photodissociation //The Journal of Chemical Physics. – 1981. – T. 75. – №. 7. – C. 3459-3465.
9. Saito K., Kakumoto T., Murakami I. Thermal unimolecular decomposition of glyoxal //The Journal of Physical Chemistry. – 1984. – T. 88. – №. 6. – C. 1182-1187.
10. Axel D. B. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange //The Journal of chemical physics. – 1993. – T. 98. – №. 7. – C. 5648-5652.
11. Lee C., Yang W., Parr R. G. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density //Physical review B. – 1988. – T. 37. – №. 2. – C. 785.
12. Adler T. B., Knizia G., Werner H. J. A simple and efficient CCSD (T)-F12 approximation //The Journal of chemical physics. – 2007. – T. 127. – №. 22. – C. 221106.
13. Knizia G., Adler T. B., Werner H. J. Simplified CCSD (T)-F12 methods: Theory and benchmarks //The Journal of chemical physics. – 2009. – T. 130. – №. 5. – C. 054104.

14. Dunning Jr T. H. Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. I. The atoms boron through neon and hydrogen //The Journal of chemical physics. – 1989. – T. 90. – №. 2. – C. 1007-1023.
15. Zhang J., Valeev E. F. Prediction of reaction barriers and thermochemical properties with explicitly correlated coupled-cluster methods: A basis set assessment //Journal of chemical theory and computation. – 2012. – T. 8. – №. 9. – C. 3175-3186.

POTENTIAL ENERGY SURFACE OF MONOMOLECULAR DECOMPOSITION OF GLYOXAL

A.A. Kuznetsova¹, D.P. Porfiriev^{1,2}

*¹Lebedev Physical Institute, Samara Branch
(Novo-Sadovaya str., 221, Samara, Russia, 443011)*

*²Samara National Research University,
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)*

e-mail: malina-jun@yandex.ru

In this paper we present the results of quantum chemical investigation of monomolecular glyoxal decomposition pathways. We constructed the potential energy surface, including most likely reaction pathways, obtained on CCSD(T)-F12/cc-pVTZ-F12//B3LYP/6-311G(d,p). These methods provide chemical accuracy of relative energies and molecular parameters.

Keywords: conference-contest, glyoxal, monomolecular decomposition, potential energy surface, quantum chemistry.

IN VIVO ИССЛЕДОВАНИЕ ЦЕЛЬНОЙ КРОВИ ЛАБОРАТОРНЫХ ЖИВОТНЫХ, ПОДВЕРГНУТЫХ ЭКСПОЗИЦИИ ОПА-АЭРОЗОЛЯ (ПРОПИЛЕНГЛИКОЛЬ И ГЛИЦЕРИН) МЕТОДАМИ СПЕКТРОСКОПИИ КР И МИКРОСКОПИЧЕСКОГО ИМИДЖИНГА

**Е.Н. Лазарева^{1,2}, П.А. Дьяченко^{1,2}, А.Е. Положенков³,
А.М. Мыльников³, А.А. Сокова¹, А.Б. Бучарская^{1,2,3}, В.В. Тучин^{1,2,4,5}**

¹Научный медицинский центр, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г.

Чернышевского

(410012, Россия, Саратов, ул. Астраханская, д. 83)

²Лаборатория лазерной молекулярной визуализации и машины Обучение, Томский Государственный университет

(634050, Россия, Томск, ул. проспект Ленина, 36)

³Центр коллективного использования, Саратовский Государственный медицинский университет имени В.И. Разумовского

(410012 Россия Саратов, ул. Большая Казачья, 112)

⁴Лаборатория лазерной диагностики технических и живых систем, Институт проблем точной механики и управления РАН, ФИЦ «Саратовский Научный Центр Российской академии наук»

(410028, Россия, Саратов, ул. Рабочая, 24)

⁵Институт биохимии им. А.Н. Баха, ФИЦ Биотехнологии РАН (119991, Россия, Москва, ул. Ленинский проспект 33-2)

e-mail: lazarevaen@list.ru

В данной пилотной работе применен комбинированный подход методов спектроскопии КР и микроскопического имиджинга для исследования изменений оптических свойств цельной крови крыс после длительного воздействия аэрозолем со смесью глицерина и пропилен гликоля. По результатам микроскопического исследования выполнена оценка изменения размеров эритроцитов. По результатам спектроскопии КР длительное воздействие ОПА-аэрозоля на крыс приводит к увеличению интенсивности спектра КР цельной крови. В целом, полученные результаты позволяют предположить, что воздействие смеси ОПА вызывает необратимые метаболические процессы в организме животных, в частности влияет на характеристики крови и её компонентов. Воздействие глицерина и пропилен

гликоля может приводить к обезвоживанию организма, что приводит к сгущению крови и изменению формы и размеров эритроцитов.

Ключевые слова: кровь, глицерин, пропиленгликоль, спектроскопия комбинационного рассеяния, микроскопический имиджинг

1. ВВЕДЕНИЕ

Актуальной проблемой современности является замена курения табака на использование устройств с аэрозольными курительными смесями. Однако в настоящее время уже показано, что употребление аэрозолей также оказывает негативное влияние на организм человека, в частности на слизистые оболочки гортани и полости носа, центральную нервную систему, кровь, вызывает необратимые деструктивные процессы, такие как развитие онкологических и других заболеваний [1-4]. Дополнительной мотивацией к проведению исследования послужил тот факт, что основными компонентами курительных смесей являются вещества глицерин и пропилен гликоль, которые часто используются в качестве оптических просветляющих агентов с целью воздействия на биологические ткани для изменения их оптических характеристик [3, 5]. Глубокое и детальное изучение воздействия жидкостных курительных смесей на организм животных, в частности крови, позволит лучше понять, какие процессы при этом оказываются задействованными.

В данной пилотной работе использован комбинированный подход методов спектроскопии КР и микроскопического имиджинга для исследования изменений оптических свойств цельной крови крыс после длительного воздействия аэрозолем со смесью глицерина и пропилен гликоля.

2. МЕТОДЫ И МАТЕРИАЛЫ

В ходе работы были исследованы образцы цельной крови от 6 самок белых лабораторных крыс линии Вистар массой 180 ± 30 грамм, возрастом 9 месяцев. Воздействие POD-системы на крыс осуществлялось с помощью специально сконструированной установки, которая представляет собой стеклянную емкость объемом $0,003 \text{ м}^3$ с плотно закрывающейся резиновой крышкой, с двумя отверстиями: первое отверстие соответствовало диаметру отверстия POD-системы, второе отверстие соответствовало диаметру гибкой пластиковой трубки, к которой присоединялся шприц Жане. При потягивании поршня шприца Жане происходил эффект обратной тяги, таким образом, происходило нагнетание аэрозоля в ёмкость, где находились животные. Количественное содержание глицерина и пропилен гликоля в жидкости,

предназначенной для заправки POD-системы, составляло 50/50 %. Продолжительность одной ингаляции составляла 5-7 минут, общее число ингаляций – 5 с перерывами между манипуляциями 15 минут. Общее время воздействия на одно лабораторное животное составляло 25-35 минут.

Для исследования воздействия ОПА-аэрозоля до и после эксперимента делался забор цельной крови лабораторного животного из хвостовой вены. Образец крови помещался в пробирку с антикоагулянтом - ЭДТА. Затем в течение часа выполнялись микроскопические и спектральные исследования.

Микроскопические изображения крови были получены при использовании микроскопа Carl Zeiss Axiovert 200M, оснащенным объективом увеличения х64. Для микроскопического исследования и выявления морфологических изменений форменных элементов крови исследовался мазок крови на предметном стекле.

Для исследований спектров КР капли крови ($d=0.3$ мм) использовалась установка, состоящая из спектрометра (QE65000, со спектральным разрешением 10 см^{-1}), диодного лазера (785 нм, энергия лазера 400 мВт) и ручного зонда комбинационного рассеяния ($f = 7,5$ мм). Эффективный спектральный диапазон системы от 400 до 1800 см^{-1} . Каждое измерение было получено за время интегрирования 45 с.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рисунке 1 (а, б) представлены типичные микроскопические изображения цельной крови крыс до и после *in vivo* воздействия ОПА-аэрозоля. Цифровые изображения были обработаны с использованием ImageJ (National Institutes of Health, USA) для получения размеров эритроцитов и вычисления соотношения сигнал/шум (Signal-to-noise ratio - SNR). Соотношение сигнал / шум (SNR) рассчитывали в качестве отношения средней интенсивности пяти эритроцитов на изображении к средней интенсивности фона. Полученные результаты приведены на рисунке 2 (а, б).

По полученным результатам средний диаметр эритроцитов до воздействия ОПА-аэрозоля был равен 7.38 ± 0.42 мкм, а после 6.98 ± 0.66 мкм. Таким образом, размер эритроцитов в среднем уменьшился на 0.58 мкм, что составляет 5.4%. Также по полученным микроскопическим изображениям можно отметить, что воздействие ОПА-аэрозоля приводило к морфологическим изменениям, приводящим к деформации эритроцитов и увеличению их плотности на мазках отпечатках с 1200 ед./мм^2 до 3600 ед./мм^2 .

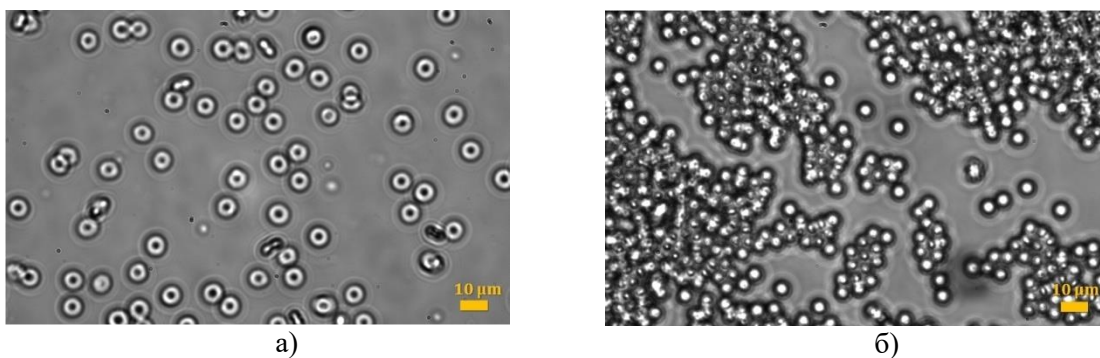


Рис. 1. Микроскопическое изображение цельной крови крысы до (а) и после (б) *in vivo* воздействия агента для одного лабораторного животного

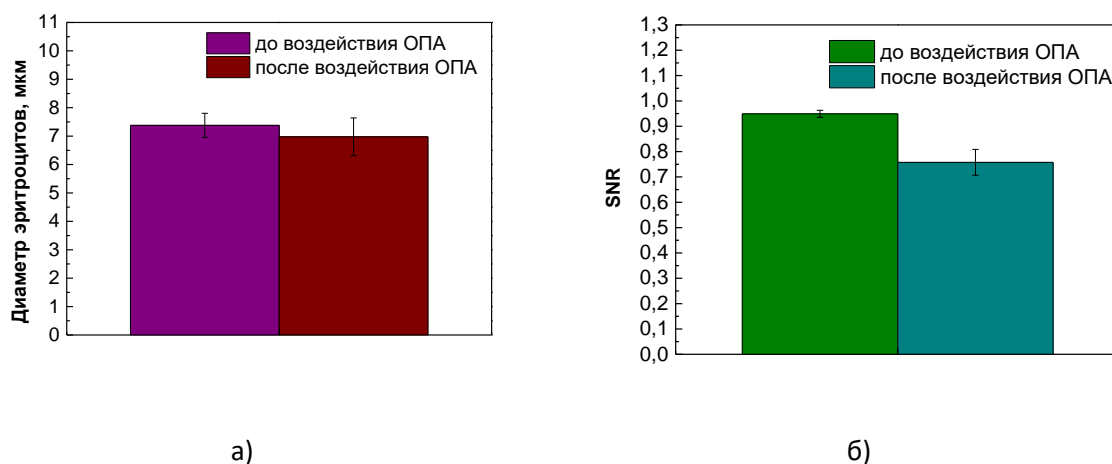


Рис. 2. Результаты анализа микроскопических изображений: а) диаметр эритроцитов до и после воздействия ОПА-аэрозоля, б) соотношение сигнал / шум (SNR) до и после воздействия ОПА-аэрозоля. (Результаты вычислений по 10 измерениям для 6 образцов)

Изменение соотношения сигнал/шум (SNR) с 0.95 ± 0.01 до 0.76 ± 0.05 за время воздействия ОПА-аэрозоля свидетельствует об изменении оптических свойств и позволяет предположить, что воздействие ОПА-аэрозоля способствовало увеличению поглощения эритроцитов.

Результаты исследований спектров КР показаны на рисунках 4 и 5, а также приведены данные усредненной интенсивности на выделенных линиях КР для отдельных биохимических компонентов в таблице 1.

По полученным результатам длительное воздействие ОПА-аэрозоля на крыс приводит к увеличению интенсивности спектра КР цельной крови. Наибольшее увеличение интенсивности наблюдается на полосах КР белковых линий 422 и 528 см^{-1} и составляет 27 и 53% соответственно. Увеличение на 40% отмечается на полосе КР 809 см^{-1} , которая соответствует таким компонентам как ДНК и Тирозин.



Рис. 3. Спектр КР цельной крови крыс до и после воздействия ОПА-аэрозоля

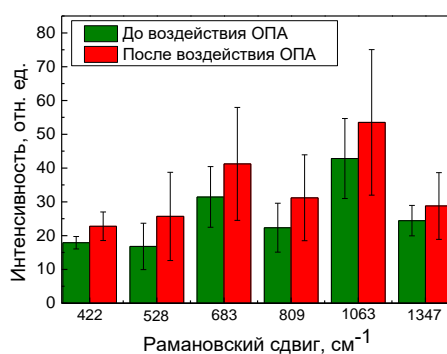


Рис. 4. Интенсивность сигнала КР цельной крови крыс на выделенных линиях КР до и после воздействия ОПА-аэрозоля

Таблица 1. Данные усредненной интенсивности на выделенных линиях КР для цельной крови крыс до и после воздействия ОПА-аэрозоля.

| Положение пика (см ⁻¹) | Компоненты | Интенсивность сигнала до воздействия ОПА (отн. ед.) | Интенсивность сигнала после воздействия ОПА (отн. ед) | $(I_{\text{до ОПА}} - I_{\text{после ОПА}}) / I_{\text{до ОПА}} * 100$ (%) |
|------------------------------------|--------------|---|---|--|
| 422 | Белки | 17.90±1.84 | 22.79±4.23 | 27 |
| 528 | Белки | 16.81±6.85 | 25.70±13.05 | 53 |
| 683 | Аминокислоты | 31.45±8.99 | 41.22±16.71 | 31 |
| 809 | ДНК, Тирозин | 22.35±7.23 | 31.20±12.70 | 40 |
| 1063 | ДНК | 42.82±11.84 | 53.50±21.53 | 25 |
| 1347 | DeoxyHb | 24.44±4.51 | 28.78±9.87 | 18 |

Незначительные изменения связаны с линией КР DeoxyHb – 18%. Полученные нами результаты позволяют предположить, что воздействие смеси ОПА вызывает необратимые метаболические процессы в организме животных, в частности влияет на характеристики крови и её компонентов. Воздействие глицерина и пропилен гликоля может приводить к обезвоживанию организма, что приводит к сгущению крови и изменению формы и размеров эритроцитов.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе впервые применены методы спектроскопии КР и микроскопического имеджинга для изучения изменения оптических и морфологических характеристик цельной крови в результате воздействия на крыс ОПА-аэрозоля. Увеличение сигнала КР и морфологические изменения эритроцитов свидетельствует о влиянии компонентов ОПА-аэрозоля на кровь и возможном их накоплении в крови, что делает необходимым продолжение исследований в направлении количественных измерений содержания самих агентов или продуктов их воздействия на кровь, а также их скорость накопления в крови.

Исследования выполнены при поддержке гранта по Постановлению Правительства Российской Федерации № 220 от 09 апреля 2010 г. (Соглашение № 075-15-2021-615 от 04.06.2021 г.)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. J. Didkowska, U. Wojciechowska, M. Manczuk, J. Lobaszewski, Lung cancer epidemiology: contemporary and future challenges worldwide. // *Ann. Transl. Med.*, 2016, v. 4, p. 150.
2. M.I. Restrepo, J.D. Chalmers, Y. Song, C. Mallow, J. Hewlett, F. Maldonado, L. Yarmus, Year in review 2016: respiratory infections, acute respiratory distress syndrome, pleural diseases, lung cancer and interventional pulmonology. // *Respirology*, 2017, v. 22, pp. 602–611.
3. V.V. Tuchin, Tissue optics and photonics: Light-tissue interaction // *Journal of Biomedical Photonics & Engineering*, 2015, v. 1, pp. 98–134.
4. E.A. Susaki, H.R. Ueda, Whole-body and Whole-Organ Clearing and Imaging Techniques with Single-Cell Resolution: Toward Organism-Level Systems Biology in Mammals. // *Cell Chem Biol.*, 2016, v. 23(1), pp. 137-157.
5. E.A. Genina, Tissue optical clearing: state of the art and prospects. // *Diagnostics*, 2022, v.12, p. 1534.

**IN VIVO STUDY OF WHOLE BLOOD OF LABORATORY ANIMALS
EXPOSED TO OPA-AEROSOL (PROPYLENE GLYCOL AND
GLYCEROL) BY METHODS OF RAMAN SPECTROSCOPY AND
MICROSCOPIC IMAGING**

E.N. Lazareva^{1,2}, P.A. Dyachenko^{1,2}, A.E. Polozhenkov³,

A.M. Mylnikov³, Sokova A.A.¹, A.B. Bucharskaya^{1,2,3}, V.V. Tuchin^{1,2,4,5}

*¹Scientific Medical Center, Saratov State University
(410012, Russia, Saratov, Astrakhanskaya st., 83)*

*²Laboratory of Laser Molecular Imaging and Machine Training, Tomsk State
University
(634050, Russia, Tomsk, Lenina st., 36)*

*³Center for Collective Use, Saratov State Medical University
(410012 Russia Saratov, st. Bolshaya Kazachya, 112)*

*⁴Laboratory for Laser Diagnostics of Technical and Living Systems, Institute of
Precision Mechanics and Control Problems of the RAS, Federal Research Center
"Saratov Scientific Center of the Russian Academy of Sciences"
(410028, Russia, Saratov, Rabochaya st., 24)*

*⁵Institute of Biochemistry named after A.N. Bach, FRC Biotechnology RAS
(119991, Russia, Moscow, Leninsky prospect 33-2)
e-mail: lazarevaen@list.ru*

In this pilot study, a combined Raman spectroscopy and microscopic imaging approach was used to study changes in the optical properties of rat whole blood after prolonged exposure to an aerosol with a mixture of glycerol and propylene glycol. Based on the results of microscopic examination, an assessment was made of changes in the size of erythrocytes. According to the results of Raman spectroscopy, prolonged exposure to optical clearing agents (OPA) aerosol in rats leads to an increase in the intensity of the Raman spectrum of whole blood. In general, the obtained results suggest that the effect of the OPA mixture causes irreversible metabolic processes in the animal body, in particular, affects the characteristics of blood and its components. Exposure to glycerin and propylene glycol can lead to dehydration, which leads to blood clotting and changes in the shape and size of red blood cells.

Keywords: blood, glycerol, propylene glycol, Raman spectroscopy, microscopic imaging

МЮОННЫЙ ЛЭМБОВСКИЙ СДВИГ В ТРЕХЧАСТИЧНЫХ МЮОН-ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМАХ В КВАНТОВОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИКЕ

Ф. А. Мартыненко¹

¹*Самарский национальный исследовательский университет имени*

академика С. П. Королева,

(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)

e-mail: f.a.martynenko@gmail.com

Мюонный лэмбовский сдвиг 2P-2S в мюон-электронных атомах гелия и ионах лития, бериллия и бора с электроном в основном состоянии вычислен по теории возмущений по постоянной тонкой структуре и отношению масс электрона и мюона. Учтены поправки первого и второго порядков теории возмущений на поляризацию вакуума, структуру ядра и отдачу.

Ключевые слова: мюонные атомы, лэмбовский сдвиг, квантовая электродинамика.

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование уровней энергии трехчастичных кулоновских систем представляет собой одну из фундаментальных проблем атомной физики, которая имеет практическое применение при изучении реакций мюонного катализа. Спектр энергии трехчастичных систем мюон-электрон-ядро изучается в ряде экспериментов наряду с двухчастичными мюонными атомами [1-3]. Так, например, новые планы J-PARC MUSE [4] связаны с измерением сверхтонкой структуры (СТС) основного состояния мюонного гелия с точностью на два порядка, превосходящей точность предыдущих экспериментов 1980-х годов [5]. При расчете спектра энергий в системах мюон-электрон-ядро используют два метода. Один из них – вариационный метод [6-7]. Другой, используемый в данной работе, аналитический метод расчета [8] основан на методе теории возмущений (ТВ) по двум малым параметрам: постоянной тонкой структуры α и отношению масс электрона и мюона. В эксперименте по измерению зарядового радиуса α -частицы [2] пучок мюонов пропускался через камеру с гелием при низком давлении 2 мбар. Условия эксперимента таковы, что образующийся газ ионов гелия не нейтрализуется. Вместе с тем отдельные атомы нейтрального мюонного гелия могут присутствовать и вносить погрешность в результаты измерения лэмбовского сдвига. Прецизионный расчет спектра энергии двухчастичных мюонных ионов выполнен в [9-10]. В данной работе мы продолжаем

исследования [11-12] уровней энергии мюон-электронных атомов и ионов гелия, лития, бериллия и бора в части, относящейся к мюонному лэмбовскому сдвигу.

2. МЕТОД РАСЧЕТА

Для расчета уровней энергии методом аналитической ТВ разобьем гамильтониан системы на несколько частей, выделив основной вклад кулоновского взаимодействия H_0 [8-10]:

$$H = H_0 + \Delta H + \Delta H_{rec} + \Delta H_{vp} + \Delta H_{str}, \quad (1)$$

$$H_0 = -\frac{1}{2M_\mu} \nabla_\mu^2 - \frac{1}{2M_e} \nabla_e^2 - \frac{Z\alpha}{x_\mu} - \frac{(Z-1)\alpha}{x_e}, \quad (2)$$

$$\Delta H = \frac{\alpha}{|x_\mu - x_e|} - \frac{\alpha}{x_e}, \quad \Delta H_{rec} = -\frac{1}{M} \nabla_\mu \nabla_e, \quad (3)$$

где x_μ и x_e - радиусы-векторы мюона и электрона относительно ядра, Ze - заряд ядра. Слагаемые ΔH_{vp} и ΔH_{str} , обозначают вклады на поляризацию вакуума и структуру ядра. Приведенные массы в подсистемах электрон-ядро, мюон-ядро равны:

$$M_e = \frac{m_e M}{m_e + M}, \quad M_\mu = \frac{m_\mu M}{m_\mu + M}. \quad (4)$$

В исходном приближении, которое определяется гамильтонианом H_0 , волновая функция трехчастичной системы имеет вид произведения кулоновских волновых функций мюона и электрона:

$$\Psi_{2S}(x_\mu, x_e) = \Psi_{\mu 2S}(x_\mu) \Psi_{e 1S}(x_e) = \frac{(W_\mu)^{\frac{3}{2}}}{2\sqrt{2\pi}} \left(1 - \frac{W_\mu x_\mu}{2}\right) e^{-\frac{W_\mu x_\mu}{2}} \frac{(W_e)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} e^{-W_e x_e}, \quad (5)$$

$$\Psi_{2P}(x_\mu, x_e) = \Psi_{\mu 2P}(x_\mu) \Psi_{e 1S}(x_e) = \frac{(W_\mu)^{\frac{3}{2}}}{2\sqrt{6}} W_\mu x_\mu e^{-\frac{W_\mu x_\mu}{2}} (\boldsymbol{\varepsilon}_\mu \mathbf{n}_\mu) \frac{(W_e)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} e^{-W_e x_e}, \quad (6)$$

$$W_\mu = Z\alpha M_\mu, \quad W_e = (Z-1)\alpha M_e, \quad (7)$$

что делает возможным прецизионный расчет поправок по ТВ.

В исходном приближении энергия трехчастичной системы определяется суммой кулоновских энергий электрона в основном состоянии и мюона в возбужденном (2S или 2P):

$$E_{2S} = E_{2P} = -\frac{1}{2} M_e ((Z-1)\alpha)^2 - \frac{1}{8} M_\mu (Z\alpha)^2. \quad (8)$$

При исследовании лэмбовского сдвига ($E_{2P} - E_{2S}$) эти вклады сокращаются. В первом порядке теории возмущений кулоновское взаимодействие ΔH дает вклад в сдвиги уровней энергии, которые определяются матричными элементами (в разложении по a_1):

$$\Delta E_{2S}^{(1)} = \langle \Psi_{2S} \left| \frac{\alpha}{|\mathbf{x}_\mu - \mathbf{x}_e|} - \frac{\alpha}{x_e} \right| \Psi_{2S} \rangle = W_e \alpha (-28a_1^2 + 220a_1^3 - 1152a_1^4 + \dots), \quad (9)$$

$$\Delta E_{2P}^{(1)} = \langle \Psi_{2P} \left| \frac{\alpha}{|\mathbf{x}_\mu - \mathbf{x}_e|} - \frac{\alpha}{x_e} \right| \Psi_{2P} \rangle = W_e \alpha (-20a_1^2 + 140a_1^3 - 672a_1^4 + \dots), \quad (10)$$

$$\Delta E_{\mu LS}^{(1)} = W_e \alpha \frac{8a_1^2}{(1 + 2a_1)^5}, \quad a_1 = \frac{W_e}{W_\mu} \quad (11)$$

Общее выражение поправки к уровням энергии во втором порядке ТВ по взаимодействию ΔH имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta E_{2S}^{(2)}(n = 2S) = & \int d\mathbf{x}_\mu d\mathbf{x}'_\mu d\mathbf{x}_e d\mathbf{x}'_e \Psi_{\mu 2S}^*(\mathbf{x}_\mu) \Psi_{e 1S}^*(\mathbf{x}_e) \left(\frac{\alpha}{|\mathbf{x}_\mu - \mathbf{x}_e|} - \frac{\alpha}{x_e} \right) \\ & \sum_n \Psi_{\mu n}(\mathbf{x}_\mu) \Psi_{\mu n}^*(\mathbf{x}'_\mu) \sum_{n'} \frac{\Psi_{en'}(\mathbf{x}_e) \Psi_{en'}^*(\mathbf{x}'_e)}{E_{\mu 2S} + E_{e 1S} - E_{\mu n} - E'_{en}} \\ & \left(\frac{\alpha}{|\mathbf{x}'_\mu - \mathbf{x}'_e|} - \frac{\alpha}{x'_e} \right) \Psi_{\mu 2S}(\mathbf{x}'_\mu) \Psi_{e 1S}(\mathbf{x}'_e). \end{aligned} \quad (12)$$

В случае мюона в промежуточном состоянии $n = 2S$ имеем:

$$\begin{aligned} \Delta E_{2S}^{(2)}(n = 2S) = & \int |\Psi_{\mu 2S}(\mathbf{x}_\mu)|^2 \Psi_{e 1S}(\mathbf{x}_e) \left(\frac{\alpha}{|\mathbf{x}_\mu - \mathbf{x}_e|} - \frac{\alpha}{x_e} \right) \tilde{G}_{e 1S}(\mathbf{x}_e, \mathbf{x}'_e) \times \\ & \left(\frac{\alpha}{|\mathbf{x}'_\mu - \mathbf{x}'_e|} - \frac{\alpha}{x'_e} \right) |\Psi_{\mu 2S}(\mathbf{x}'_\mu)|^2 \Psi_{e 1S}(\mathbf{x}'_e) d\mathbf{x}_\mu d\mathbf{x}'_\mu d\mathbf{x}_e d\mathbf{x}'_e, \end{aligned} \quad (13)$$

где $\tilde{G}_{e 1S}(\mathbf{x}_e, \mathbf{x}'_e)$ - редуцированная кулоновская функция Грина электрона для состояния 1S. В (13) входят два одинаковых интеграла, которые вычисляются аналитически:

$$\begin{aligned} I(x_e) = & \int d\mathbf{x}_\mu |\Psi_{\mu 2S}(x_\mu)|^2 \left(\frac{\alpha}{|\mathbf{x}_\mu - \mathbf{x}_e|} - \frac{\alpha}{x_e} \right) \\ & = -\frac{\alpha e^{-W_\mu x_e}}{8x_e} \left(8 + 6W_\mu x_e + 2(W_\mu x_e)^2 + (W_\mu x_e)^3 \right). \end{aligned} \quad (14)$$

Используя (14) и явный вид $\tilde{G}_{e 1S}(\mathbf{x}_e, \mathbf{x}'_e)$ [11-12] после аналитического интегрирования и разложения по a_1 получим:

$$\Delta E_{2S}^{(2)}(n = 2S) = -M_e \alpha^2 a_1^3 \left[\frac{5993}{64} + a_1 \left(-\frac{24111}{64} - 784 \ln 4a_1 \right) + \dots \right], \quad (15)$$

$$\Delta E_{2P}^{(2)}(n = 2S) = -M_e \alpha^2 a_1^3 \left[\frac{31329}{576} + a_1 \left(-\frac{26965}{192} - 400 \ln 4a_1 \right) + \dots \right]. \quad (16)$$

Вторая часть суммы по n в (12) включает в себя все промежуточные состояния мюона, не совпадающие с 2S. В этом случае кулоновскую функцию Грина электрона приближенно можно заменить на свободную:

$$\sum_{n'} \frac{\Psi_{en'}(\mathbf{x}_e) \Psi_{en'}^*(\mathbf{x}'_e)}{E_{\mu 2S} + E_{e 1S} - E_{\mu n} - E'_{en}} \approx -\frac{M_e e^{-b_n |\mathbf{x}_e - \mathbf{x}'_e|}}{2\pi |\mathbf{x}_e - \mathbf{x}'_e|}, \quad b_n = \sqrt{2M_e (E_{\mu n} - E_{\mu 2S} - E_{e 1S})} \quad (17)$$

Это приближение можно улучшить, используя ряд ТВ для функции Грина электрона как в [12]. Интегрирование с функцией Грина принимает вид:

$$J = \int d\mathbf{x}_e \Psi_{e1S}(x_e) \frac{1}{|\mathbf{x}_\mu - \mathbf{x}_e|} \frac{e^{-b_n|x_e - x'_e|}}{|\mathbf{x}_e - \mathbf{x}'_e|} = \quad (18)$$

$$4\pi\Psi_{e1S}(0) \frac{1}{b_n^2} \frac{1 - e^{-b_n|x_\mu - x'_\mu|}}{|\mathbf{x}_\mu - \mathbf{x}'_\mu|} = 4\pi\Psi_{e1S}(0) \left[\frac{1}{b_n} - \frac{|\mathbf{x}_\mu - \mathbf{x}'_\mu|}{2} + \frac{b_n|\mathbf{x}_\mu - \mathbf{x}'_\mu|^2}{6} + \dots \right],$$

где использовано разложение по параметру $b_n \sim \sqrt{a_1}$. Вклад первого слагаемого в квадратных скобках равен 0 из-за ортогональности волновых функций мюона, а второе слагаемое дает вклад лидирующего порядка по a_1 .

Интегрирование по координатам мюона можно выполнить с помощью условия полноты:

$$\sum_{n \neq 2S} \Psi_{\mu n}(x_\mu) \Psi_{\mu n}^*(x'_\mu) = (\delta(\mathbf{x}_\mu - \mathbf{x}'_\mu) - \Psi_{\mu 2S}(x_\mu) \Psi_{\mu 2S}^*(x'_\mu)). \quad (19)$$

После вычисления интегралов по мюонным координатам получим:

$$\Delta E_{2S}^{(2)}(n \neq 2S) = M_e \alpha^2 a_1^2 \left(-56 + \frac{20073}{64} a_1 + \frac{137165}{128} a_1^2 + \dots \right), \quad (20)$$

$$\Delta E_{2P}^{(2)}(n \neq 2P) = M_e \alpha^2 a_1^2 \left(-40 + \frac{12441}{64} a_1 + \frac{76997}{128} a_1^2 + \dots \right). \quad (21)$$

Суммарный вклад кулоновского взаимодействия ΔH в первом и втором порядках ТВ имеет вид:

$$\Delta E_{\mu LS}^{\Delta H} = W_e \alpha a_1^2 \left(-8 - 80a_1 + 480a_1^2 + \frac{16}{Z-1} - \frac{80}{Z-1} a_1 - \frac{11221}{48(Z-1)} a_1^2 - \frac{384}{Z-1} a_1^2 \ln 4a_1 \right). \quad (22)$$

Суммарный численный вклад кулоновского взаимодействия ΔH в первом и втором порядках ТВ (22) представлен в таблице 1.

3. ЭФФЕКТЫ ПОЛЯРИЗАЦИИ ВАКУУМА И СТРУКТУРЫ ЯДРА

Эффекты электронной поляризации вакуума и структуры ядра являются определяющими при расчете мюонного лэмбовского сдвига в двухчастичных мюонных ионах, как было показано в [9]. Потенциал кулоновского взаимодействия с учетом эффектов поляризации вакуума имеет вид:

$$\Delta V_{vp}^c(x) = \frac{\alpha}{3\pi} \int_1^\infty d\xi \rho(\xi) \left(-\frac{Z\alpha}{x} \right) e^{-2m_e \xi x}, \quad \rho(\xi) = \frac{\sqrt{\xi^2 - 1}(2\xi^2 + 1)}{\xi^4}. \quad (23)$$

Потенциал (23) дает вклады во взаимодействии каждой пары частиц в первом и втором порядках ТВ. В первом порядке ТВ лидирующий по a_1 вклад возникает в мюон – ядерном взаимодействии и имеет вид:

$$\Delta E_{\mu LS}^{(1)\mu-N vp} = \frac{W_e Z \alpha^2}{18a_1^2 \pi (4a_2^2 - 1)^2} \times \quad (24)$$

$$\left(\sqrt{4a_2^2 - 1(1 - 26a_2^2 + 352a_2^4 - 768a_2^6 + 48a_2^3\pi - 384a_2^5\pi + 768a_2^7\pi)} - 24a_2^4(15 - 80a_2^2 + 128a_2^4) \operatorname{arcsec} 2a_2 \right)$$

Вклады (23) во взаимодействии электрон – мюон и электрон – ядро:

$$\Delta E_{\mu LS}^{(1)\mu-e vp} = \frac{W_e \alpha^2 a_1^2 (Z - 8)}{30a_2^2 \pi}, \quad \Delta E_{\mu LS}^{(1)e-N vp} = 0. \quad (25)$$

Во втором порядке ТВ вклад эффектов поляризации вакуума определяется матричными элементами, аналогичными (12). Численно вклады оказываются подавленными дополнительными степенями α и a_1 . Суммарный численный вклад эффектов поляризации вакуума в первом и втором порядках ТВ представлен в таблице 1.

Вклад эффектов структуры ядра также важен для точного расчета мюонного лэмбовского сдвига. Они определяются потенциалами:

$$\Delta V_{str}(\mathbf{x}) = \frac{2}{3} \pi Z \alpha r_N^2 \delta(\mathbf{x}) \quad (26)$$

$$\Delta V_{str+vp}(\mathbf{x}) = \frac{2}{3} \pi Z \alpha r_N^2 \frac{\alpha}{3\pi} \int_1^\infty d\xi \rho(\xi) \left(\delta(\mathbf{x}) - \frac{m_e^2 \xi^2}{\pi} e^{-2m_e \xi x} \right). \quad (27)$$

Вклад $\Delta V_{str}(\mathbf{x})$ в электрон – ядерном взаимодействии в первом порядке ТВ равен 0. Вклад (26) в мюон – ядерном взаимодействии имеет вид:

$$\Delta E_{\mu LS}^{(1)\mu-N str} = -\frac{1}{12} Z \alpha r_N^2 W_\mu^3. \quad (28)$$

Вклады (27) в первом порядке ТВ в интегральном виде равны:

$$\Delta E_{\mu LS}^{(1)\mu-N str+vp} = \frac{Z \alpha^2 r_N^2 W_\mu^3}{72\pi} \int_1^\infty d\xi \rho(\xi) \frac{2 + 8a_3 \xi + 8a_3^3 \xi^3 + a_3^2 \xi (2 + 11\xi)}{(1 + a_3 \xi)^4} \quad (29)$$

$$\Delta E_{\mu LS}^{(1)e-N str+vp} = \frac{2Z \alpha^2 r_N^2 a_1^2 W_e^3}{9\pi} \int_1^\infty d\xi \rho(\xi) \frac{\xi(-2 + \xi)}{(2 + a_3 \xi)^2}, \quad a_3 = \frac{2m_e}{W_e} \quad (30)$$

Численные оценки (24), (28), (29) полностью согласуются с вычислениями лэмбовского сдвига в двухчастичных мюонных ионах [9]. Суммарный вклад на структуру ядра в 1-2 порядках ТВ представлен в таблице 1.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Измерение лэмбовского сдвига в двухчастичных мюонных атомах и ионах, выполненное коллаборацией CREMA [1-2], позволило получить на порядок более точные значения зарядовых радиусов протона, дейтрона и альфа-частицы. Сделать это удалось после прецизионных расчетов лэмбовского сдвига, которые включали эффекты поляризации вакуума, структуры ядра, релятивистские поправки и эффекты смешанного типа

высокого порядка по α и отношению масс частиц [9-10]. В данной работе исследуется влияние электрона на величину мюонного лэмбовского сдвига в трехчастичных системах мюон-электрон-ядро. Присутствие электрона приводит к дополнительному кулоновскому взаимодействию с мюоном и ядром как в первом, так и во втором порядках ТВ, дополнительным поправкам к мюон – электронному и электрон – ядерному взаимодействию и изменяет величину лэмбовского сдвига по сравнению с двухчастичными системами. Численные значения всех поправок для различных мюон-электронных систем представлены в таблице 1.

Таблица 1. Численные значения вкладов в мюонный лэмбовский сдвиг в мюон – электронных атомах гелия и ионах лития, бериллия и бора (в мэВ).

| Вклад в мюонный лэмбовский сдвиг | $(\mu e \text{ } ^3_2\text{He})$ | $(\mu e \text{ } ^4_2\text{He})$ | $(\mu e \text{ } ^7_3\text{Li})^+$ | $(\mu e \text{ } ^9_4\text{Be})^{2+}$ | $(\mu e \text{ } ^{11}_5\text{B})^{3+}$ |
|----------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|------------------------------------|---------------------------------------|---|
| Вклад ΔH | 4.0431 | 3.9723 | 9.1240 | 14.2650 | 19.3274 |
| Вклад ΔH_{vp} | 1641.8906 | 1665.7771 | 4682.3995 | 9255.8166 | 15375.4285 |
| Вклад ΔH_{str} | -398.8559 | -297.5805 | -3326.0741 | -11295.8562 | -25346.9423 |
| Вклад ΔH_{rec} | -0.0002 | -0.0002 | -0.0024 | -0.0084 | -0.0210 |
| Суммарный вклад | 1247.0776 | 1372.1687 | 1365.4470 | -2025.7830 | -9952.2074 |

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Antognini A., Kottmann F., Pohl R. Laser spectroscopy of light muonic atoms and the nuclear charge radii //SciPost Physics Proceedings. – 2021. – №. 5. – С. 021.
2. Krauth J. J. et al. Measuring the α -particle charge radius with muonic helium-4 ions //Nature. – 2021. – Т. 589. – №. 7843. – С. 527–531.

3. Schmidt S. et al. The next generation of laser spectroscopy experiments using light muonic atoms //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2018. – T. 1138. – №. 1. – C. 012010.
4. Fukumura S. et al. Proposal for new measurements of muonic helium hyperfine structure at J-PARC //EPJ Web of Conferences. – EDP Sciences, 2022. – T. 262. – C. 01012.
5. Gardner C. J. et al. Precise measurement of the hyperfine-structure interval and Zeeman effect in the muonic helium atom //Physical Review Letters. – 1982. – T. 48. – №. 17. – C. 1168.
6. Eskin A. V. et al. Energy levels of three particle muonic ions (μeLi), (μeBe), (μeB) //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2020. – T. 1690. – №. 1. – C. 012092.
7. Aznabayev D. T., Bekbaev A. K., Korobov V. I. The Hyperfine Structure of the Ground State in the Muonic Helium Atoms //Physics of Particles and Nuclei Letters. – 2018. – T. 15. – №. 3. – C. 236-239.
8. Lakdawala S. D., Mohr P. J. Hyperfine structure in muonic helium //Physical Review A. – 1980. – T. 22. – №. 4. – C. 1572.
9. Krutov A. A. et al. Lamb shift in muonic ions of lithium, beryllium, and boron //Physical Review A. – 2016. – T. 94. – №. 6. – C. 062505.
10. Krutov A. A. et al. Theory of the Lamb shift in muonic helium ions //Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 2015. – T. 120. – №. 1.–C. 73-90.
11. Dorokhov A. E. et al. Low-lying electron energy levels in three-particle electron-muon ions of Li, Be, and B //Physical Review A. – 2021. – T. 103. – №. 5. – C. 052806.
12. Faustov R. N. et al. Ground-state hyperfine structure of light muon-electron ions //Physical Review A. – 2022. – T. 105. – №. 4. – C. 042816.

MUONIC LAMB SHIFT IN THREE – PARTICLE MUON – ELECTRONIC SYSTEMS IN QUANTUM ELECTRODYNAMICS

F. A. Martynenko¹

*¹Samara National Research University,
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)
e-mail: f.a.martynenko@gmail.com*

The muonic lamb shift of three – particle muon – electronic helium atoms and ions of lithium, beryllium, and boron with electron in the ground state is calculated in the framework of perturbation theory on fine structure constant and muon – electron mass ratio. The corrections of vacuum polarization, nuclear structure and recoil in first and second orders of perturbation theory are calculated.

Keywords: muonic atoms, Lamb shift, quantum electrodynamics.

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕХАНИЗМЫ ЛАЗЕРНОЙ ТЕРАПИИ КИСТ

С.Н. Мокрин^{1,2}, А.В. Кулик^{1,2}, Д.А. Терешко¹, С.С. Минаев^{1,3},
В.М. Чудновский¹

¹*Институт прикладной математики ДВО РАН,
(690041, г. Владивосток, ул. Радио, 7)*

²*Дальневосточный федеральный университет
(690922, г. Владивосток, о. Русский, пос. Аякс, 10)*

³*Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН
(119991, г. Москва, ул. Ленинский проспект, 53)*

e-mail: msn_primat@mail.ru

В работе исследован физический механизм формирования и распространения лазероиндуцированной затопленной струи внутри кюветы, имитирующей кисту. На основании результатов эксперимента была предложена математическая модель распространения нагретой струи внутри замкнутого объема. Результаты численного моделирования позволяют оценить характерные времена нагрева внутренней полости кюветы до температуры коагуляции белков, из которых состоит внутренняя поверхность кист.

Ключевые слова: лазерное излучение, затопленная струя, кипение, теплоперенос.

1. ВВЕДЕНИЕ

В медицине и технике достаточно часто возникает необходимость селективного разогрева замкнутых оболочек полостей, заполненных жидкостью. При этом ставится задача о нагреве оболочки, в то время как температура жидкости, заполняющей объём полости, в процессе нагрева должна изменяться незначительно. Подобная ситуация распространена в хирургии, когда тепло используется, например, для лечения кист и сосудистых аномалий [1]. Кисты – это патологические образования, имеющие стенку (замкнутую оболочку) и наполненные жидкостью. Для устранения кисты необходимо разогреть только эпителиальную выстилку оболочки кисты. Если при нагреве кисты нагреется весь объём жидкости, содержащийся в кисте, то с большой вероятностью возникнет ожог окружающих тканей и повреждение близлежащих анатомических структур. В технических приложениях нежелательный нагрев окружающей жидкой среды может возникнуть при

проведении лазерной очистки поверхностей, когда одновременно необходимо провести санацию и стерилизацию этих поверхностей [2].

В данной работе для решения сформулированной проблемы мы предлагаем использовать разогретые затопленные струи, генерируемые в заполненной жидкостью полости при кавитации, индуцированной лазерным нагревом жидкости в окрестности кончика оптоволокну, введённого в полость. Затопленные струи широко применяются в технике, микробиологии, медицине, биотехнологиях и др. [3 - 8]. Однако струи, нагретые до температуры близкой к температуре насыщения, генерируются только при кавитации, возникающей при недогретом до температуры насыщения вскипании жидкости [9 -11]. Кипение с недогревом – это кипение, локализованное в окрестности сосредоточенного разогретого нагревательного элемента, погружённого в окружающую относительно «холодную» жидкость [12]. Разогретые кумулятивные затопленные струи, генерируемые при кипении с недогревом, с большой скоростью распространяются от поверхности нагревательного элемента вглубь жидкости [9 - 11]. Эти струи, проходя сквозь «холодную» окружающую жидкость, будут сталкиваться с оболочкой и растекаться вдоль её поверхности, передавая оболочке свое тепло. Поскольку скорость движения струи достаточно высока, а масса струи мала, количество тепла, передаваемого в окружающую среду в сравнении с разогревом оболочки должно быть незначительным. Таким образом, предложенный способ можно использовать для селективного разогрева замкнутых оболочек, заполненных жидкостью.

2. ОПИСАНИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ

Для проверки данного предположения эксперименты по инициации кипения с недогревом были проведены в воде в замкнутой кювете с использованием установки, описанной в работе [13]. Затопленные струи генерировались в окрестности сосредоточенного нагревательного элемента, представляющего собой кончик оптоволокну, по которому распространяется лазерное излучение. Конверсия лазерного излучения в тепло приводила к нарастанию и последующему схлопыванию парового пузырька, который в процессе коллапса в окрестности торца оптоволокну генерировал кумулятивную нагретую затопленную струю [9 – 11, 13]. Поскольку непосредственное количественное измерение температуры оболочки кюветы в эксперименте было сопряжено с техническими трудностями, было проведено численное исследование процесса, которое дополнило

качественный характер экспериментальных данных. При моделировании распределения тепла в жидкости, заполняющей кювету, используется система уравнений Навье-Стокса с учётом плавучести совместно с уравнением теплопроводности [14]. Начально-краевая задача данной модели решалась методом конечных элементов при помощи свободно распространяемого программного пакета FreeFEM. Все параметры жидкости соответствовали воде. Температура воды на границе теплового источника соответствует температуре кипения (насыщения) воды при нормальном атмосферном давлении 100 °С.

В эксперименте лазерное излучение подавалось в замкнутую кювету с водой по оптоволокну таким образом, что кварцевый кончик оптоволокну диаметром 600 μm , в окрестности которого происходило вскипание воды, располагался в центре кюветы диаметром 26 mm. Паровой пузырёк нарастал и схлопывался в результате разогрева торца оптоволокну, покрытого тонким слоем оксида двухвалентного железа FeO, в котором излучение практически полностью поглощалось. На поверхности торца, покрытого слоем поглощающего излучение вещества, развивается поверхностное вскипание воды не зависящее от длины волны лазерного излучения [13]. Коллапс пузырька приводил к возникновению нагретых затопленных струй.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты исследований представлены на рисунке 1(а) и рисунке 2(а). На рисунке 1(а) показано распространение струи нагретой жидкости, вызванное силой плавучести в режиме свободной конвекции. Нагретая жидкость визуально определяется «на просвет» из-за различия коэффициентов преломления в нагретой и не нагретой жидкости. Конвекция наблюдается при мощности лазерного излучения 0.5 Вт. При повышении мощности лазерного излучения до 3 Вт вода в окрестности торца оптоволокну вскипает, что сопровождается возникновением затопленной нагретой струи, распространяющейся от торца оптоволокну к стенке кюветы (рисунок 2(а)). Затопленная струя движется к стенке кюветы, сталкивается и растекается вдоль внутренней границы стенки (оболочки) кюветы.

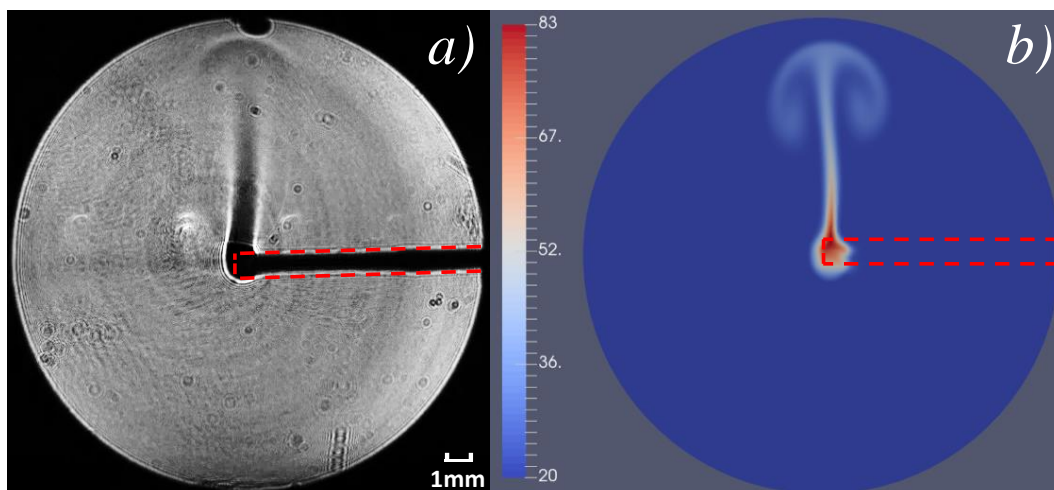


Рис. 1. Распространение струи нагретой жидкости, вызванное силой плавучести в режиме свободной конвекции. Мощность лазерного излучения 0.5 Вт. Диаметр оптоволоконна 600 мкм. а) распространение нагретой жидкости, вызванное силой плавучести (эксперимент), б) поле температур, полученное в результате численного моделирования. Красной пунктирной линией выделено оптоволоконно.

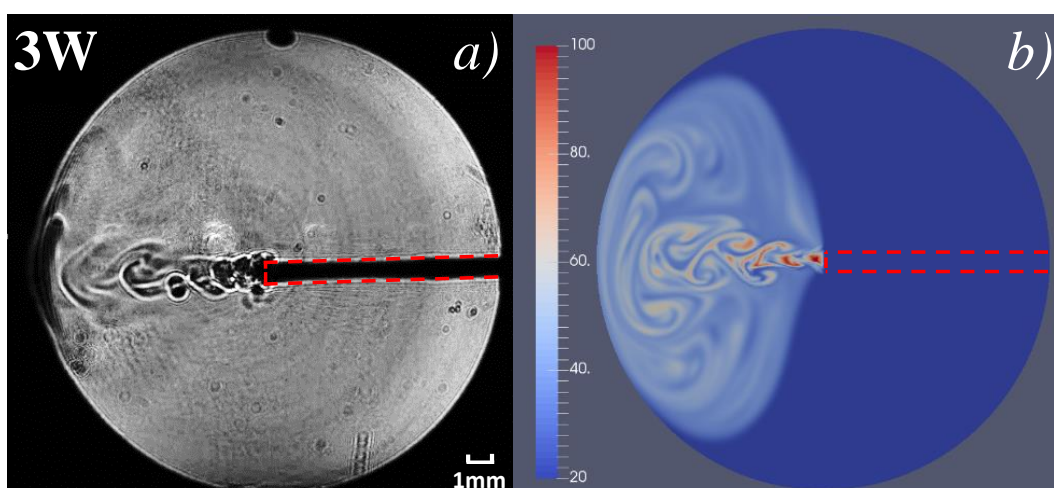


Рис. 2. Распространение нагретой жидкости при кипении с недогревом инициированного на торце оптоволоконна. Мощность лазерного излучения 3 Вт. Диаметр оптоволоконна 600 мкм. а) нагретая затопленная струя, распространяющаяся от торца оптоволоконна к стенке кюветы (эксперимент), б) поле температур, полученное в результате численного моделирования. Красной пунктирной линией выделено оптоволоконно.

На рисунках 1(б) и 2(б) показано поле температур, рассчитанное для свободной конвекции и для режима с образованием нагретой затопленной струи в сравнении с экспериментом.

На рисунке 3 показаны профили температуры внутренней границы замкнутой оболочки, размерами и формой совпадающей с экспериментальной кюветой, рассчитанные для кисты молочной железы, оболочку которой образует жировая ткань. В начальный момент температура среды соответствует физиологической температуре $37\text{ }^{\circ}\text{C}$. Результаты численного моделирования, полученные для различных значений мощности лазерного излучения в различные моменты времени лазерного нагрева от момента включения лазерного генератора, показывают, что стенка кисты достаточно быстро разогревается до температуры $70\text{ }^{\circ}\text{C}$, при которой происходит необратимая денатурация основных белков, входящие в состав интимы стенки кисты. Термомодификация ткани стенки кисты приводит к её последующему замещению фиброзной тканью. Асимметрия рисунка 3 возникает вследствие учёта в расчётах плавучести для нагретой жидкости и полностью соответствует экспериментальным данным, тогда как область «тени» в правой части рисунка возникает в результате двумерного приближения в расчётах и не соответствует реальной трёхмерной картине.

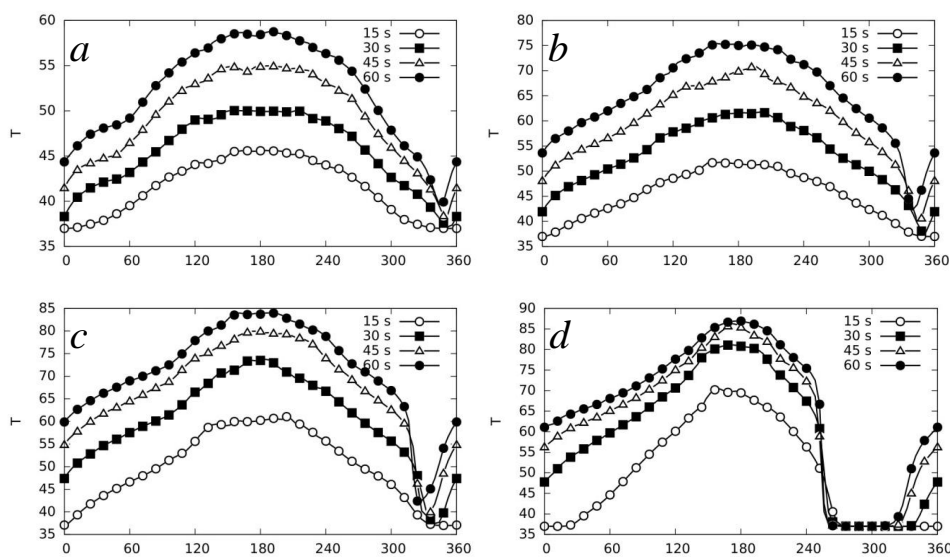


Рис. 3. Рассчитанный методом компьютерного моделирования профиль температуры, образованный вдоль границы области, размеры которой соответствуют размерам экспериментальной кюветы, в условиях, когда температура окружающей жидкости и коэффициент теплоотдачи на границе равны $37\text{ }^{\circ}\text{C}$ и $400\text{ Вт}/(\text{м}^2\text{ К})$, соответственно. Расчёты проведены для различных мощностей лазерного излучения: а) $1,5\text{ Вт}$, б) 3 Вт , в) 5 Вт , д) 7 Вт . Показаны значения температуры через 15; 30; 45; и 60 секунд от момента включения лазерного генератора. По оси абсцисс отложен угол в градусах, где 0° и 180° соответствуют оси оптоволокон. Центр - 180° соответствует торцу оптоволокон.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, нагретые затопленные струи переносят тепло от торца лазерного оптоволокна к стенкам замкнутой оболочки через окружающую жидкость, имеющую значительно более низкую температуру в сравнении с температурой струи. При столкновении с оболочкой нагретая жидкость растекается по её внутренней поверхности и, как показывают результаты численного моделирования, достаточно быстро и эффективно передаёт тепло к стенке кюветы. В зависимости от мощности излучения, менее чем за одну минуту лазерного нагрева температура стенки замкнутой оболочки с диаметром полости 26 мм на фронте струи повышается до температуры достаточной для санации поверхности и тепловой деградации патологических образований, содержащих жидкость.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №22-19-00189).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. M.F. Marqa, S. Mordon, N. Betrouni, Laser interstitial thermotherapy of small breast fibroadenomas: Numerical simulations. // *Lasers Surg. Med.*, 2012, v. 44 (10), p. 832–839.
2. C.D. Ohl, M. Arora, R. Dijkink, V. Janve, D. Lohse, Surface cleaning from laser-induced cavitation bubbles. // *Appl. Phys. Lett.*, 2006. v. 89(7), 074102.
3. M. Koch, J.M. Rossello, C. Lechner, W. Lauterborn, R. Mettin, Dynamics of a Laser-Induced Bubble above the Flat Top of a Solid Cylinder—Mushroom-Shaped Bubbles and the Fast Jet. // *Fluids*, 2022, v. 7, 2.
4. E. Kadivar, O. el Moctar, R. Skoda, U. Loschner, Experimental study of the control of cavitation-induced erosion created by collapse of single bubbles using a micro structured riblet. // *Wear* 2021, v. 486–487, 204087.
5. R. Dijkink, S. Le Gac, E. Nijhuis, A. van den Berg, I. Vermes, A. Poot, C.-D. Ohl, Controlled cavitation–cell interaction: trans-membrane transport and viability studies. // *Phys. Med. Biol.*, 2007 v. 53, p. 375–390.
6. L. Oyarte Gálvez, A. Fraters, H.L. Offerhaus, M. Versluis, I.W. Hunter, D. Fernández Rivas, Microfluidics control the ballistic energy of thermocavitation liquid jets for needle-free injections. // *J. Appl. Phys.*, 2020. v. 127, 104901
7. S. Afanador-Delgado, V. Marañón-Ruíz, R. Sevilla-Escoboza, R. Chiu. Synthesis of SiO₂ nanoparticles assisted by thermocavitation in natural dye (*Hibiscus sabdariffa* L.). // *Opt. Laser Technol.*, 2022, v. 147, 107559.

8. B. Zhang, D. Banks, V. Robles, L.F.D. Cruz, G. Aguilar. High resolution optical investigation of laser intensity and solution temperature effects on thermocavitation. *Exp. Therm. Fluid Sci.*, 2022.,v. 136, 110683.
9. V.M. Chudnovskii, A.A. Levin, V.I. Yusupov, M.A. Guzev, A .A. Chernov, The formation of a cumulative jet during the collapse of a vapor bubble in a subcooled liquid formed as a result of laser heating. // *Int. J. Heat Mass Transf.*, 2020, v. 150, 119286.
10. R.V. Fursenko, V.M. Chudnovskii, S.S. Minaev, J. Okajima, Mechanism of high velocity jet formation after a gas bubble collapse near the micro fiber immersed in a liquid. // *Int. J. Heat Mass Transf.*, 2020. v. 163, 120420.
11. V.M. Chudnovskii, M.A. Guzev, V.I. Yusupov, R.V. Fursenko, J. Okajima, Study of methods for controlling direction and velocity of liquid jets formed during subcooled boiling. // *Int. J. Heat Mass Transf.*, 2021, v. 173, 121250.
12. Толубинский В. И. Теплообмен при кипении. // К.: Наукова думка, 1980, 316 с.
13. А.В. Кулик, С.Н. Мокрин, А.М. Краевский, С.С. Минаев, М.А. Гузев, В.М. Чудновский, Особенности динамики струйного потока, генерируемого при поверхностном кипении жидкости на лазерном нагревателе. // *Письма в ЖТФ*, 2022, т. 48(2), с. 20-23.
14. Y. Jaluria, *Natural Convection: Heat and Mass Transfer*. // NY: Pergamon, 1980. 326 pp.

PHYSICAL MECHANISMS OF LASER THERAPY OF CYSTS

S.N. Mokrin^{1,2}, A.V. Kulik^{1,2}, D.A. Tereshko¹, S.S. Minaev^{1,3}, V.M. Chudnovskii¹

*¹Institute of Applied Mathematics FEB RAS,
(Radio str., 7, Vladivostok, Russia, 690041)*

*²Far Eastern Federal University
(Ajax 10, Russkiy isl, Vladivostok, Russia, 690922)*

*³Lebedev Physical Institute
(Leniskii ave., 53, Moscow, Russia, 119991)*

e-mail: msn_primat@mail.ru

The physical mechanism of formation and propagation of a laser-induced submerged jet inside a cuvette simulating a cyst were studied in present work. Based on the results of the experiment, a mathematical model of the propagation of a heated jet inside a closed volume was proposed. The results of numerical modeling allow us to estimate the characteristic heating times of the inner cavity of the cuvette to the coagulation temperature of the proteins that make up the inner surface of the cysts.

Keywords: laser radiation, submerged jet, boiling, heat transfer.

ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ДЛЯ КЛАССИФИКАЦИИ ИЗОБРАЖЕНИЙ НЕЙТРОФИЛОВ

С.А. Найденов¹, А.В. Неупокоева², А.В. Сычевский¹

¹*Иркутский государственный медицинский университет,
(664003, г. Иркутск, ул. Красного Восстания, 1)*

²*Самарский государственный медицинский университет,
(443099, г. Самара, ул. Чапаевская, 89)*

e-mail: semen.naid@yandex.ru

В работе представлены результаты применения сверточной нейронной сети для классификации медицинских изображений на примере фотографий нейтрофилов. Показано, что точность классификации зависит от объема обучающей выборки и может достигать 80% для процесса валидации.

Ключевые слова: нейросети, обработка изображений, нейтрофилы, медицинские изображения.

1. ВЕДЕНИЕ

В современном мире отчетливо проявляются две взаимосвязанные тенденции: развитие диагностической техники, увеличение числа доступных диагностических исследований приводит к росту объема информации о здоровье каждого пациента. Наряду с этим увеличивается нагрузка на врача, особенно в период массовой заболеваемости, что требует разработки систем автоматической обработки диагностической информации. Одним из самых востребованных направлений в медицине является обработка и классификация изображений – результатов ультразвуковых исследований, компьютерной томографии, рентгеновских снимков, мазков крови, изображений гистологических срезов. При этом в последние годы активно развивается применение сверточных нейронных сетей (convolutional neural networks – CNN) для анализа изображений вообще и медицинских изображений в частности [1-3]. Использование CNN для сегментирования и классификации изображений позволяет достичь сравнительно высокой точности и специфичности, что делает их применение весьма перспективным.

В клинической практике широко распространено определение лейкоцитарной формулы – процентного соотношения различных видов лейкоцитов, в особенности различных форм нейтрофилов, при подсчете их в окрашенном мазке крови под микроскопом.

Нейтрофильные гранулоциты (нейтрофильные лейкоциты, нейтрофилы) – самая многочисленная группа лейкоцитов. Они составляют от 48 до 78 % от общего числа лейкоцитов. Ядро зрелого сегментоядерного нейтрофила содержит 3-5 сегментов, соединенных тонкими перемычками. В крови встречаются нейтрофилы трех степеней зрелости: метамиелоциты (юные нейтрофилы), палочкоядерные, сегментоядерные. Метамиелоциты и палочкоядерные относятся к молодым клеткам. В норме процентное содержание метамиелоцитов не превышает 0,5%, характеризуются наличием бобовидного ядра. Палочкоядерные нейтрофилы в норме составляют от 1 до 6% от общего числа лейкоцитов, ядро несегментированное, часто в форме подковы или изогнутой латинской буквы «S». Повышение процентного содержания метамиелоцитов и палочкоядерных нейтрофилов может свидетельствовать о наличии остро текущего гнойно-воспалительного процесса, либо об острой массивной кровопотере. Это вызвано ускорением процесса гемопоэза и замещением потерянных клеток более молодыми формами [4].

Микроскопическое исследование мазков крови в условиях рядового больничного учреждения является достаточно трудоемким из-за большого количества пациентов.

Поэтому цель данной работы – разработка автоматизированного метода обработки медицинских изображений, основанного на использовании нейронных сетей для классификации степени зрелости нейтрофилов.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Материалом для исследования в рамках данной работы являются фиксированные и окрашенные рутинным методом мазки крови пациентов хирургического отделения НИИ ИНЦХТ. Забор крови производился до и после оперативного вмешательства. Мазки крови окрашивались раствором Романовского-Гимза, время окрашивания – 20 минут.

Для просмотра подготовленных мазков и изготовления микрофотографий использовался микроскоп «Альтами – 136т», оснащенный цифровой фотокамерой «Levenhuk C-Series» с разрешением 2048x1546 пикселей. Исследуемые клетки рассматривались под увеличением x2000 раз. Всего для исследования было отобрано 54 фотографии нейтрофилов: 7 изображений метамиелоцитов, 23 изображения палочкоядерных нейтрофилов и 24 изображения сегментоядерных нейтрофилов (рис. 1).

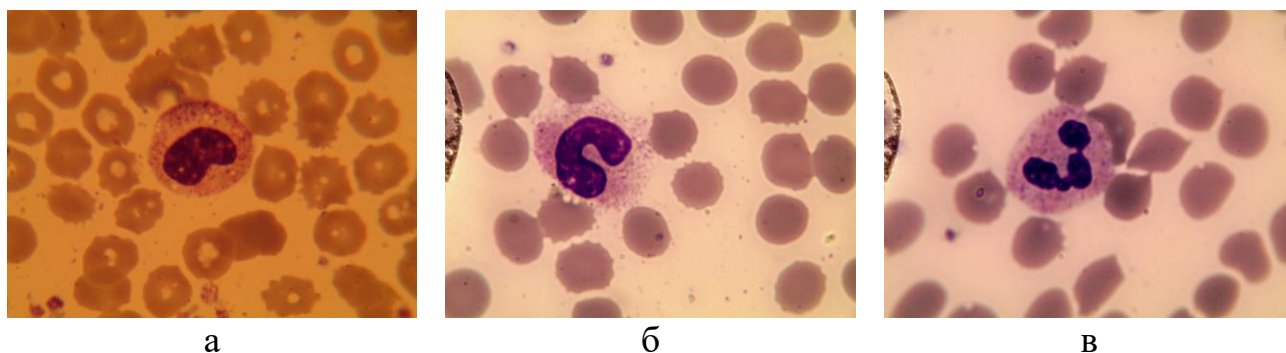


Рис. 1. Три степени зрелости нейтрофила: а) метамиелоциты, б) палочкоядерные, в) сегментоядерные

Для классификации нейтрофилов по степени зрелости использовалась нейронная сеть, созданная на основе функций библиотеки Keras языка программирования Python. На вход сети подавалось изображение, преобразованное в формат 256*256 пикселей. Нейронная сеть включала в себя 3 блока сверточных слоев (после каждого блока следовала операция уменьшения размерности) и три полносвязных слоя, содержащих 32, 16 и 3 нейрона соответственно.

Весь набор изображений разбивался на часть, предназначенную для обучения нейронной сети, и на изображения, используемые для контроля результатов обучения – валидации. Для оценки качества работы нейросети использовались стандартные параметры: точность классификации и функция потерь. Обучение производилось в течение 30 эпох.

При разбиении данных в соотношении 80% для обучения и 20% для валидации, сеть использовала 44 изображения для обучения. Точность классификации по обучающим данным при этом достигала 93%, но точность валидации не превышала 60% (рис. 2а).

При разбиении данных в соотношении 90% для обучения и 10% для валидации, сеть использовала 49 изображений для обучения. Точность классификации при валидации в этом случае достигала 80% (рис. 2б).

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Приведенные данные показывают возможность обучения нейронной сети на ограниченном объеме данных. С другой стороны высокая зависимость результатов классификации от количества изображений в обучающей выборке приводит к необходимости расширения набора данных для более точной и устойчивой классификации.

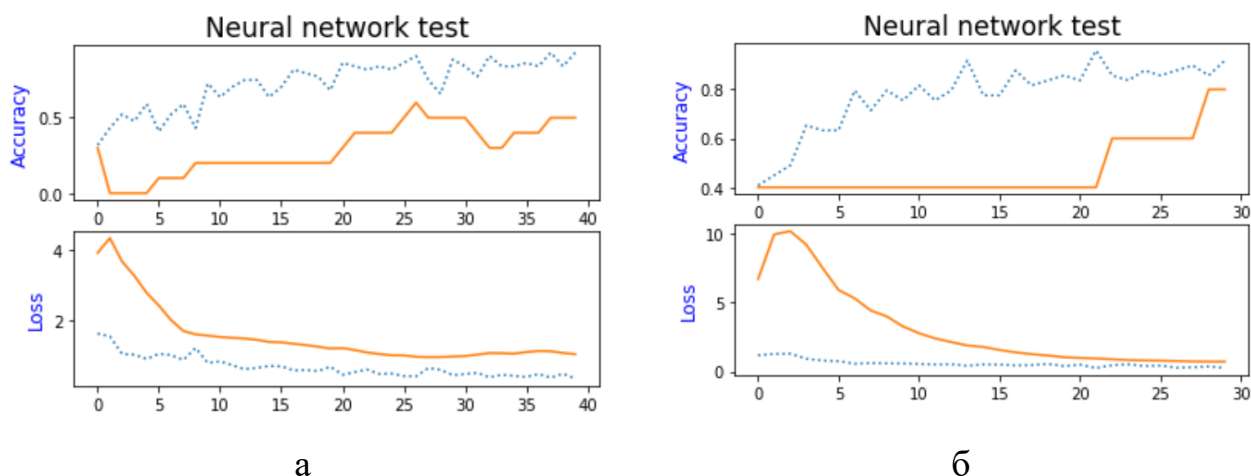


Рис. 2. Точность классификации и функция потерь в случае исключения 20% (а) и 10% (б) данных из обучения: пунктирная линия – точность по обучающей выборке, сплошная линия – точность при валидации

Полученная с использованием описанной конфигурации нейронной сети точность в 80 % может быть повышена как за счет совершенствования параметров сети, так и за счет использования дополнительных алгоритмов. Так, например, в работе [1] добавлен модуль сегментирования наиболее значимой части изображения перед подачей его на вход нейронной сети. В целом полученный результат показывает перспективность применения нейронных сетей для автоматизации обработки мазков крови и может быть использован для определения различных патологий на основе анализа формы клеток клеток.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Разработка алгоритма поиска опухолевых областей на основе обработки полнослайдовых гистологических изображений рака молочной железы / С. Н. Рябцева, В. А. Ковалев, В. Д. Малышев [и др.] // Доклады Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники. – 2020. – Т. 18. – № 8. – С. 21-28. – DOI 10.35596/1729-7648-2020-18-8-21-28. – EDN SAJEPW.
2. Горина, Е. В. Обработка и апскейлинг цифрового изображения при помощи нейросетей на примере специального программного обеспечения / Е. В. Горина, Д. А. Егупов // Вестник молодых ученых Санкт-Петербургского государственного университета технологии и дизайна. – 2022. – № 1. – С. 95-100. – EDN MOQXZR.

3. Нейросетевой классификатор гиперспектральных снимков кожных патологий / В. О. Винокуров, И. А. Матвеева, Ю. А. Христофорова [и др.] // Компьютерная оптика. – 2021. – Т. 45. – № 6. – С. 879-886. – DOI 10.18287/2412-6179-CO-832. – EDN HVOOAA.
4. Афанасьев Ю. И. Гистология цитология и эмбриология: учебник / Ю. И. Афанасьев, Н. А. Юрина, Е. Ф. Котовский. М.: Медицина, 2002. – 744 с.

THE USE OF A NEURAL NETWORK FOR THE CLASSIFICATION OF NEUTROPHIL IMAGES

S.A. Naidenov¹, A.V. Neupokoeva², A.V. Sychevskiy¹

¹Irkutsk State Medical University,
(664003, Irkutsk, Krasnogo Vosstaniya str., 1)

² Samara State Medical University,
(443099, Samara, Chapaevskaya str., 89)

e-mail: semen.naid@yandex.ru

The paper presents the results of application a convolutional neural network to classify medical images using neutrophil photographs as an example. It is shown that the classification accuracy depends on the size of the training sample and can reach 80% for validation sample.

Keywords: neural networks, image processing, neutrophils, medical images.

ДИАГРАММЫ ПОВЕРХНОСТИ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ ХИМИЧЕСКОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ АЦЕТАЛЬДЕГИДА В ЭТАНИМИН ВО ЛЬДАХ АММИАКА

А.А. Николаев^{1,2}, А.А. Рудь¹, В.Н. Аязов^{1,2}, А.М. Мебель^{1,3}

¹Самарский национальный исследовательский университет,
(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)

²Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева РАН
(443011, г. Самара, ул. Ново-Садовая, 221)

³Международный Университет Флориды, (33199 США, Флорида, Майами,
11200 Юго-западная 8-я улица)
e-mail: nikolayev_tolya57@inbox.ru

Было проведено теоретическое исследование химического превращения ацетальдегида (CH_3CHO) в этанимин (CH_3CHNH) во льдах аммиака (NH_3) в условиях глубокого космоса. Квантово-механические вычисления высокого уровня точности позволили на качественном уровне проанализировать диаграммы поверхности потенциальной энергии (ППЭ) реакции. В исследовании было явно учтено участие вспомогательных молекул NH_3 в реакции, что имитировало условия твердой фазы, в рамках подхода SCRF//SMD. Работа вносит ценный вклад в изучение химических реакций в условиях твердой фазы в межзвездной среде, ответственных за формирование сложных органических молекул (СОМ) во Вселенной.

Ключевые слова: поверхностная криогенная реакция, межзвездная среда, молекулярное облако, лед, аммиак, твердая фаза, газовая фаза, сложная органическая молекула, ацетальдегид, этанимин, поверхность потенциальной энергии.

1. ВВЕДЕНИЕ

Сложные органические молекулы – молекулы, содержащие шесть и более атомов (комбинация атомов углерода, водорода, кислорода и/или азота). К ним относятся альдегиды (HCOR), кетоны (RCOR'), карбоновые кислоты (RCOOH), сложные эфиры (RCOOR'), амиды (RCONH_2) и нитрилы (RCN), где R и R' – алкильные группы. Упомянутые молекулярные соединения повсеместно распространены в межзвездной среде. Глубокое понимание путей синтеза СОМ имеет фундаментальное значение в астрофизике и астрохимии. Уникальные структурные изомеры СОМ (молекулы с одинаковой

химической формулой, но с разным порядком атомов) используются в качестве индикаторов для определения физических и химических условий межзвездной среды и для тестирования химических моделей молекулярных облаков и областей звездообразования. Несмотря на важную роль этих изомеров СОМ как эволюционных следов в астрофизике для изучения эволюционной стадии молекулярных облаков и областей звездообразования вместе с их химическими и физическими граничными условиями, отсутствуют окончательные доказательства механизмов их образования [1].

Химические реакции в твердой фазе, вызванные ионизирующим излучением на поверхности холодных межзвездных пылинок, представляются более результативным способом образования СОМ по сравнению с газофазными реакциями. Это связано с тем, что молекулы в твердой фазе находятся ближе друг к другу и поэтому могут реагировать друг с другом более эффективно. Более того, ледяные оболочки межзвездных пылинок служат щитом для вновь образованных молекул [2]. При гравитационном сжатии молекулярных облаков происходит рост температуры, который сопровождается сублимацией образованных СОМ в газовую фазу. Переходя в газофазную фазу, СОМ могут быть детектированы телескопами из-за их излучения в радиочастотном спектре [3]. Следовательно, целью данной работы является раскрытие механизмов химического превращения ацетальдегида в этанимин в условиях твердой фазы. Основная задача исследования состояла в получении количественных данных, наглядно показывающих, насколько условия твердой фазы энергетически более выгодные по сравнению с газовой фазой. Исходя из поставленной цели, в настоящей работе на основе высокоуровневых квантово-механических расчетных методов с точностью, сопоставимой с химической точностью в $4 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$, построены диаграммы ППЭ химической реакции $\text{CH}_3\text{CHO} + \text{NH}_3 + n\text{NH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CHNH} + \text{H}_2\text{O} + n\text{NH}_3$, где $n = \overline{0; 2}$ указывает на количество вспомогательных молекул аммиака, участвующих в переносе атомарного водорода и связанных водородными связями друг с другом и остальными молекулярными соединениями; в ходе реакции одна молекула аммиака образует ковалентно неполярную связь с ацетальдегидом, поэтому была отдельно указана в уравнении реакции.

2. МЕТОДИКА

Оптимизация геометрий всех соединений, лежащих на диаграммах ППЭ реакции в твердой фазе, была проведена на уровне теории функционала

плотности (DFT) гибридным методом с поправкой на дальние взаимодействия ω B97X-D [4, 5] с применением поляризационного валентно-расщепленного базисного набора 6-311G(d,p) [6] в программе Gaussian09 [7]. Использование данного метода достаточно для получения точных расчетов геометрической структуры молекул, начиная с основных состояний. Условия твердой фазы были смоделированы путем применения подхода SCRF//SMD [7, 8]. Метод SCRF – самосогласованное реакционное поле – учитывает влияние поляризуемого растворителя с главными параметрами в виде диэлектрической проницаемости и коэффициента преломления среды; в качестве растворителя выступает аммиак. Учитывая квантово-механические вычисления, были построены диаграммы ППЭ для $n = \overline{0; 2}$. Теоретическое исследование проводилось с использованием вычислительных мощностей суперкомпьютера Самарского университета «Сергей Королев».

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рисунках 1-3 представлены диаграммы ППЭ химического превращения ацетальдегида в этанимин. Все энергии молекулярных соединений были рассчитаны относительно энергии кластера $\text{CH}_3\text{CHO} \cdot (n+1)\text{NH}_3$ ($n = \overline{0; 2}$), принятой за 0 кДж·моль⁻¹. Все оптимизированные структуры получены при комбинировании методов DFT и SCRF.

Расчет при $n = 0$ хотя и сделан с учетом подхода SCRF//SMD, но без участия вспомогательных молекул NH_3 в переходе атомарного водорода величины энергетических барьеров не изменились, как если бы расчет реакции происходил без растворителя. Поэтому диаграмму, представленную рисунком 1, можно считать аналогом химической реакции в газовой фазе и взять в качестве отправной точки для сравнения с другими диаграммами на рисунках 2 и 3, где уже присутствуют молекулы аммиака, непосредственно участвующие в переходных состояниях, то есть при оптимизации переходных состояний в структуру этого состояния явно «внедрялись» молекулы NH_3 . Этот механизм действительно повлиял на величину энергетического барьера.

Каждая реакция сопровождалась присоединением аммиака к CН компоненте в ацетальдегиде, формируя при этом ковалентно неполярную σ -связь C-N. Далее идут два последовательных перехода атомарных водородов. Первый – от NH_3 к компоненте О молекулы $\text{CH}_3\text{CHONH}_3$ или комплекса $\text{CH}_3\text{CHO} \cdot \text{NH}_3$, если речь идет о газофазной реакции, где CH_3CHO связан с NH_3 водородными связями. Второй – от NH_2 к группе ОН соединения

$\text{CH}_3\text{CH}(\text{OH})\text{NH}_2$, в результате чего происходил отрыв молекулы H_2O с образованием этанимина. Отмечу, что второй переход атомарного водорода мог быть не только от NH_2 компоненты, но и от CH_3 , приводя к аналогичному отрыву молекулы воды с образованием таутомера этанимина – виниламина CH_2CHNH_2 .

Именно этанимин наблюдался в качестве продукта в ходе эксперимента по изучению поверхностной криогенной реакции, проведенного научной группой под руководством профессора Кайзера Р.И. в Гавайском университете на Маноа, что будет отражено в публикации будущей научной статьи. Несмотря на то что при нормальных условиях в результате таутомерии два изомера легко переходят друг в друга, в ряде случаев, например, в условиях низких температур эти изомеры могут быть отделены друг от друга. Более того, в результате численных экспериментов было обнаружено, что выходной энергетический барьер на образование виниламина был выше по сравнению с этанимином.

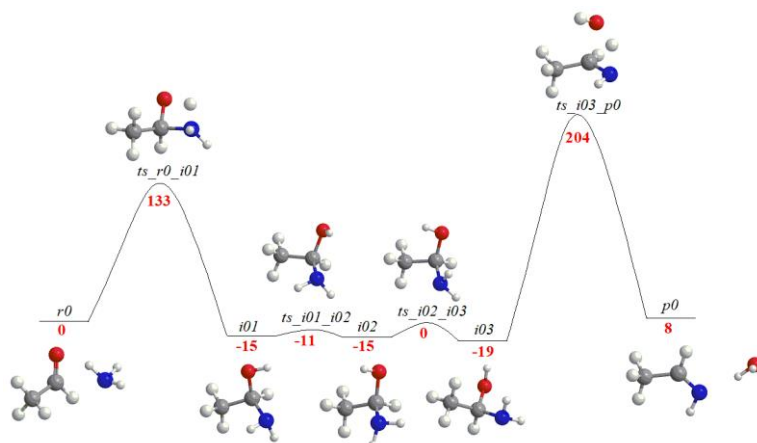


Рис. 1. Диаграмма ППЭ химического превращения ацетальдегида в этанимин при $n=0$ (аналог газовой фазы)

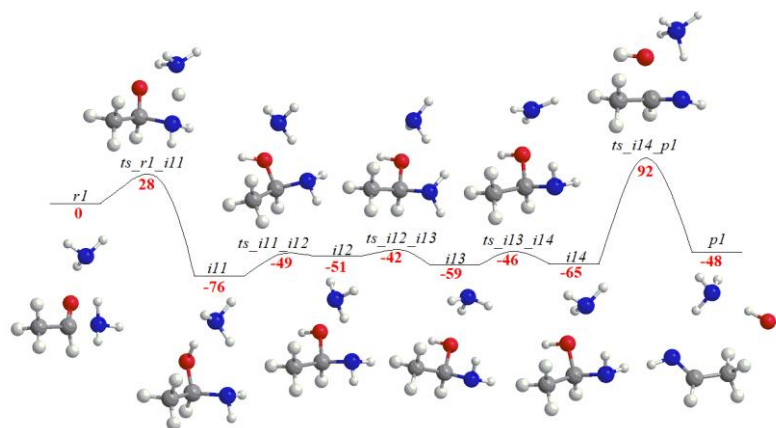


Рис. 2. Диаграмма ППЭ химического превращения ацетальдегида в этанимин в твердой фазе при $n=1$

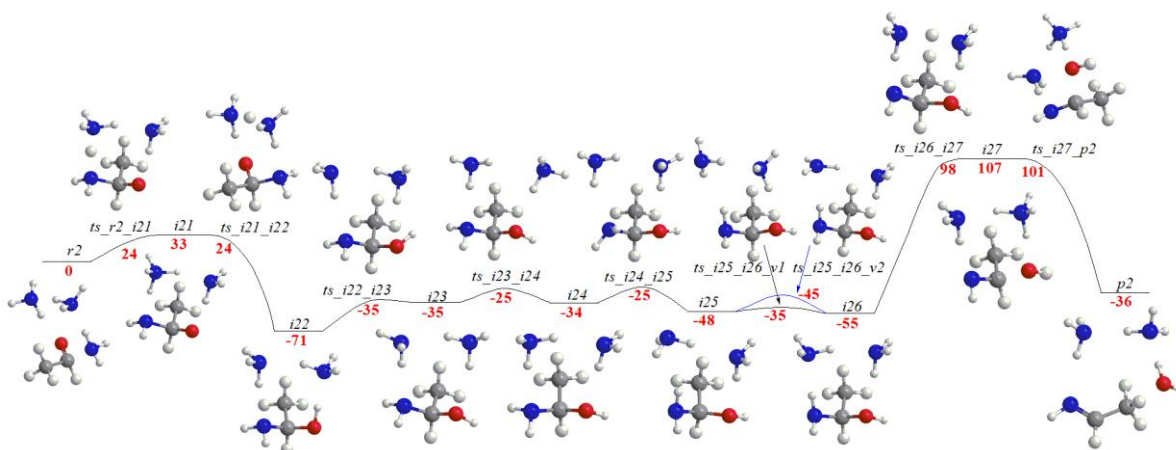


Рис. 3. Диаграмма ППЭ химического превращения ацетальдегида в этанимин в твердой фазе при $n=2$

Обратим внимание на то, что ключевыми переходами на всех диаграммах являются входные и выходные энергетические барьеры, управляя которыми, можно контролировать константу скорости реакции. Все промежуточные переходы связаны лишь с конформационной изомеризацией, характеризующейся достаточно низкими по энергии переходными состояниями для того, чтобы не учитывать их при расчете кинетических констант реакции. Подход SCRF//SMD с одной или двумя вспомогательными молекулами аммиака уменьшает величину относительной энергии входных переходных состояний почти в пять раз, а выходных – в два раза, делая превращение ацетальдегида в этанимин гораздо более вероятной в условиях космических льдов. С энтальпийной точки зрения система с одной вспомогательной молекулой NH_3 на рисунке 2 доминирует над системой со вспомогательными молекулами NH_3 на рисунке 3, что видно по относительным энергиям всех молекулярных соединений. Так как входные и выходные барьеры достаточно высокие, чтобы реакция протекала при экстремально низких температурах, то необходима энергия извне для активации процесса, которая может быть сообщена системе космическим излучением. Так как в лабораторном эксперименте группы Кайзера не было никакого воздействия ионизирующим излучением на льды аммиака, то следует учесть эффект туннелирования атомарного водорода через входные и выходные энергетические барьеры. Это явление действительно влияет на процесс протекания, а именно на кинетику этих реакций, так как в ходе лабораторной реакции было подтверждено существование продукта этанимина. Значение констант скорости для переноса H при его туннелировании исследовалось в

различных работах, и при барьере в ~ 150 кДж·моль⁻¹ оно уже составляло порядка 10 с⁻¹, что находится в согласии с экспериментом [9, 10].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе выполнения данной работы были исследованы механизмы химического превращения ацетальдегида в этанимин во льдах аммиака. Построены диаграммы поверхности потенциальной энергии реакций, в ходе которых вспомогательные молекулы аммиака, создающие эффект окружающего вещества в твердой фазе, либо полностью отсутствуют, что подобно газофазной реакции, либо непосредственно участвуют в переносе атомарного водорода. Рассмотрены случаи, когда участвует одна и две молекулы аммиака. При дальнейшей попытке «внедрить» молекулы аммиака в структуру переходных состояний эти вновь добавленные соединения лишь пассивно принимают участие в реакции, дополняя твердофазную оболочку, окружающую реагирующие компоненты, и связываясь с активной частью молекулярного комплекса водородными связями.

Показано, что при добавлении молекул аммиака во входные и выходные переходные состояния энергетический барьер уменьшается почти в пять раз – для входных и в два раза – для выходных состояний, делая реакцию $\text{CH}_3\text{CHO} + \text{NH}_3 \rightarrow \text{CH}_3\text{CHNH} + \text{H}_2\text{O}$ гораздо более вероятной в условиях космических льдов. Энергия, необходимая для активации процесса, может быть сообщена системе космическим излучением. В данном случае эффект атомного туннелирования играл ключевую роль, поскольку реакция в условиях реального эксперимента проходила без воздействия внешнего излучения.

Работа в СФ ФИАН выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках гранта № 075-15-2021-597 «Происхождение и эволюция органических молекул в нашей Галактике».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. M.J. Abplanalp, R.I. Kaiser, On the formation of complex organic molecules in the interstellar medium: untangling the chemical complexity of carbon monoxide-hydrocarbon containing ice analogues exposed to ionizing radiation via a combined infrared and reflectron time-of-flight analysis. // *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2019, v. 21, p. 16949-16980.
2. S.A. Sandford, M. Nuevo, P.P. Bera, T.J. Lee, Prebiotic Astrochemistry and the Formation of Molecules of Astrobiological Interest in Interstellar Clouds and Protostellar Disks. // *Chemical reviews*, 2020, v. 120, p. 4616-4659.

3. C. Zhu, H. Wang, I. Medvedkov, J. Marks, M. Xu, J. Yang, T. Yang, Y. Pan, R.I. Kaiser, Exploitation of Synchrotron Radiation Photoionization Mass Spectrometry in the Analysis of Complex Organics in Interstellar Model Ices. // *Journal of Physical Chemistry Letters*, 2022, v. 13, p. 6875-6882.
4. J.-D. Chai, M. Head-Gordon, Long-range corrected hybrid density functionals with damped atom–atom dispersion corrections. // *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2008, v. 10, p. 6615-6620.
5. J.-D. Chai, M. Head-Gordon, Systematic optimization of long-range corrected hybrid density functionals. // *Journal of chemical physics*, 2008, v. 128, P. 084106.
6. R. Krishnan, J.S. Binkley, R. Seeger, J.A. Pople. Self-consistent molecular orbital methods. XX. A basis set for correlated wave functions. // *Journal of chemical physics*, 1980, v. 72, p. 650-654.
7. M.J. Frisch [et. al], Gaussian 09, revision B.01 // Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010. URL: <https://gaussian.com>.
8. J. Tomasi, M. Persico, Molecular interactions in solution: an overview of methods based on continuous distributions of the solvent. // *Chemical Reviews*, 1994, v. 94, p. 2027-2094.
9. L.I. Trakhtenberg, A.A. Fokeyev, S.P. Dolin, A.M. Mebel, S.H. Lin, Rate constant for H-atom tunneling in the fluorene-acridine system based on DFT potential energy surface. // *Chemical physics*, 2004, v. 303, p. 107-113.
10. L.I. Trakhtenberg, A.A. Fokeyev, S.P. Dolin, A.M. Mebel, S.H. Lin, Temperature and pressure dependences of tunneling rate constant: Density-functional theory potential-energy surface for H-atom transfer in the fluorene-acridine system. // *The Journal of chemical physics*, 2005, v. 123, P. 114508.

POTENTIAL ENERGY SURFACE DIAGRAMS OF THE CHEMICAL TRANSFORMATION OF ACETALDEHYDE INTO ETHANIMINE IN AMMONIA ICE

A.A. Nikolayev^{1,2}, A.A. Rud¹, V.N. Azyazov^{1,2}, A.M. Mebel^{1,3}

¹*Samara National Research University,
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)*

²*Lebedev Physical Institute, Samara Branch
(Novo-Sadovaya str., 221, Samara, Russia, 443011)*

³*Florida International University, (Miami, Florida 33199, USA)
e-mail: nikolayev_tolya57@inbox.ru*

A theoretical study of the chemical transformation of acetaldehyde (CH_3CHO) into ethanimine (CH_3CHNH) in ammonia (NH_3) ice under deep space conditions was conducted. Quantum mechanical calculations with a high level of accuracy allowed a qualitative analysis of the potential energy surface diagrams (PES) of the reaction. The study explicitly accounted for the participation of assisting NH_3 molecules in the reaction, which simulated ice-phase conditions, within the SCRF//SMD approach. The work makes a valuable contribution to the study of chemical reactions under ice-phase conditions in the interstellar medium responsible for the formation of complex organic molecules in the Universe.

Keywords: surface cryogenic reaction, interstellar medium, molecular cloud, ice, ammonia, ice phase, gas phase, complex organic molecule, acetaldehyde, ethanimine, potential energy surface.

РАЗРАБОТКА СТЕНДА ВИЗУАЛИЗАТОРА ВЕН НА ОСНОВЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В БЛИЖНЕМ ИК ДИАПАЗОНЕ

Н.В. Ремизов, Е.М. Батаева, Д.П. Страмоусов, Д.Н. Артемьев

*Самарский национальный исследовательский университет,
(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)
e-mail: erenv97@yandex.ru*

Одним из распространенных способов диагностики в медицине являются лабораторные исследования, для которых в качестве образца используется венозная кровь. Для этого флеботомисту требуется обнаружить вену у пациента, что может быть затруднительным в случае если вены не видны невооруженным глазом.

Для предотвращения ошибок на преаналитическом этапе, а также во избежание болей у пациента, вызванных лишними проколами в поисках вены, применяются визуализаторы вен, позволяющие подсветить невидимую вену и таким образом быстро обнаружить ее.

В данной работе проанализировано влияние световых ИК фильтров НWB780 и НWB830 на контрастность вен относительно поверхности кожи. Рассматривается применение объективов с фокусным расстоянием 3,6 мм, 16 мм и 25 мм. Разработан макет экспериментального стенда визуализатора вен, предложена методика оценки результатов, проведены предварительные эксперименты.

Ключевые слова: визуализатор вен, ближний ИК диапазон, источник излучения, объектив, фильтр.

1. ВВЕДЕНИЕ

Визуализатор вен – это неинвазивный прибор, который позволяет получить картину расположения вен пациента, в том числе и невидимых невооруженным глазом. Основной принцип работы прибора заключается в разном поглощении света гемоглобином крови и окружающими тканями. Прибор излучает свет в ближнем ИК диапазоне на тело пациента и регистрирует свет, отраженный от окружающих тканей. Затем он выводит изображение на дисплей или проецирует на пациента.

Визуализатор вен имеет ряд применений. Например, он может быть применен при склеротерапии, флебэктомии для удаления незаметных

варикозно расширенных вен, провоцирующих рост новых образований [1]. Также он может быть применен при выполнении внутривенных инъекций, при взятии крови на анализ, при установке катетера [2]. Встречаются также немедицинские применения, например идентификация человека по узору вен в области биометрии [3].

Такие приборы производятся и активно применяются за рубежом. В больницах РФ визуализаторы вен встречаются редко. Тем не менее, внедрение данной технологии позволило бы облегчить проведение инъекций и забора крови, что необходимо для повышения комфорта пациента, качества лечения и уровня доверия к отечественной медицине.

Вместе с тем, технология визуализации вен не является совершенной. Исследователи отмечают ухудшение видимости вен при наличии дефектов кожи (растяжек, шрамов, пигментных пятен), а также у тучных и у темнокожих пациентов. Отмечается и малая глубина визуализации, не более 5 мм [1, 2].

Таким образом, возникает проблема разработки отечественного прибора для визуализации вен у проблемных пациентов.

Для разработки такого прибора необходимо провести ряд исследований, связанных с выбором источников излучения, объективов и фильтров. В настоящей работе предложен макет экспериментального стенда визуализатора вен и проведены исследования по выбору объективов и фильтров. Предложена методика оценки качества визуализации.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

2.1. Экспериментальная установка

В рамках поставленной задачи был разработан макет экспериментального стенда визуализатора вен с подключением к ПК по интерфейсу USB (рисунок 1). В пластиковом корпусе, распечатанном на 3D принтере, располагается плата-кольцо со светодиодами ИК диапазона и камера с ИК-фильтром для регистрации изображения. К плате-кольцу подключается блок питания на 12 В 500 мА постоянного тока. Камера подключается к ПК по USB и выводит изображение на экран монитора. Корпус устанавливается на штатив.

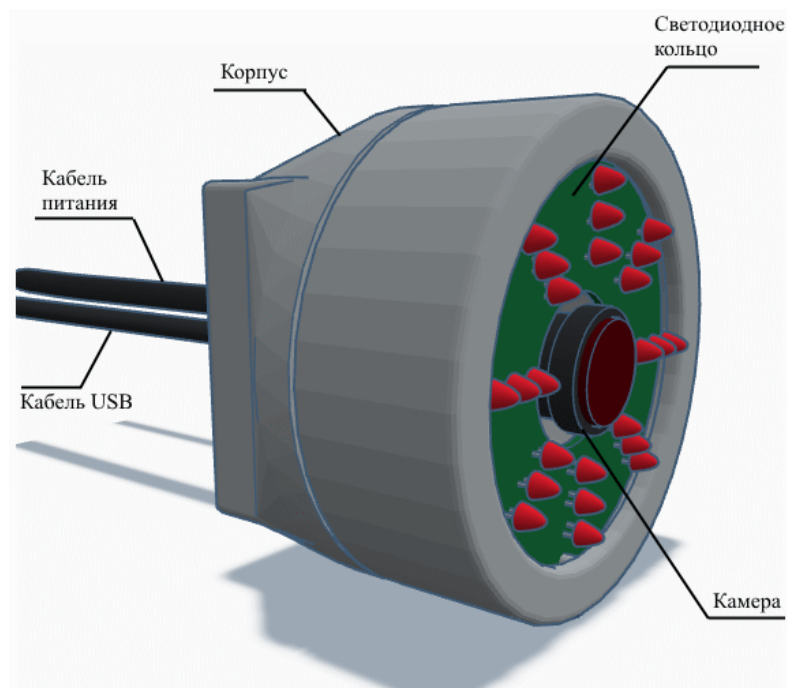


Рис. 1. Внешний вид стенда

2.2. Методология исследования

В исследованиях приняли участие 20 добровольцев-студентов в возрасте 20-24 года. Оценивалась контрастность вен относительно поверхности кожи при использовании различных объективов и фильтров.

Исследования проводились следующим образом. Испытуемый подставлял руку под стенд визуализатора вен, расположенный на штативе. При помощи камеры были получены фотографии руки при включенной ИК-подсветке при использовании различных объективов и фильтров. Фотографии руки без подсветки были получены при помощи камеры смартфона.

Затем оценивалась контрастность полученных фотографий следующим образом. Изображения преобразовывались из цветных в черно-белые, нормировались. Затем выделялись схожие области разрешением не менее 200x200 пикселей. Для этих областей оценивалось среднее квадратическое значение контрастности по следующей формуле:

$$C_{RMS} = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}, \quad (1)$$

где x_i - нормированное значение яркости i -го серого пикселя, $0 \leq x_i \leq 1$,

n - общее число пикселей изображения,

\bar{x} - средний нормированный уровень серого, который оценивается как:

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i. \quad (2)$$

Такая оценка удобна для сравнения контрастности изображений [4].

Сравнивались параметры отрезающих длинноволновых фильтров НWB780 (780 нм) и НWB830 (830 нм) (рисунки 2 и 3). Фокусные расстояния объективов: 3,6 мм, 16 мм, 25 мм.

Известно, что излучение 750-950 нм характеризуется наибольшей глубиной проникновения в биоткань. Параметры светодиодного кольца: 24 светодиода, угол рассеяния светодиодов составляет 90°, длина волны - 850 нм. Аналогичные параметры используются в большинстве визуализаторов вен [1,2]. На рисунке 4 приведен спектр излучения источника.



Рис. 2. Спектр излучения опорного источника, прошедшего через НWB780



Рис. 3. Спектр излучения опорного источника, прошедшего через НWB830



Рис. 4. Спектр излучения светодиодного кольца

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

В ходе эксперимента и расчета были получены следующие результаты. В таблице 1 приводятся показатели среднего квадратического значения контрастности по выбранным случайным образом 5 из 20 испытуемых, поскольку тренд по показателям во всех 20 случаях совпадал. На рисунке 5 приведены примеры фотографий руки одного из испытуемых, полученные при помощи смартфона (а) и при помощи макета визуализатора вен при различных объективах с использованием фильтра 830 нм (б,в,г). На рисунке 6 приведены примеры фотографий другого испытуемого, полученные при помощи смартфона (а), без фильтра и с подсветкой (б), с использованием различных фильтров (в,г), для объектива на 3,6 мм.

Заметно влияние подсветки на среднюю квадратическую контрастность вен. Влияния объектива на контрастность замечено не было. Замечено, что HWB830, полоса пропускания которого начинается с 830 нм, позволяет получить большую контрастность вен, чем HWB780.

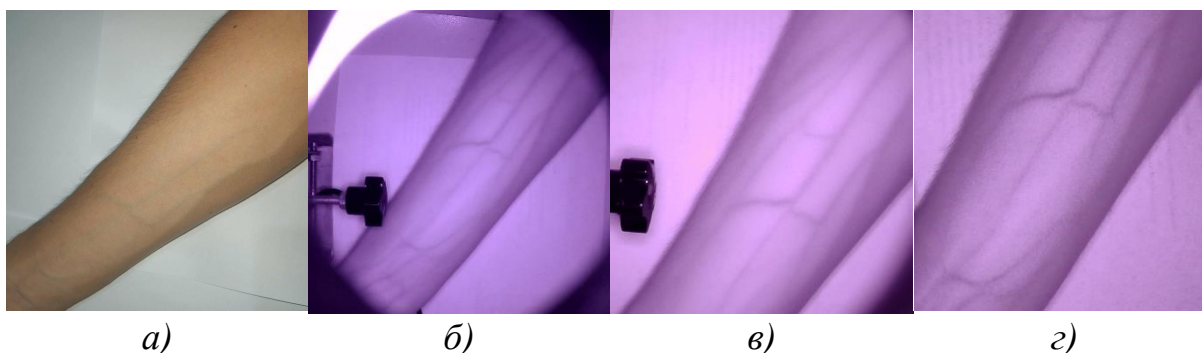


Рис. 5. Примеры фотографий: а) без подсветки, б) с подсветкой (HWB830, объектив 3,6 мм), в) с подсветкой (HWB830, объектив 16 мм), г) с подсветкой (HWB830, объектив 25 мм)

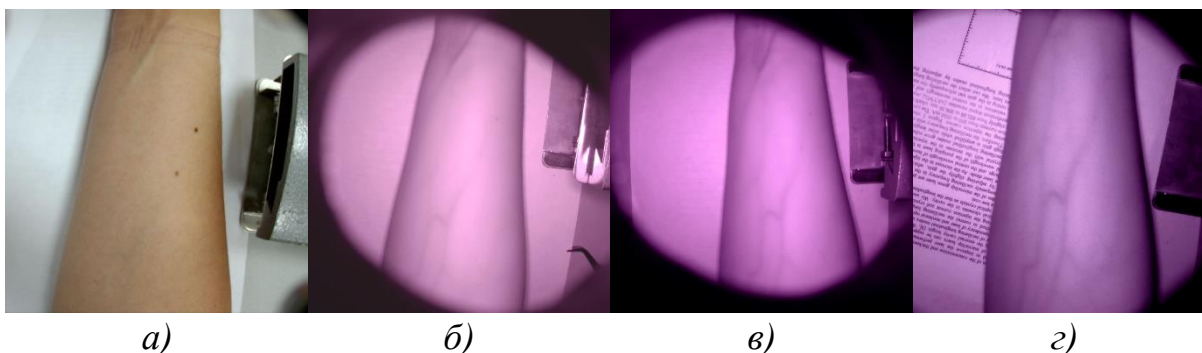


Рис. 6. Примеры фотографий: а) без подсветки и без фильтра, б) с подсветкой (без фильтра, объектив 3,6 мм), в) с подсветкой (HWB780, объектив 3,6 мм), г) с подсветкой (HWB830, объектив 3,6 мм)

Таблица 1. Показатели среднего квадратического значения контрастности.

| № испытуе мого | Без подсветки | Объектив 3,6 мм | | Объектив 16 мм | | Объектив 25 мм | |
|----------------------|------------------|-----------------|--------------|----------------|--------------|----------------|--------------|
| | | НWB780 | НWB830 | НWB780 | НWB830 | НWB780 | НWB830 |
| 1 | 0,049 | 0,058 | 0,064 | 0,056 | 0,065 | 0,055 | 0,062 |
| 2 | 0,044 | 0,072 | 0,091 | 0,076 | 0,089 | 0,071 | 0,091 |
| 3 | 0,056 | 0,105 | 0,122 | 0,109 | 0,120 | 0,101 | 0,122 |
| 4 | 0,046 | 0,081 | 0,108 | 0,079 | 0,102 | 0,081 | 0,098 |
| 5 | 0,068 | 0,090 | 0,102 | 0,095 | 0,104 | 0,092 | 0,101 |

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе был разработан макет визуализатора вен, предложена методика оценки качества визуализации. При помощи макета были получены фотографии рук испытуемых с ИК подсветкой. В среде GNU Octave оценена средняя квадратическая контрастность изображений.

Получено, что наличие подсветки увеличивает среднюю квадратическую контрастность изображения, т.е. упрощается обнаружение вен испытуемого. При этом отсекающий длинноволновой фильтр НWB830, полоса пропускания которого начинается с большей длины волны (830 нм), во всех случаях позволяет получить большую контрастность вен относительно поверхности кожи. Выбор объектива, в свою очередь, на контрастность не влияет. Объектив влияет только на фокус и область захвата руки.

Изменения в тысячных долях средней квадратической контрастности при смене объектива, вероятно связаны с ручной обрезкой изображений и неизбежным небольшим изменением положения руки испытуемого при получении новой фотографии после смены объектива на макете.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. С.-Т. Pan, M.D. Francisco, С.-К. Yen, S.-Y. Wang, Y.-L. Shiue, Vein Pattern Locating Technology for Cannulation: A Review of the Low-Cost Vein Finder Prototypes Utilizing near Infrared (NIR) Light to Improve Peripheral Subcutaneous Vein Selection for Phlebotomy. // Sensors, 2019, v. 19, 17 p.
2. M. D. Francisco, W.-F. Chen, С.-Т. Pan, M.-С. Lin, Z.-H. Wen, С.-F. Liao, Y.-L. Shiue, Competitive Real-Time Near Infrared (NIR) Vein Finder Imaging Device to Improve Peripheral Subcutaneous Vein Selection in Venipuncture for Clinical Laboratory Testing. // Micromachines 2021, v. 12, 20 p.

3. C. Kauba, B. Prommegger, A. Uhl, OpenVein—An Open-Source Modular Multipurpose Finger Vein Scanner Design. // Handbook of Vascular Biometrics. Advances in Computer Vision and Pattern Recognition. Springer, Cham., 2019, p. 77 - 111.
4. E. Peli, Contrast in complex images. // J. Opt. Soc. Am. A., 1990, v. 7, p. 2032-2040.

DEVELOPMENT OF A VEIN VIEWER BENCH BASED ON DIFFERENTIAL ABSORPTION IN THE NEAR INFRARED RANGE

N.V. Remizov, E.M. Bataeva, D.P. Stramousov, D.N. Artemyev

*Samara National Research University,
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)
e-mail: erev97@yandex.ru*

A common diagnostic method in medicine is laboratory testing, which uses venous blood as a sample. This requires the phlebotomist to locate patient's vein, which can be difficult if the veins are not visible to the naked eye.

To prevent pre-analytical errors, and to avoid patient pain caused by unnecessary punctures in search of a vein, vein visualizers are used to illuminate an invisible vein and thus quickly detect it.

In this paper the effect of the HWB780 and HWB830 IR light filters on the contrast of veins relative to the skin surface was analyzed. The use of objective lenses with focal lengths of 3,6 mm, 16 mm, and 25 mm is investigated. A prototype of an experimental stand of vein visualizer was developed, a technique for evaluating the results was proposed, preliminary experiments were carried out.

Keywords: vein viewer, near infrared range, IR source, objective lens, filter.

ФЕМТОСЕКУНДНАЯ ЛАЗЕРНАЯ ЗД-ФАБРИКАЦИЯ ИНТЕГРАЛЬНЫХ ОПТИЧЕСКИХ УСТРОЙСТВ В ОБЪЁМЕ ПРОЗРАЧНЫХ ДИЭЛЕКТРИКОВ

А.Е. Рупасов^{1,2}, С.И. Кудряшов¹, В.В. Кесаев^{1,2}, Р.А. Заколдаев²

¹*Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН
(119991, г. Москва, Ленинский пр-т., 53)*

²*Университет ИТМО,
(197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49)
e-mail: rupasovan@lebedev.ru*

Взаимодействие фемтосекундных лазерных импульсов с диэлектриками представляет большой интерес с точки зрения фундаментальной физики и приложений. При взаимодействии интенсивных лазерных импульсов с диэлектриком в объеме материала могут образовываться постоянные субмикронные структуры, которые возникают из-за рассеяния ближнего поля и плазмоники. На основе таких модификаций можно осуществлять запись информации, создавать оптические элементы, волноводы, дифракционные решетки и т.д.

Ключевые слова: наноструктура, оптические элементы, лазерная фабрикация.

1. ВВЕДЕНИЕ

Основной целью данной работы является изучение и обсуждение основных аспектов фемтосекундной лазерной микрообработки в различных прозрачных материалах. В данной работе внимание уделяется структурам, образующимся как на поверхности, так и в объеме материала под действием лазерных импульсов. При воздействии лазерного излучения могут образовываться структуры, тип которых зависит от параметров лазерного излучения таких как направление поляризации, длительность импульсов, мощность лазерного излучения, число импульсов в точку и скорость обработки поверхности. В том числе особое внимание уделяется свойствам и параметрам обрабатываемых материалов, с целью изучения процессов, происходящих при взаимодействии излучения с веществом. К одному из таких параметров относится зонная структура материала. По большей части обрабатываемые прозрачные материалы относятся к диэлектрикам, это

означает что у них достаточно широкая запрещённая зона, в свою очередь нет ни каких разрешённых электронных переходов.

Получение структур на поверхности и в объёме диэлектриков с помощью лазерного излучения является перспективным направлением. Таким образом в данной работе генерация излучения происходит в веществе, затем сгенерированное излучение фокусируется на поверхности материала или в объёме, при этом в зависимости от параметров излучения и свойств материала можно получить различные структуры. К наиболее перспективным технологиям можно отнести – запись информации, оптические элементы, волноводы, дифракционные решётки и т. д. К сожалению, в данный момент недостаточны изучены процессы взаимодействия излучения с веществом, поэтому полученные структуры являются лишь результатом большого количества экспериментов с варьированием параметров.

2. ДВУЛУЧЕПРЕЛОМЛЯЮЩИЕ СТРУКТУРЫ В ОБЪЁМЕ ДИЭЛЕКТРИКОВ

Взаимодействие фемтосекундных лазерных импульсов с диэлектриками представляет большой интерес с точки зрения фундаментальной физики и приложений. При взаимодействии интенсивных лазерных импульсов с диэлектриком в объёме материала могут образовываться постоянные структуры, которые возникают из-за рассеяния ближнего поля и плазмоники. Объёмные структуры в данном случае представляют собой дефекты субволновых периодических структур, напоминающих LIPSS (лазерно-индуцированные периодические поверхностные структуры) с изменённым показателем преломления в объёме [1-2]. К наиболее перспективным технологиям относятся технологии записи информации, оптические элементы, волноводы, дифракционные решетки и т.д. [3].

В этой работе мы использовали фемтосекундную лазерную систему Satsuma, основной из которых является иттербиевый волоконный лазер. Установка включает в себя генератор, многопроходный усилитель, выходной компрессор и акустооптический модулятор. В лазере используется диод накачки с длиной волны 850 нм. Основная длина волны составляет 1030 нм с максимальной энергией импульса 10 мкДж. Вторая гармоника (515 нм) с максимальной энергией импульса 3 мкДж. Длительность импульса изменялась с помощью компрессора в диапазоне от 0.3 до 3.8 пс. Длительность импульса измеряли с помощью автокоррелятора (Avesta AA-10 DD-12 PS). Лазерные

импульсы фокусировались в пятно с помощью микрообъективов (NA0.1; NA0.25; NA0.65) внутри пластины из диэлектрического материала (рис. 1). Диапазон плотности энергии при переменных энергиях 0,06–0,8 мкДж (пиковые мощности <2,7 МВт) составлял $\approx 8\text{--}100$ Дж/см², с соответствующими зависящими от ширины импульса пиковыми интенсивностями $\approx 1\text{--}10^2$ ТВт/см².

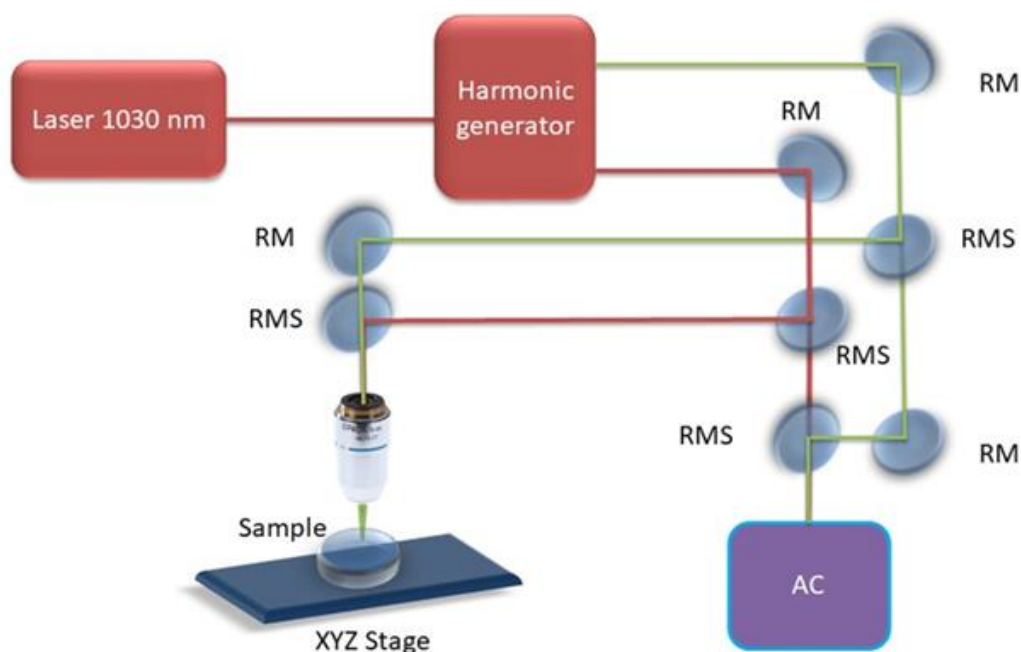


Рис. 1. Схема лазерной установки: 1) Лазерная система Satsuma; 2) генератор гармоник (генерация второй гармоники при 515 нм); 3) RM – высокоотражающее зеркало; 4) RMS – складывающееся высокоотражающее зеркало; 5) AC – автокоррелятор; 6) XYZ-каскад; 7) Образец – пластина из диэлектрического материала.

Исследование двулучепреломления [4] в области, модифицированной фемтосекундным излучением, проводилось системой микроанализа двулучепреломления Abrio IM 2.2. Значение двулучепреломления характеризуется сдвигом между двух ортогональных волновых фронтов, прошедших анизотропной структуры, выраженная в долях длины волны и равна $Ret = \Delta n \times D$, где $\Delta n = |n_e - n_o|$ для n_e, n_o будучи показатели преломления для необыкновенной и обыкновенной волн, D – толщина двулучепреломляющей структуры по нормали к диэлектрическому образцу.

2.1. Механизмы формирования объёмных решёток

Существующие модели формирования нанорешеток [5] несмотря на некоторые их правильные предсказания, имеют некоторые недостатки в

объяснении плоскостного расположения объемных нанорешеток и ориентации их «медленных»/«быстрых» оптические осей, неоднозначный затравочный механизм обратного рассеяния в интерференционных моделях. Это побудило нас взглянуть на новые физические эффекты, которые могли бы предвидеть и предсказать лежащие в их основе физические механизмы.

Во-первых, в данной работе мы проверили режимы фокусировки лазера. Ранее нами был измерен нелинейный показатель преломления флюорита, $n_2(515 \text{ нм}) 2.5 \times 10^{-16} \text{ см}^2/\text{Вт}$ [6], что согласуется с другими известными значениями $n_2 \approx (1-2) \times 10^{-16} \text{ см}^2/\text{Вт}$ в диапазоне 0.8-3 мкм. Это позволяет оценить критическую мощность для самофокусировки во флюорите на длине волны 515 нм $P_{\text{cr}} = 3.77\lambda^2/(8\pi n_0 n_2)$, что для значения линейного показателя $n_0(1,0 \text{ мкм}) = 1,44$ [7] дает $P_{\text{cr}} \approx 1 \text{ МВт}$. Это свидетельствует о том, что только максимальная энергия импульса 0.4 мкДж длительностью 0.3 пс попадает в диапазон мощностей для самофокусировки и филаментации, а практически все окно экспериментальных параметров соответствует линейному (геометрическому) режиму фокусировки. В этом контексте первичный масштаб для взаимодействия лазера с флюоритом:

$$w = \frac{\lambda}{\pi n_0} \frac{\sqrt{n_0^2 - NA^2}}{NA}, l = \frac{\lambda}{\pi n_0} \frac{n_0^2 - NA^2}{NA^2} \quad (1)$$

Однако формирующаяся сфероидальная ЭДП (электронно-дырочной плазме) в фокальной области, рассмотренная в предыдущих работах [8], будет непрерывной и сможет поддерживать межфазные плазмон-поляритоны только на своей искривленной поверхности, что не согласуется с ориентацией наблюдаемых двулучепреломляющих структур и их расположение «медленной» и «быстрой» оптических осей. Следовательно, по сравнению с предыдущими моделями следует искать другие физические процессы, которые могли бы создавать нанорешетки в плоскости, перпендикулярной оси распространения импульса. Моделирование представлено на рис. 2.

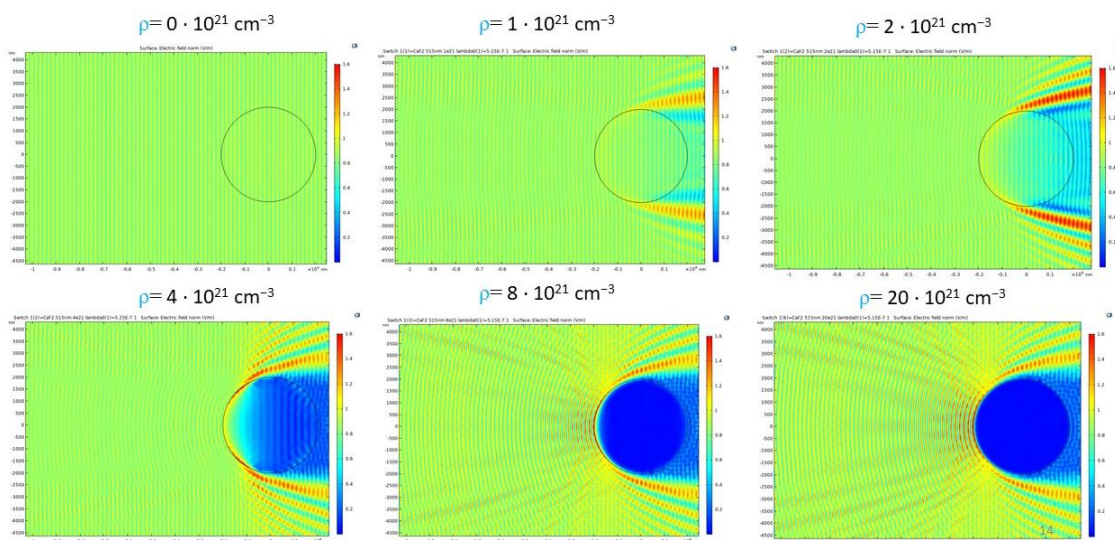


Рис. 2. Моделирование распределения амплитуды ближнего электрического поля (для 515 нм).

В результате мы предположили, что формирование дискретных поперечных плоскостей двулучепреломляющих нанорешеток вдоль оптической оси z во флюорите происходит в результате пространственной интерференции между падающей и отраженной плазмой волнами в пределах огибающей лазерного импульса. Такая интерференция порождает продольную стоячую электромагнитную волну и связанную с ней волну плотности плазмы (ЭДП) за счет мгновенной ионизации материала с периодом $\lambda/2n_0 \approx 0.17$ мкм. В поперечном сечении образца с помощью низковакуумной СЭМ можно наблюдать периодическое повреждение, где широкая область повреждения может быть связана с очаговой областью. В то же время слегка наклонная микрометровая периодическая наноструктура (периоды $L_{1-4} \approx 0,18-0,21$ мкм), предшествующая фокальной области, может быть связана с интерференционной картиной.

3. ОПТИЧЕСКИЕ ЭЛЕМЕНТЫ В ОБЪЁМЕ КВАРЦЕВОГО СТЕКЛА

3.1 Дисперсионные двулучепреломляющие фильтры

Выявленные режимы записи были использованы для прямой лазерной записи компактных цветных дисперсионных двулучепреломляющих фильтров (DBF), также известных как фильтры Soltc [9] и фильтры Lio [10]. На рис. 3. каждый цветной квадрат представляет такой фильтр с апертурой $\sim 500 \times 500$ мкм.

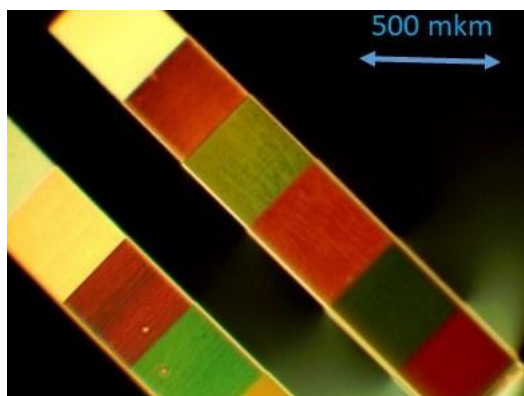


Рис. 3. Квадратные микрообласти внутри объемного плавленого кварца, демонстрация цветовой фильтрации при размещении между двумя поляризаторами и освещении белым светом. Длина/ширина областей – 3×0.5 мм.

3.2 Ахроматичная полуволновая пластинка

Благодаря формированию объёмных периодических структур, в объёме кварца можно создать полуволновую пластинку. Полуволновая пластинка - оптический элемент, позволяющий изменять угол плоскости лазерного излучения. В объёме кварца за один слой была получена пластинка (рис. 4) на 166.5° , которая немного меньше чем полуволновая пластинка 180° . Значение 180° может быть достигнуто путём многослойной записи по оси Z, путём комбинации режимов.

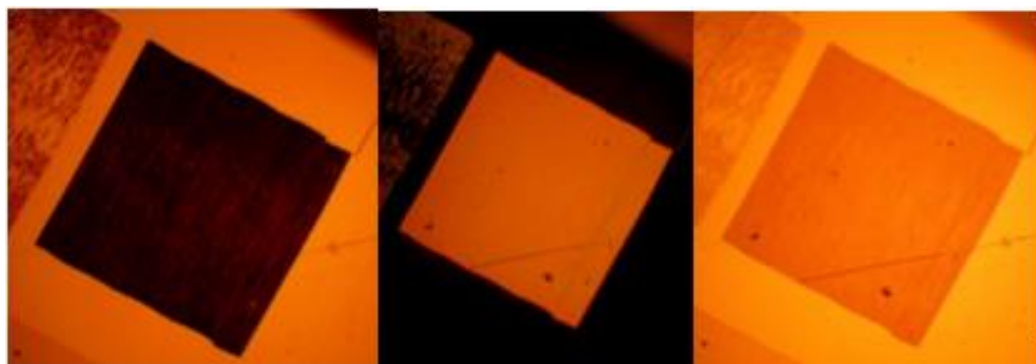


Рис. 4. Оптические снимки: а) параллельных поляризаторах; б) скрещенных поляризаторах; в) без поляризаторов.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Гибкость этого метода с точки зрения материалов и способности реализовывать трехмерные геометрии с субволновой точностью превратили его в идеальную недорогую платформу для быстрого прототипирования,

которая позволяет исследовать поля микрофлюидики, квантовой оптики и т. д. Добавление адаптивных оптических элементов в лазерную систему прямой записи уже продемонстрировало потенциал распараллеливания процессов, увеличения скорости записи и снижения производственных затрат. Несколько областей фемтосекундной лазерной обработки, включая лазерное травление и самоорганизующуюся наноструктуризацию, превратились в самостоятельные области исследований с быстро растущим числом приложений. Теоретические аспекты взаимодействия ультракоротких импульсов с веществом все еще требуют значительных улучшений. Хотя экспериментально пространственно-временной эффект может быть легко обнаружен, но механизмы взаимодействия вещества с лазерным излучением, формирующимися в пространстве и времени, остаются неясными.

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ (проект № 20-71-10103).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. S. A. Akhmanov, V.I. Emel'yanov, N.I. Koroteev, and V. N. Seminogov, (1985) *Sov.- Phys. Usp.* 28(12), 1084-1124
2. A. Borowiec, H. K. Hagen (2003) *Appl. Phys. Lett.* 82(25), 4462-4464
3. R. Drevinskas, and P. G. Kazansky (2017) *APL Phot.* 2(6), 066104
4. S. B. Mehta, M. Shribak, R. Oldenbourg (2013) *J. Opt.* 15(9), 094007
5. B. Zhang, X. Liu & J. Qiu. (2019) *J. of Mater.*, 5(1), 1-14.
6. S. Kudryashov, P. Danilov, A. Rupasov, S. Khonina, A. Nalimov, A. Ionin & M. Kovalev (2020) *Opt. Mat. Exp.*, 10(12), 3291-3305
7. A. Rudenko, J. P. Colombier & T. E. Itina (2016) *Phys. Rev. B*, 93(7), 075427.
8. S. I. Kudryashov, A. O. Levchenko, P. A. Danilov, N. A. Smirnov, A. A. Ionin (2020) *Opt. Lett.* 45(7), 2026-2029
9. Lyot B (1933) *CR Academy Science (Paris)* 197 1593
10. Šolc I (1953) *Cesk. ě Casopis. Fys.* ě 3

FEMTOSECOND 3D LASER FABRICATION OF INTEGRATED OPTICAL DEVICES IN THE VOLUME OF TRANSPARENT DIELECTRICS

A.E. Rupasov^{1,2}, S.I. Kudryashov¹, V.V. Kesaev^{1,2}, R.A. Zakoldaev²

¹*Lebedev Physical Institute
(119991, Moscow, Leninsky pr-t., 53)*

²*ITMO University,
(197101 St. Petersburg, Kronverksky pr., 49)*

e-mail: rupasovan@lebedev.ru

The interaction of femtosecond laser pulses with dielectrics is of great interest from the point of view of fundamental physics and applications. When intense laser pulses interact with a dielectric, permanent submicron structures can form in the bulk of the material, which arise due to near-field scattering and plasmonics. Based on such modifications, it is possible to record information, create optical elements, waveguides, diffraction gratings, etc.

Keywords: nanostructure, optical elements, laser fabrication.

ФОРМИРОВАНИЕ ВИХРЕВЫХ СТРУКТУР ПЛАЗМОННЫМИ ОПТИЧЕСКИМИ ЭЛЕМЕНТАМИ

А.А. Савельева^{1,2}, Е.С. Козлова^{1,2}

¹*Самарский национальный исследовательский университет имени академика
С.П. Королева*

(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)

²*Инстит систем обработки изображений РАН - филиал ФНИЦ*

"Кристаллография и фотоника" РАН

(443001, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 151)

e-mail: lexis2450@gmail.com

В данной работе представлены результаты формирования оптического вихря плазмонной линзой со спиралевидным отверстием в тонкой металлической пленке. Для проведения численных экспериментов использовался программный пакет FullWAVE, основанный на методе конечных разностей во временной области (FDTD-методе). Результаты могут найти применение в оптических телекоммуникациях.

Ключевые слова: плазмонная линза, оптический вихрь, фокусировка света, узкая фокусировка, FDTD метод.

1. ВВЕДЕНИЕ

Плазмонные линзы – широко известные оптические элементы в современном научном сообществе [1, 2]. Они стали повсеместно применяться в передовых научных исследованиях благодаря уникальным оптическим свойствам. Одно из таких свойств – способность возбуждать и фокусировать поверхностные плазмон-поляритоны, которые представляют собой сильно локализованные поверхностные волны оптического диапазона, распространяющиеся вдоль границы раздела двух сред [2]. Однако, существуют работы, в которых показана возможность фокусировки излучения плазмонными линзами и на расстоянии одной или даже нескольких длин волн [3].

С помощью плазмонных линз можно не только фокусировать излучение, но и формировать оптические вихри [4, 5], которые представляют собой волновую структуру с нулевой амплитудой в центре и с сингулярностью в поперечном распределении фазы (так называемой винтовой дислокацией волнового фронта). Например, в работе [5] продемонстрирована генерация

оптических вихрей с произвольными топологическими зарядами плазмонной линзой с вихревым дизайном. Показано, что поляризационная чувствительность плазмонной вихревой линзы может быть использована для динамического переключения поверхностных плазмонных вихрей с различным топологическим зарядом.

В данной работе предложен дизайн компактной плазмонной линзы из золотой пленки со спиралеобразным отверстием. С помощью численного моделирования исследуется формирование оптических вихрей плазмонной линзой. Для проведения численных экспериментов использовался программный пакет FullWAVE, основанный на методе конечных разностей во временной области (FDTD-методе). Для задания входных распределений пучков, обработки и визуализации полученных результатов использовались авторские программы, написанные на языке MATLAB.

2. ОПИСАНИЕ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

В данной работе предложен дизайн компактной плазмонной линзы из металлической пленки со спиралеобразным отверстием, который представлен на рис. 1. В качестве материала для плазмонной линзы рассматривалось золото. Толщина металлической пленки равна $h_1=100$ нм. Пленка предполагается быть нанесенной на подложку из кварцевого стекла, толщина которого также равна $h_2=100$ нм. Толщина отверстия d составляла 0,63 мкм и 0,315 мкм.

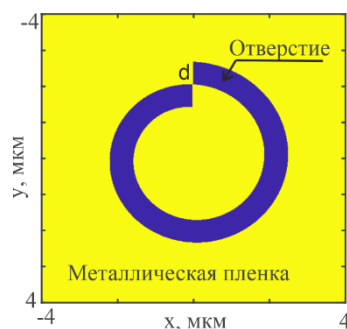


Рис. 1. Дизайн плазмонной линзы со спиралеобразным отверстием

В работе было проведено численное моделирование распространения света через рассматриваемую плазмонную линзу. В качестве падающего излучения рассматривалась плоско-поляризованная ТЕ-волна ($\lambda = 0,532$ мкм, что соответствует зеленому лазеру). Для проведения расчетов применялся FDTD-метод, реализованный в программном пакете FullWAVE. В данной работе использовались следующие параметры моделирования: длина расчетной области по осям x и y $L_x = L_y = 8$ мкм, длина расчетной области по оси z $L_z = 10$ мкм, шаги дискретизации по осям x , y и z $h_x = h_y = 0,015$ мкм, $h_z = 0,007$ мкм, шаг дискретизации по времени $h_t = 0,005$ мкм (используется псевдо-время ct , где c - скорость света в вакууме, t - время). Шаг по псевдо-времени ct был выбран в соответствии с условием Куранта. В ходе анализа результатов моделирования производилось усреднение поля по 10 последним периодам.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В ходе изучения процесса дифракции линейно-поляризованного излучения на предложенном дизайне оптического элемента были рассчитаны компоненты электрического поля, их фазы, а также интенсивность излучения в продольных и поперечных сечениях расчетной области. На рис. 2-4 приведены дифракционные картины для сечений интенсивности, формируемых плазмонными и фазовой линзами.

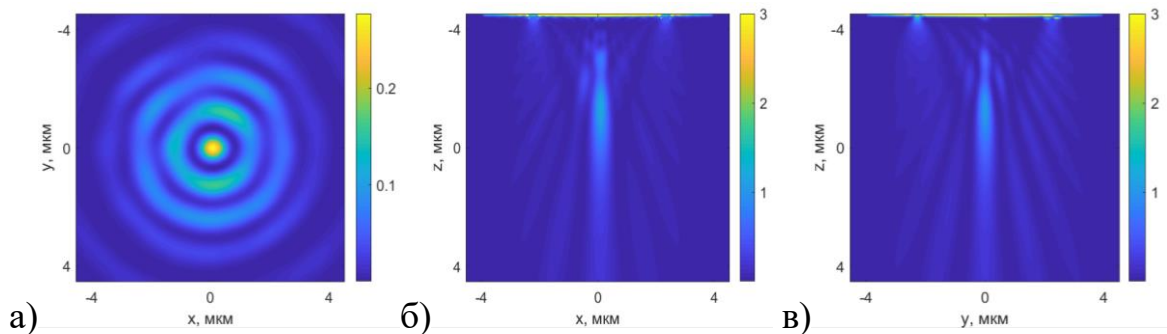


Рис. 2. Интенсивность, полученная при фокусировке плазмонной линзой из золотой пленки, с диаметром отверстия $d_1 = 315$ нм а) на расстоянии 9 мкм в продольном сечении б) $X=0$ и в) $Y=0$

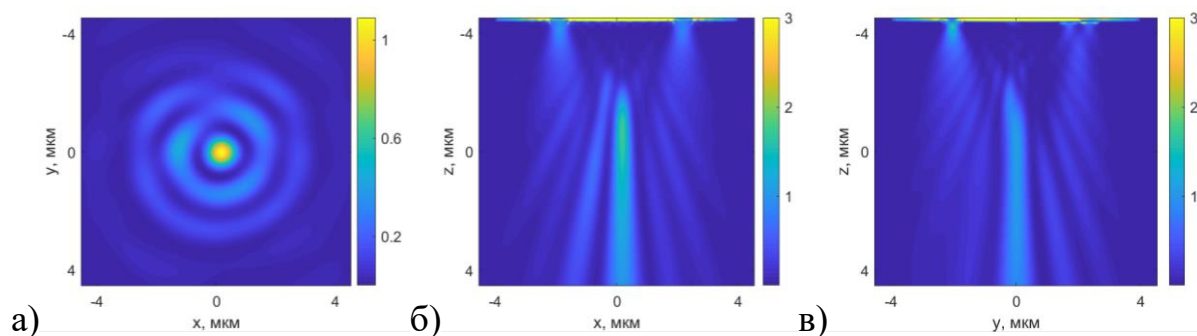


Рис. 3. Интенсивность, полученная при фокусировке плазмонной линзой из золотой пленки, с диаметром отверстия $d_2 = 630$ нм а) на расстоянии 9 мкм, в продольном сечении б) $X=0$ и в) $Y=0$

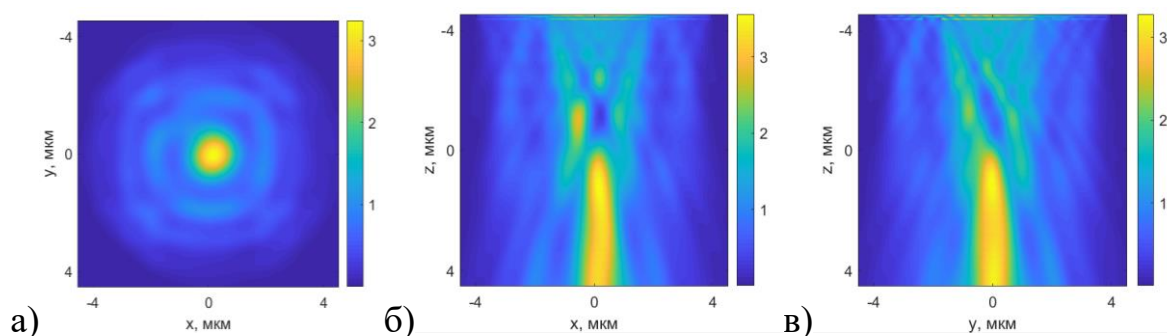


Рис. 4. Интенсивность, полученная при фокусировке линзой из кварцевого стекла, с диаметром отверстия $d_2 = 630$ нм а) на расстоянии 9 мкм в продольном сечении б) $X=0$ и в) $Y=0$

Из рис. 2 - 4 видно, что линзы формируют фокус на расстоянии 9 мкм. При этом интенсивность в фокусе фазового элемента выше, чем у плазмонных линз. Стоит отметить, что пики интенсивности, сформированные амплитудными элементами окружены кольцами, таким образом сформированная структура напоминает пучок Лагерра-Гаусса.

Для подробного анализа полученных распределений были рассчитаны фазы компонент электрического поля. Результаты представлены рис. 5-7.

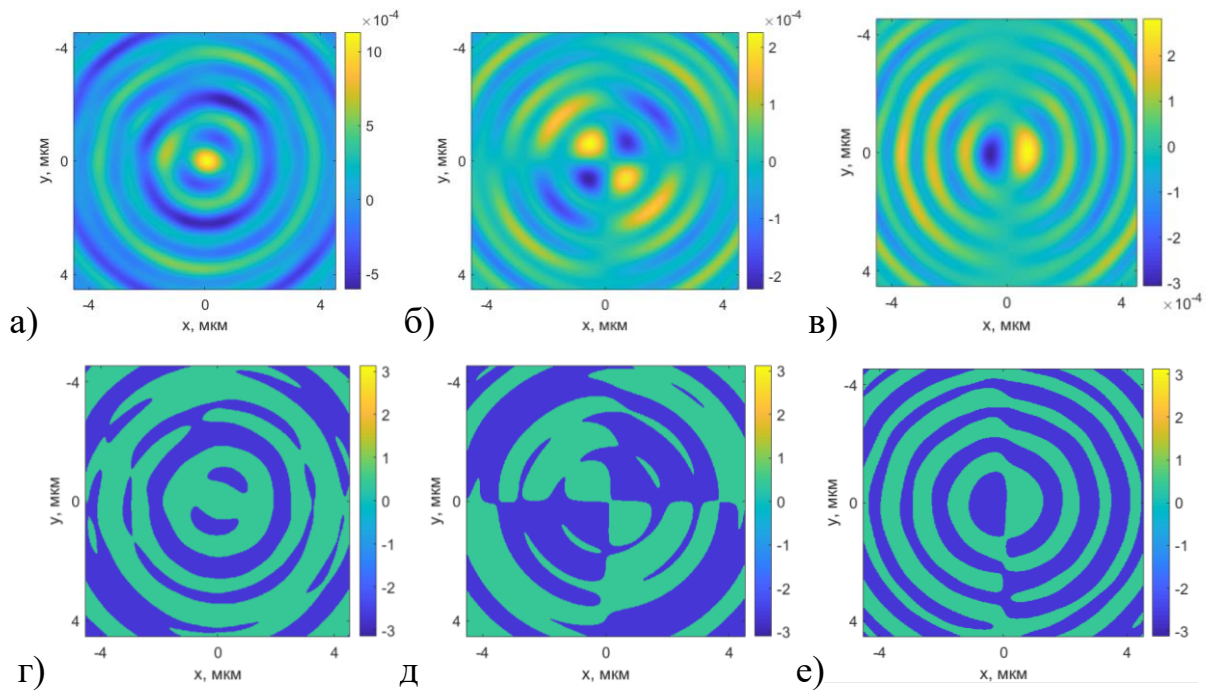


Рис. 5. Компоненты электромагнитного поля E_x (а), E_y (б), E_z (в) и их фазы (г, д, е) полученные при фокусировке плазмонной линзой из золотой пленки, с диаметром отверстия $d_1 = 315$ нм на расстоянии 9 мкм

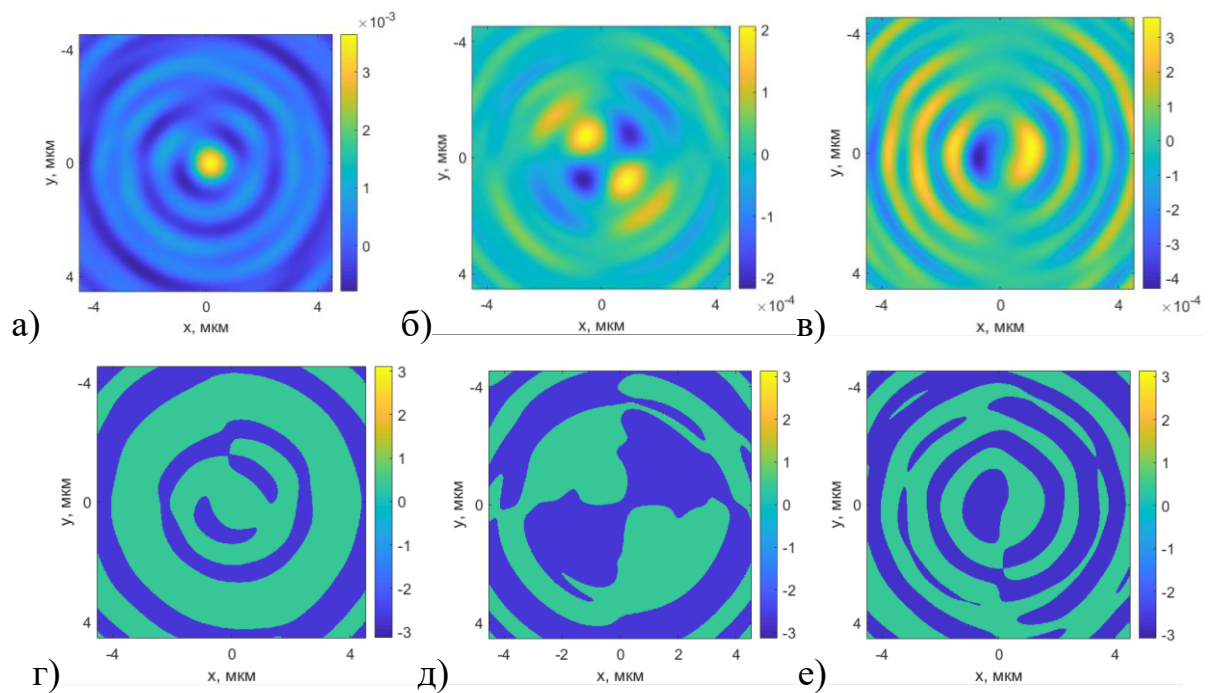


Рис. 6. Компоненты электромагнитного поля E_x (а), E_y (б), E_z (в) и их фазы (г, д, е) полученные при фокусировке плазмонной линзой из золотой пленки, с диаметром отверстия $d_2 = 630$ нм на расстоянии 9 мкм

Из рис. 5-6 видно, что на расстоянии 9 мкм от плазмонных линз со спиралевидным отверстием формируются оптические вихри, распределение интенсивности которых имеет кольцевую структуру с пиком в центре. На рис.

5(д) и 6(д) можно видеть наличие фазовой сингулярности в сформированном пучке (орбитальный угловой момент равен двум). Причем, интенсивность вихря, сформированного золотой плазмонной линзой с диаметром отверстия $d_2 = 630$ нм выше, чем у аналогичной модели с $d_1 = 315$ нм и достигает 1 отн. ед. Данный факт легко объяснить тем, что чем шире отверстие, тем больше света пропускает линза.

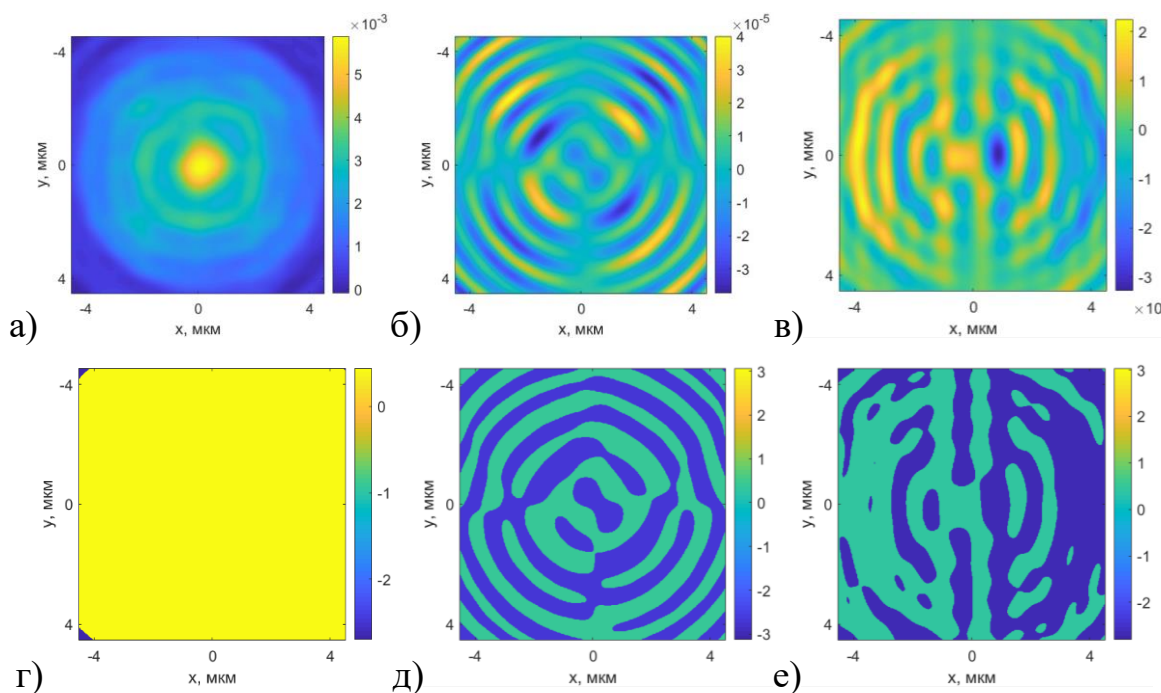


Рис. 7. Компоненты электромагнитного поля E_x (а), E_y (б), E_z (в) и их фазы (г, д, е), полученные при фокусировке плазмонной линзой из кварцевого стекла, с диаметром отверстия $d_2 = 630$ нм на расстоянии 9 мкм

Из рис. 7 видно, что формирование оптического вихря при использовании фазового элемента не наблюдается.

Также нами были рассмотрены сечения интенсивности сформированных электромагнитных полей по пространственным координатам.

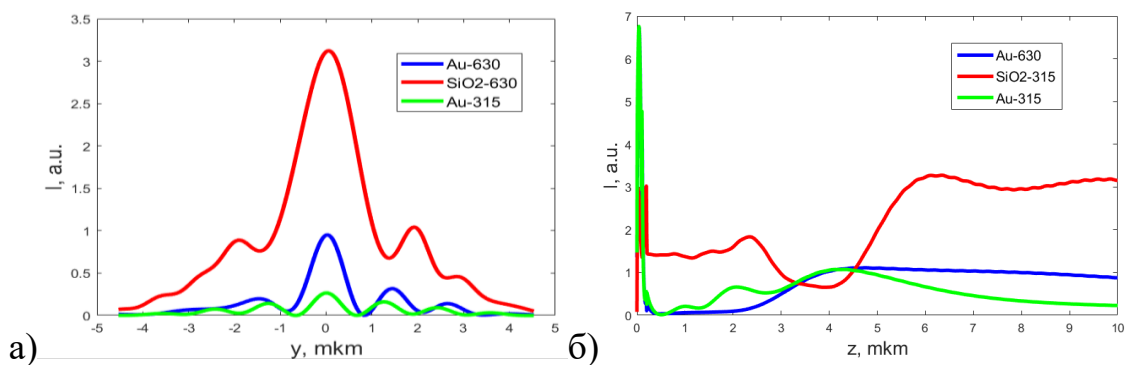


Рис. 8. Поперечное (а) и продольное (б) сечения интенсивности полей, формируемых плазмонными линзами на расстоянии 9 мкм

Можно видеть, что ширина центрального пика по полуспаду интенсивности для линзы с диаметром отверстия 630 нм составляет FWHM = 1,1 мкм (рис. 8(a)).

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведено моделирование формирования оптического вихря на плазмонной линзе со спиралевидным отверстием. Наилучшие результаты показала золотая плазмонная линза с диаметром отверстия $d_2 = 630$ нм, которая сформировала оптический вихрь с $I_{\max} = 1$ отн. ед. и FWHM = 1,1 мкм. Для вихревого пучка, полученным с помощью аналогичного фазового элемента, формирование оптического вихря не наблюдается.

Полученные результаты могут найти свое применение в различных областях, таких как оптические телекоммуникации [6] и оптическое микроманипулирование [7].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Y. Fu, X. Zhou, Plasmonic Lenses: A Review. // *Plasmonics*, 2010, v. 5, p. 287–310.
2. P. Li, Q. Zhang, Y. Li, H. Wang, L. Liu, S. Teng, Plasmonic Lens Based on Rectangular Holes. // *Plasmonics*, 2018, v. 13, p. 1929–1933.
3. E. S. Kozlova, V. V. Kotlyar, A. A. Saveleyeva. Investigation of Plasmonic Lens with Annular Structure for Laser Light Focusing. // 2021 Photonics & Electromagnetics Research Symposium (PIERS), 2021, p. 1094-1100.
4. E. Prinz, G. Spektor, M. Hartelt, A.-K. Mahro, M. Aeschlimann, M. Orenstein Functional Meta Lenses for Compound Plasmonic Vortex Field Generation and Control. // *Nano Lett.*, 2021 v. 21, p. 3941–3946.
5. H. Kim, J. Park, S.-W. Cho, S.-Y. Lee, M. Kang, B. Lee, Synthesis and Dynamic Switching of Surface Plasmon Vortices with Plasmonic Vortex Lens. // *Nano Lett.*, 2010, v. 10(2), p. 529–536.
6. I. B. Djordjevic, M. Arabaci. LDPC-coded orbital angular momentum (OAM) modulation for free-space optical communication. // *Opt. Express.*, 2010, v. 18, p. 24722–24728.
7. N. Bhebhe, P. A. C. Williams, C. Rosales-Guzman, V. Rodriguez-Fajardo, A. Forbes, On-demand vector holographic optical tweezers. // *SPIE*, 2019, v. 11083(1108307), <https://doi.org/10.1117/12.2528709>.

FORMATION OF VORTEX STRUCTURES BY PLASMON OPTICAL ELEMENTS

A.A. Savelyeva¹, E.S. Kozlova^{1,2}

¹*IPSIRAS – branch of the FSRC «Crystallography and Photonics»
RAS (Molodogvardejskaya street 151, Samara, Russia, 443001)*

²*Samara National Research University,
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)
e-mail: lexis2450@gmail.com*

This paper presents the results of the formation of an optical vortex by a plasmonic lens with a spiral hole in a thin silver film. Numerical experiments were performed using the FullWAVE software package based on the finite difference method in the time domain (FDTD method). The results may find application in optical telecommunications.

Keywords: plasmonic lens, optical vortex, light focusing, narrow focus, FDTD-method.

КОМПЛЕКСНЫЙ ПОДХОД К ДИАГНОСТИКЕ И ПОСТОПЕРАЦИОННОМУ МОНИТОРИНГУ НОВООБРАЗОВАНИЙ КОЖИ ЧЕЛОВЕКА IN VIVO

И.А. Серебрякова^{1,2}, Ю.И. Сурков^{1,2}, Я.К. Кузинова³, О.М. Конопацкова³,
В.В. Тучин^{1,2,4}, Э.А. Генина^{1,2}

¹*Саратовский национальный исследовательский государственный
университет им. Н.Г. Чернышевского
(410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83)*

²*Национальный исследовательский Томский государственный
университет
(634050, г. Томск, просп. Ленина, 36)*

³*ФГБОУ ВО Саратовский государственный медицинский университет
имени В.И. Разумовского МЗ России
(410012, г. Саратов, ул. Б. Казачья, 112)*

⁴*Институт проблем точной механики и управления РАН
(410028, г. Саратов, ул. Рабочая, 24)
e-mail: s.izabell2014@gmail.com*

Представлены диагностические возможности мультимодального подхода и перспективы применения в дерматоонкологической практике, включающего высокочастотное ультразвуковое исследование (УЗИ), оптическую когерентную томографию (ОКТ), спектроскопию обратного рассеяния. Данный диагностический метод на основе комплекса специфических маркеров имеет потенциал к дифференцированию различных новообразований кожи на ранней стадии развития, позволяет проводить постоперационный мониторинг для выявления рецидива, и предоставляет дополнительную информацию, полезную для определения тактики лечения.

Ключевые слова: базально-клеточный рак кожи, новообразования. УЗИ, ОКТ, спектроскопия обратного рассеяния.

1. ВВЕДЕНИЕ

Для многих злокачественных новообразований характерна поздняя диагностируемость из-за недостаточной эффективности и чувствительности скрининговых методов в реальном времени. По оценкам Международного фонда исследования рака, в 2020 году в мире было зарегистрировано 18,1 миллиона случаев рака. Базально-клеточный рак кожи (БКРК) – наиболее распространенная немеланоцитарная злокачественная эпителиальная опухоль

кожи, на долю БКРК приходится более 80% от всех немеланоцитарных злокачественных новообразований кожи. [1, 2] Данные статистические показатели являются стимулом для разработки мультимодального подхода позволяющего проводить мониторинг кожного покрова *in vivo*, а также контролировать прогрессирование опухолевого процесса, динамику клинической картины и исход лечения.

Визуальный осмотр новообразований кожи остается абсолютно субъективным методом диагностики и требует подтверждения инструментальными методами, например, гистологическим исследованием инвазивной эксцизионной биопсии образца опухолевой ткани. Однако, биопсия имеет потенциальные осложнения, такие как повышенная чувствительность к анестезии, кровотечение, рубцевание и инфекция. [3] На практике, гистологический процесс занимает много времени. Очевидно, что необходимы новые методы и подходы для быстрого и надежного получения диагностически значимой информации. [4]

Оптические методы в последние годы стали эффективными диагностическими инструментами, позволяющими получать информацию о структурных и биохимических изменениях, сопровождающих развитие патологии в тканях кожи, что является необходимым для своевременного диагноза и терапии новообразований в клинических условиях [5 – 8]. Целью данного исследования является повышение информативности за счёт комбинирования нескольких оптических методов и высокочастотного УЗИ кожи.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

В исследовании приняли участие 20 добровольцев (42 - 80 лет) обоих полов со слабо пигментированной кожей с диагнозом БКРК или доброкачественное новообразование (ДН), подписавшие информированное согласие на проведение исследования. В качестве объекта исследования были выбраны области с новообразованиями и близлежащие здоровые и/или симметрично расположенные очагам поражения участки кожи для последующего сравнения и оценки отклонения от нормы. Нормой принимался визуально здоровый участок кожи. Сравнение данных, полученных от новообразования и от здорового участка кожи, позволяет не учитывать индивидуальные особенности кожи пациентов. Двое из добровольцев подверглись исследованию до и после лучевой терапии (ЛТ) БКРК (аппарат Wolf T-200).

В начале исследования проводился визуальный осмотр добровольца врачом онкологом в ЧУЗ «Клиническая больница «РЖД-Медицина» города Саратов. Окончательный диагноз ставился врачом по результатам цитологического исследования на базе ГУЗ "Областной онкологический диспансер №2». Высокочастотное УЗИ осуществлялось с помощью аппарата DUB SkinScanner (trmtabernapromedicum GmbH, Германия) с двумя зондами работающими на центральных частотах 33 и 75 МГц с глубиной сканирования 5.0 и 3.2 мм и латеральным разрешением 48 и 21 мкм, соответственно. ОКТ В-сканы были получены при помощи спектрального ОКТ GAN930V2-BU (Thorlabs, США), работающего на центральной длине волны 930 нм с аксиальным и латеральным разрешением 5.34 и 7.32 мкм, соответственно, и глубиной сканирования до 2 мм. Для размеров новообразования, превышающих ширину окна ОКТ зондирования, был разработан двухэтапный метод регистрации структуры образования. Первый этап заключался в регистрации В-сканов в основном объеме новообразования, на втором этапе исследовались границы образования.

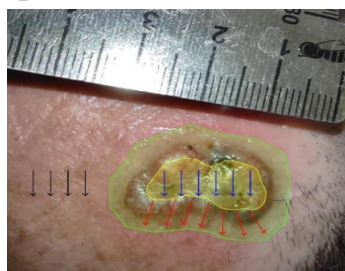


Рис. 1. Желтым цветом обозначена область основного объема новообразования; зеленым цветом - область визуальных границ новообразования; синими стрелками обозначены плоскости зондирования основного объема новообразования; красными - поперечных границ новообразований, черными - визуально здорового участка

С помощью спектрометров USB4000-UV-VIS и NIRQUEST и волоконно-оптических зондов QR400-7-VIS-NIR (Ocean Optics, США) измерялись коэффициенты диффузного отражения в диапазоне длин волн 400 – 2150 нм на исследуемых участках кожи.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

На ОКТ изображениях БКРК и ДН в сравнении со здоровой кожей (рис. 2) наблюдается неоднородное увеличение толщины эпидермиса до двух раз, контраст границы эпидермис-дерма значительно снижается, в некоторых случаях граница между эпидермисом и дермой неразличима, кроме того,

наблюдается увеличение числа оптических неоднородностей, часть из которых можно отнести к микрососудам крови и лимфы, а другую часть к областям некроза и, возможно, локальным участкам диссоциированного коллагена вследствие повышенной активности коллагеназы. Диаметр сосудов может быть увеличен в несколько раз, по сравнению с интактной кожей. Наблюдается неоднородность в коэффициенте рассеяния и структуры эпидермиса и дермы по всему объему поражения. Граница новообразования чаще всего располагается ниже глубины зондирования ОКТ. Поверхность чаще всего рыхлая, часто имеется корочка, особенно часто в случае БКРК. Латеральные границы новообразования часто хорошо различимы от здоровой кожи.

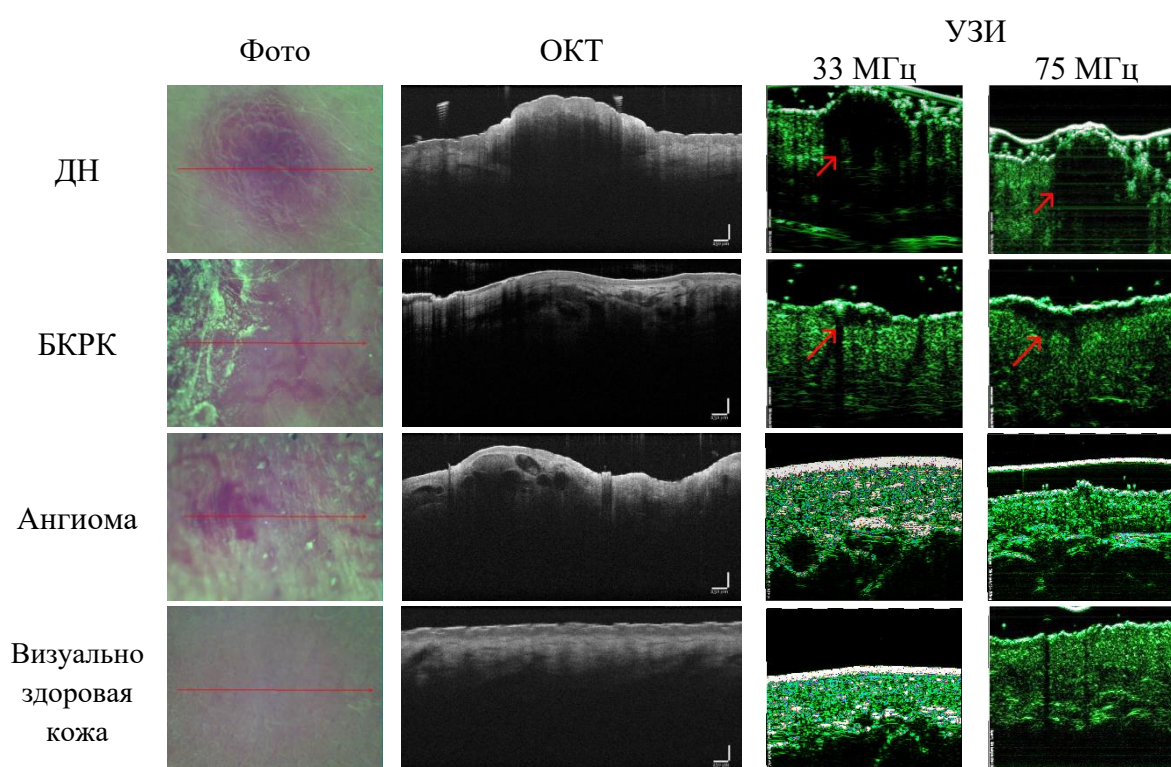


Рис.2. Макрофотографии, ОКТ и УЗИ изображения новообразований и визуальной здоровой кожи

Специфические различия между ОКТ изображениями БКРК и ДН не наблюдались, однако можно отметить, что общая однородность сигнала в случае ДН выше, чем от БКРК, но ниже по сравнению со здоровой кожей. Отличительными признаками ангиомы на изображениях ОКТ и УЗИ является большее число крупных сосудов локализирующихся близко к поверхности кожи. По УЗИ изображениям БКРК и ДН в сравнении со здоровой кожей эхогенность в области образования равномерно снижена, структура акустически однородная, границы часто определяются. В сравнении УЗИ ДН

и БКРК специфические различия отсутствовали, однако часто наблюдались границы ровные и четкие в случае ДН.

На УЗ сканах (рис. 3) спустя 3 месяца после ЛТ не наблюдаются акустические неоднородности, связанные с новообразованием, на ОКТ сканах наблюдается увеличение контраста между эпидермисом и дермой, толщина эпидермиса в области исследования варьируется в пределах значения нормы для здорового участка, дерма имеет более упорядоченную структуру с меньшим количеством оптических неоднородностей.

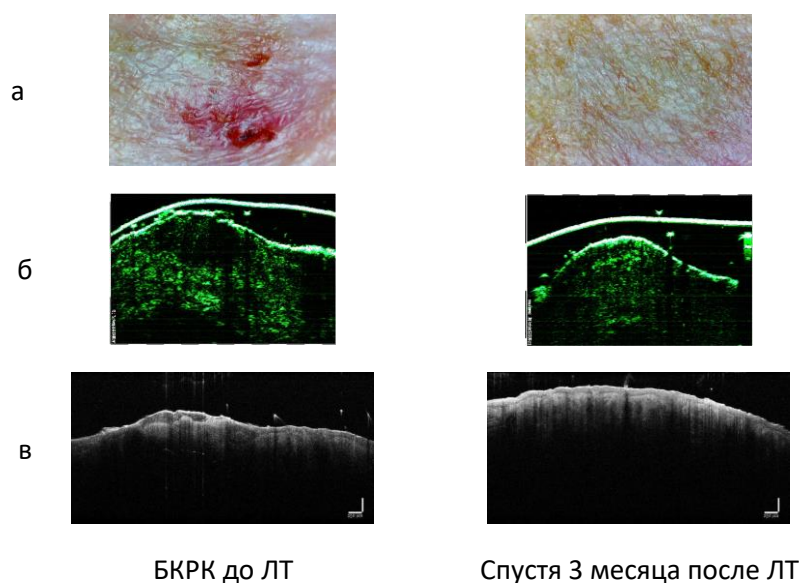


Рис. 3. а) Макрофотографии, б) УЗ, в) ОКТ изображения БКРК добровольца до ближнефокусной ЛТ и спустя 3 месяца после ЛТ.

На рисунке 4а приведены примеры спектров коэффициента диффузного отражения для трех добровольцев с разным диагнозом. Можно заметить, чувствительность спектроскопии диффузного отражения к различным морфофункциональным состояниям кожи. На рисунке 4б представлены эффективные спектры диффузного отражения для двух добровольцев с диагнозом БКРК до близкофокусной ЛТ и спустя 1,5 и 3 месяца после ЛТ. Можно заметить, что после ЛТ эффективные спектры диффузного отражения имеют тенденцию к выравниванию и уменьшению выраженности пиков на длинах волн поглощения гемоглобина. У второго добровольца спустя 3 месяца наблюдается более ровная форма эффективного спектра диффузного отражения относительно первого добровольца. Это можно объяснить разным временем реабилитации и/или индивидуальными различиями в скорости регенерации кожи.

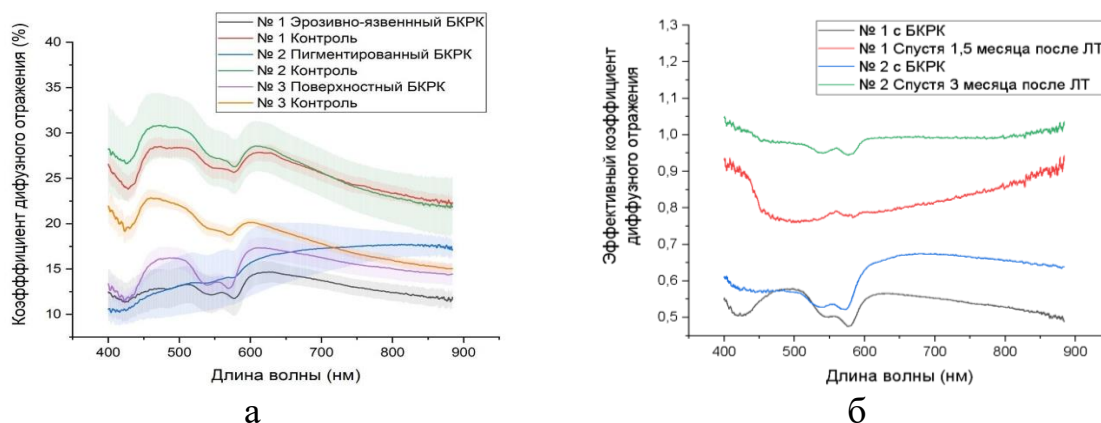


Рис. 4. а) Спектры коэффициента диффузного отражения для трех добровольцев с разным диагнозом, б) Эффективные спектры диффузного отражения для двух добровольцев до и после ближнефокусной ЛТ

На рисунке 4а можно заметить, несколько спектральных особенностей, характерных для различных типов БКРК и здоровой кожи [9]: 1) различный наклон спектров в диапазоне длин волн от 600 до 800 нм; 2) выраженность пиков поглощения на длинах волн 541 и 577 нм ассоциированных с поглощением гемоглобина; 3) выраженность пика на длине волны 510 нм связанного с минимумом поглощения оксигенированного гемоглобина. На основе данных различий были рассчитаны коэффициенты, позволяющие дифференцировать различные типы БКРК и ДН.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ спектральных данных показал уменьшение коэффициента диффузного рассеяния кожи на исследуемом участке, по сравнению с интактной кожей. Также продемонстрировано изменение наклона диффузного спектра отражения относительно визуально здоровой кожи. Границы пораженного участка были оценены с помощью УЗИ, а внутренняя структура визуализирована с помощью ОКТ. Коэффициент диффузного отражения позволил извлечь информацию о морфофункциональном состоянии исследуемых областей. Отмечены специфические характеристики различных форм новообразований на ОКТ и УЗИ изображениях.

Данная работа поддержана грантами «Разработка оптических технологий для биомедицинской визуализации, диагностики и лазерной терапии // грант РФФИ и ННФИ. – февраль 2021 – февраль 2024. – № 20-52-56005» и «Разработка методов скрининговой неинвазивной диагностики вирусных и бактериальных респираторных инфекций с использованием лазерной спектроскопии и методов искусственного интеллекта // грант Правительства Российской Федерации – июнь 2021 – июнь 2023. – № 075-15-2021-615».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sung H., Ferlay J., Siegel R.L., Laversanne M., Soerjomataram I., Jemal A., Bray F. Global cancer statistics 2020: GLOBOCAN estimates of incidence and mortality worldwide for 36 cancers in 185 countries // *CA Cancer J Clin.* 2021; 71: 209- 249.
2. Cameron M. C., Lee E., Hibler B. P., Barker C. A., Mori S., Cordova M., Nehal K. S., Rossi A. M. Basal cell carcinoma: Epidemiology; pathophysiology; clinical and histological subtypes; and disease associations // *Journal of the American Academy of Dermatology*, Volume 80, Issue 2, 2019, pp. 303-317
3. Nischal U., Nischal K. C., Khopkar U. Techniques of skin biopsy and practical considerations // *Journal of cutaneous and aesthetic surgery.* – 2008. – Т. 1. – №. 2. – С. 107.
4. Kent MN, Olsen TG, Feeser TA, Tesno KC, Moad JC, Conroy MP, Kendrick MJ, Stephenson SR, Murchland MR, Khan AU, Peacock EA, Brumfiel A, Bottomley MA (2017) Diagnostic accuracy of virtual pathology vs traditional microscopy in a large dermatopathology study. *JAMA Dermatol* 153:1285–1291
5. Sterenborg H. et al. In vivo fluorescence spectroscopy and imaging of human skin tumours // *Lasers in Medical Science.* – 1994. – Vol. 9. – №. 3. – P. 191-201.
6. Sinichkin Y. P. et al. In vivo fluorescence spectroscopy of the human skin: experiments and models // *Journal of Biomedical Optics.* – 1998. – Vol. 3. – №. 2. – P. 201-211.
7. Dawson J. B. et al. A theoretical and experimental study of light absorption and scattering by in vivo skin // *Physics in Medicine & Biology.* – 1980. – Vol. 25. – №. 4. – P. 695.
8. Hibst R., Kaufmann R. Fundamentals of pulsed UV and mid-infrared laser skin ablation // *Lasers in dermatology.* – Springer, Berlin, Heidelberg, 1991. – P. 102-115.
9. Borisova E. G., Troyanova P. Diagnostics of Pigmented Skin Tumors Based on Light-Induced Autofluorescence and Diffuse Reflectance Spectroscopy // *Multimodal Optical Diagnostics of Cancer.* – Springer, Cham, 2020. – P. 245-270.

COMPLEX APPROACH TO THE DIAGNOSTICS AND POSTOPERATIVE MONITORING OF IN VIVO HUMAN SKIN LESIONS

I.A. Serebryakova^{1,2}, Yu.I. Surkov^{1,2}, E.A. Genina^{1,2}, Ya.K. Kuzinova³, O.M.
Konopatskova³, V.V. Tuchin^{1,2,4}

*¹Saratov National Research State
University named after N.G. Chernyshevsky
(410012, Saratov, st.Astrakhanskaya, 83)*

*²National Research Tomsk State
university
(634050, Tomsk, Lenin Avenue, 36)*

*³Saratov State Medical University named after V.I. Razumovsky Ministry of Health
of Russia*

(410012, Saratov, B. Kazachyast. 112)

*⁴Institute for Problems of Precision Mechanics and Control, Russian Academy of
Sciences*

(410028, Saratov, Rabochaya str., 24)

e-mail: s.izabell2014@gmail.com

The diagnostic possibilities of the multimodal approach and the prospects of application in dermatooncological practice, including high-frequency ultrasound (US), optical coherence tomography (OCT), backscattering spectroscopy, are presented. This diagnostic method based on a complex of special markers has the potential to differentiate various skin neoplasms at an early stage of development, allows postoperative monitoring to detect relapse, and provides additional information useful for determining treatment tactics

Keywords: basal cell skin cancer, neoplasms. US, OCT, backscattering spectroscopy.

ВЛИЯНИЕ РЕПЕРФУЗИИ ХИМУСА НА ПАРАМЕТРЫ МИКРОСТРУКТУРЫ И МЕТАБОЛИЗМА ТОНКОЙ КИШКИ ПО ДАНЫМ ОПТИЧЕСКОГО БИОИМИДЖИНГА

М.А. Сизов¹, М.Г. Рябков¹, Е.Б. Киселёва¹, Е.Л. Бедерина¹

¹*Приволжский исследовательский медицинский университет*

(пл. Минина, 10/1, Н. Новгород, 603005)

e-mail: sizov.mikhail2015@yandex.ru

Цель нашего исследования — это изучить влияние хирургической техники на параметры микроциркуляции и микроструктуры в приводящем и отводящем концах кишки после ее экстренной резекции по поводу острой интестинальной ишемии с помощью мультимодальной оптической когерентной томографии (ММ ОКТ). Исследование проведено на трех группах крыс-самцов линии Wistar. Всем животным моделировали острую окклюзивную артериальную ишемию тонкой кишки, через 60 мин резецировали ишемизированный нежизнеспособный участок кишки и завершали операцию выведением стомы, обструктивной резекцией или шунтированием приводящего и отводящего концов тонкой кишки. Через 2 суток выполняли релапаротомию и формирование анастомоза. С использованием метода ММ ОКТ на каждом этапе хирургического вмешательства изучали микроструктуру кишечной стенки и интрамуральное кровообращение со стороны серозной оболочки. Данные ММ ОКТ, полученные в терминальных отделах кишечника сразу после резекции и через 2 суток, сравнивали между исследуемыми группами, а также с данными до моделирования ишемии. Все резецированные участки кишки подвергали гистологическому исследованию. Полученные ММ ОКТ-данные сопоставляли с результатами гистологического и прижизненного макроскопического исследования. В результате изучения микроструктуры кишечной стенки *in vivo* методом ОКТ установлено, что при стомировании и обструктивной резекции на ОКТ-изображениях наблюдались признаки отека тканей и деструктивных изменений в слизистой оболочке, подтвержденные гистологически, в то время как при шунтировании изменения по сравнению с нормой были минимальными. По данным ОКА было установлено, что на 2-е сутки при стомировании в приводящем и отводящем концах кишки произошло заметное выпадение большей части кровеносных сосудов мелкого и среднего диаметра, визуализировались в основном крупные артерии и вены. Динамика показателя L, рассчитанного по ОКА-изображениям и характеризующего общую длину интрамуральной перфузируемой сосудистой сети, показала статистически значимое снижение значений в культях кишки при

стомировании: 12,18 [10,40; 14,20] мкм — в приводящем и 10,67 [7,98; 13,05] мкм — в отводящем отделах по сравнению со значениями показателя до ишемии — 18,90 [17,98; 19,73] и 18,74 [17,46; 19,90] мкм соответственно ($p=0,0001$). При обструктивной резекции статистически значимые различия в значениях параметра L обнаружены только для отводящего отдела кишки: 16,39 [12,37; 18,10] мкм по сравнению с показателем до ишемии — 18,74 [17,46; 19,90] мкм ($p=0,041$). После шунтирования статистически значимых изменений показателя L относительно нормы не произошло. При использовании ММ ОКТ установлено, что наименее выраженные и наиболее сбалансированные изменения происходят в приводящем и отводящем концах кишки в случае ее шунтирования.

Ключевые слова: оптическая когерентная томография (ММ ОКТ), острая интестинальная ишемия, тонкая кишка.

1. ВВЕДЕНИЕ

После экстренной резекции ишемизированной кишки рассматривают, как правило, три варианта завершения операции: 1) выведение энтеростомы; 2) обструктивную резекцию кишки с погружением ее концов в брюшную полость; 3) раннее восстановление пассажа по кишечнику (первичный анастомоз). Каждый из вариантов имеет преимущества и недостатки. Основным риском первичного анастомоза является несостоятельность швов, которая увеличивает вероятность летального исхода до 65–95% (Хунафин С.Н., 2019). Осложнения после формирования стомы (ишемия, некроз стомированной кишки, перистомальное гнойно-некротическое поражение брюшной стенки, электролитно-жидкостной дисбаланс) часто усугубляют состояние пациента [2-5]. Обструктивная резекция кишки с погружением ее концов в брюшную полость сопряжена с блокированием химуса в приводящем отделе кишечника. Вопрос оптимального способа завершения этапа резекции кишки при острой интестинальной ишемии не решен [6].

Проблема выбора оптимального способа завершения операции резекции ишемизированной кишки может быть решена, если будут существенно расширены знания о патофизиологических процессах в стенке кишки после того или иного оперативного приема. Оптическая когерентная томография потенциально способна решить эту задачу [7, 8]. Технические характеристики метода позволяют оценивать микроциркуляцию и микроструктуру тканей на глубине до 1,5 мм без введения контраста в кровоток. Однако в настоящее время исследование кишечника с помощью ОКТ у крупных лабораторных

животных и у человека затруднено: неприемлемо высок риск получения неинформативных из-за артефактов движения ОКТ-изображений.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

2.1. На рисунке 1, разработано и применено в исследовании устройство контролируемого по усилию и времени прижима мягких тканей к рабочей поверхности зонда оптической когерентной томографии.

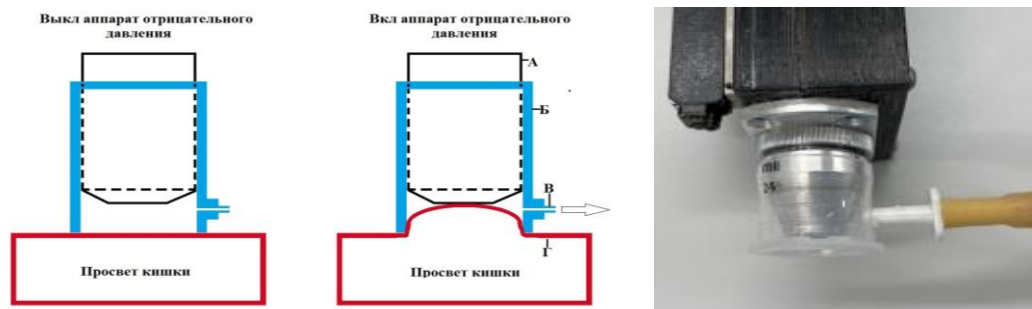


Рис. 1. Схема и фото устройства для фиксации тканей: а) зонд ОКТ; б) устройство закрепленное снаружи от зонда; в) клапан для создания отрицательного давления; г) кишечная стенка

4.2 Экспериментальное исследование было разделено на 2 серии и выполнено: 1) на крысах Wistar массой от 270 до 435 г (самцы, $n=30$); 2) на минипигах массой от 20 до 25 кг ($n=8$). Работа выполнена в соответствии с этическими принципами, установленными Европейской конвенцией по защите позвоночных животных, используемых для экспериментальных и других научных целей и одобрена Этическим комитетом Приволжского исследовательского медицинского университета. На рисунке 2, изображена первая серия эксперимента по поиску оптимального способа обработки культи кишки после ее экстренной резекции. Крыс разделили на три группы ($n=10$ в каждой): группа 1 — выведение приводящего отдела кишки на стому; группа 2 — обструктивная резекция кишки, приводящий и отводящий отделы кишки заглушены; группа 3 — шунтирование кишки. В группе 1 приводящий отдел кишки выводили на переднюю брюшную стенку в виде концевой энтеростомы. В группе 2 приводящий и отводящий отделы кишки обтурировали. В группе 3 между приводящим и отводящим отделами кишки устанавливали полихлорвиниловый шунт диаметром 5 мм. Во всех группах после обработки культи лапаротомную рану ушивали.

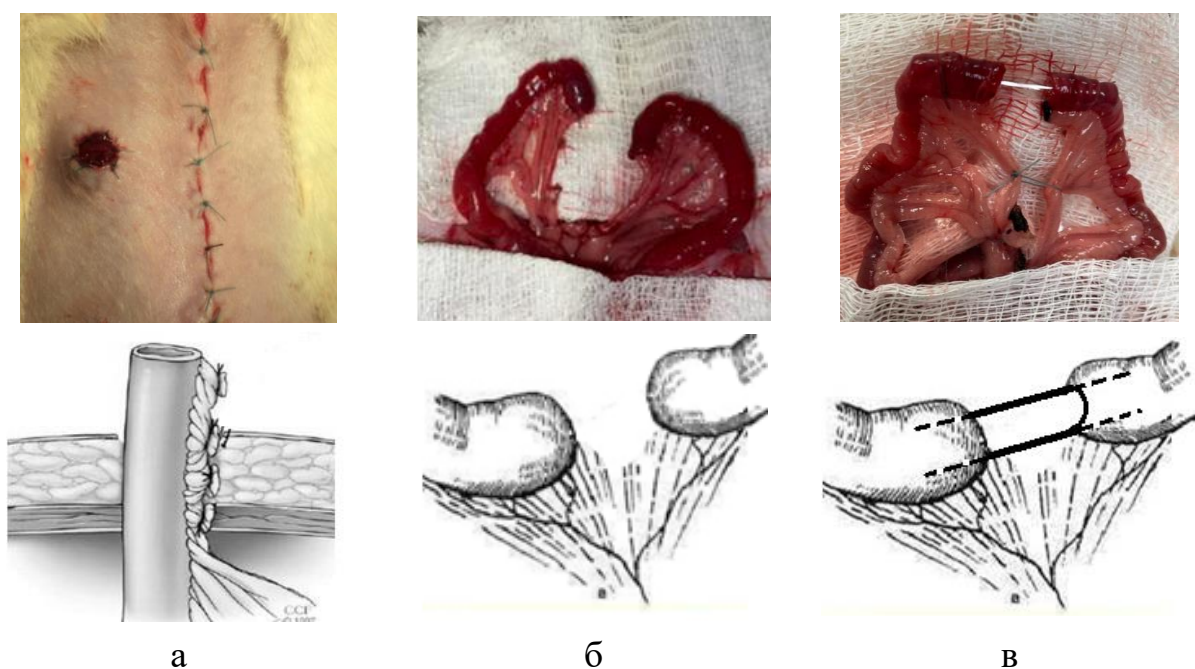


Рис. 2. Способы обработки культи кишки после резекции в группах исследования (фото и схема): а) энтеростома; б) обструктивная резекция кишки; в) шунтирование кишки

Через 48 часов после завершения первого этапа исследования под наркозом проводили релапаротомию, выводили в рану приводящий и отводящий отделы кишки. Микроциркуляцию в тканях кишечной стенки оценивали с помощью ММ ОКТ.

4.2 На рисунке 3 изображено, разработанное и запатентованное устройство для временного шунтирования поврежденной тонкой кишки.

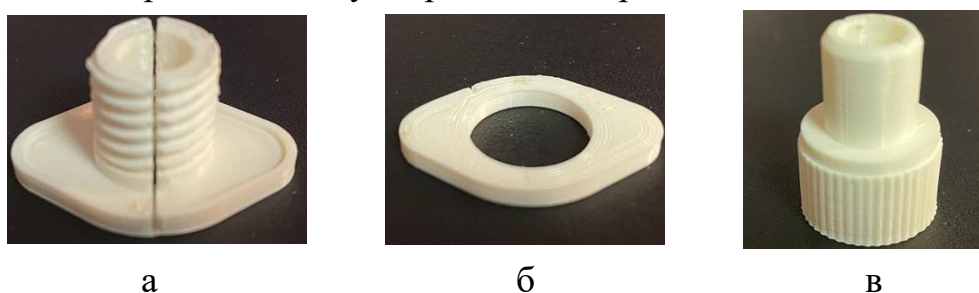


Рис. 3. Устройство для временного шунтирования поврежденной тонкой кишки: а) скрепленная у основания тонкой мембранной две подвижные части площадки; б) шайба; в) прижимная гайка

На рисунке 4 представлена вторая серия экспериментов, выполненная на 8 минипигах-самцах весом 20-25 кг. Животным производили срединную лапаротомию, в рану выводили участок тонкой кишки. Моделировали острую интестинальную ишемию перевязкой мезентериальных сосудов и резецировали нежизнеспособный участок кишечника. Разработанное устройство устанавливали на приводящий и отводящий участки кишки в

качестве энтеросунта. Оценивали герметичность устройства в условиях различного уровня внутрикишечного давления, а также безопасность устройства для кишечной стенки.

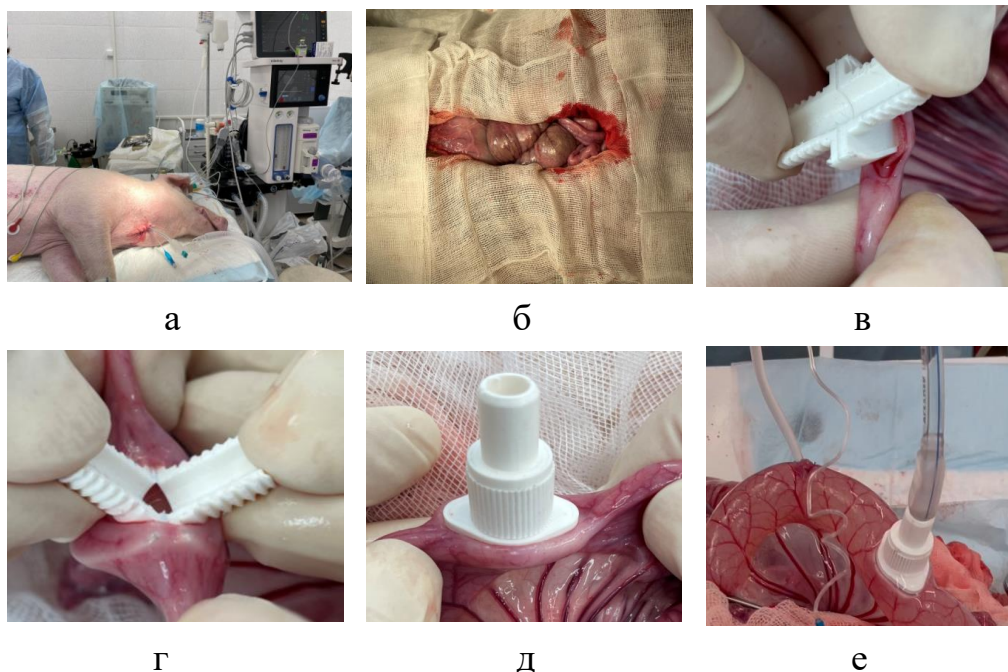


Рис. 4. Использование устройства на минипигах: а) интубационный наркоз; б) лапаротомия; в) введение устройства в тонкую кишку; г) установка устройства; д) фиксация в кишке; е) проверка герметичности.

4.3 В клинике разработанные составляющие лечебно-диагностической технологии (устройства для повышения информативности ОКТ-изображений, для шунтирования поврежденной тонкой кишки) были апробированы в лечении 4 пациентов со стомированной тонкой кишкой.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

На рисунке 5, предложено оригинальное устройство, позволяющее создавать отрицательное давление между ОКТ-зондом и тканью для достижения неподвижности ткани во время контактного ОКТ-сканирования. Полученные с его помощью результаты изучения микроструктуры кишечной стенки *in vivo* методом ОКТ показали существенные отличия в состоянии микроструктуры кишечной стенки после различных вариантов операций.

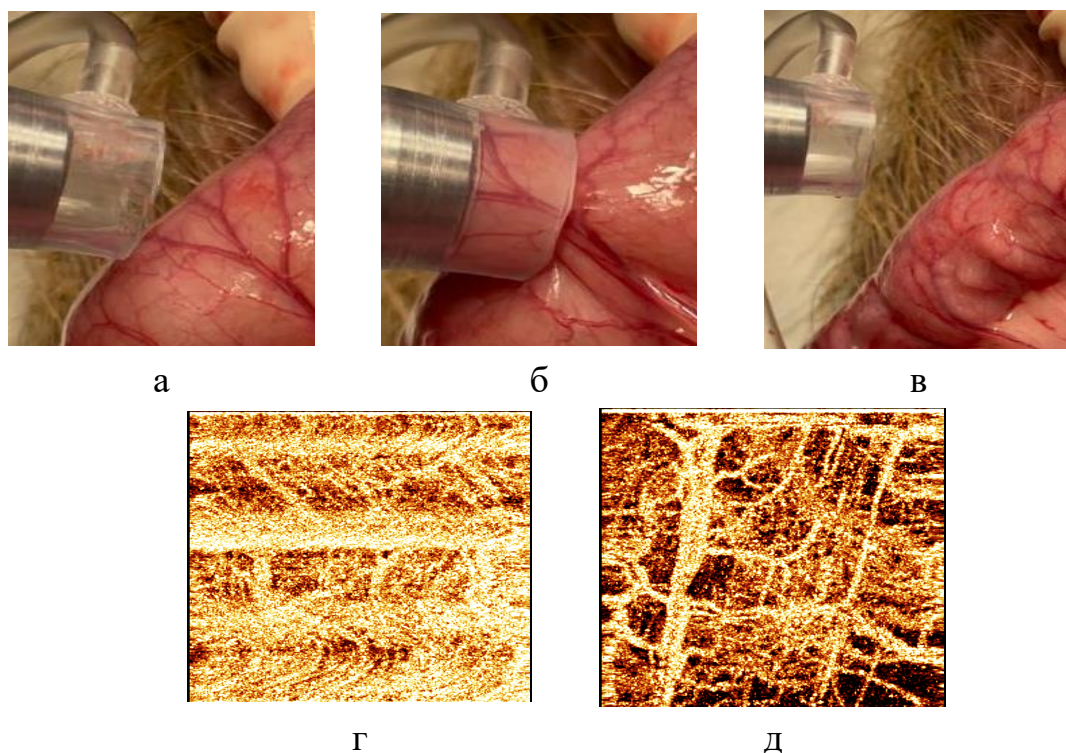


Рис. 5. Применение устройства для повышения информативности ОКТ-изображений на минипигах: а) до использования; б) при использовании устройства; в) кишечная стенка после исследования; г) исследование микроциркуляции без устройства (артефакты движения на ОКТ-ангиограмме); д) ОКТ-ангиограмма в момент использования устройства.

После стомирования кишки (группа 1) показатель L (общая длина перфузируемых интрамуральных сосудов в поле зрения) статистически значимо ($p=0,0001$) снизился по сравнению с исходным уровнем и в приводящем, и в отводящем отделах кишки и составил 12,18 [10,40; 14,20] и 10,67 [7,98; 13,05] мкм, соответственно. При заглушенных и погруженных в брюшную полость концов кишки снижение перфузии относительно исходного показателя произошло лишь в отводящем отделе кишки (показатель L составил 16,39 [12,37; 18,10] мкм, $p=0,041$). После шунтирования (группа 3) статистически значимых изменений показателя L относительно нормы в приводящем и отводящем отделах кишки не выявлено. Учитывая полученные данные, установлено, что шунтирование кишки является оптимальным вариантом завершения этапа резекции.

Во второй серии экспериментов апробировано устройство для шунтирования кишки (Патент РФ № 2021116311 от 04.06.2021 "Способ временного дренирования поврежденной тонкой кишки и устройство для его осуществления"). Во всех случаях подтверждены возможности

устройства, необходимые для безопасного и эффективного шунтирования кишки в эксперименте.

На рисунке 6 представлена серия клинических исследований стомированного кишечника у пациентов хирургического стационара. ОКТ-изображения, полученные прижатием поверхности ОКТ-зонда к ткани, содержали значительное количество ярких горизонтальных полос - артефактов движения различного происхождения, что препятствовало визуализации кровеносных сосудов. Использование разработанного вакуумного фиксатора позволило существенно увеличить качество ОКТ-изображений.

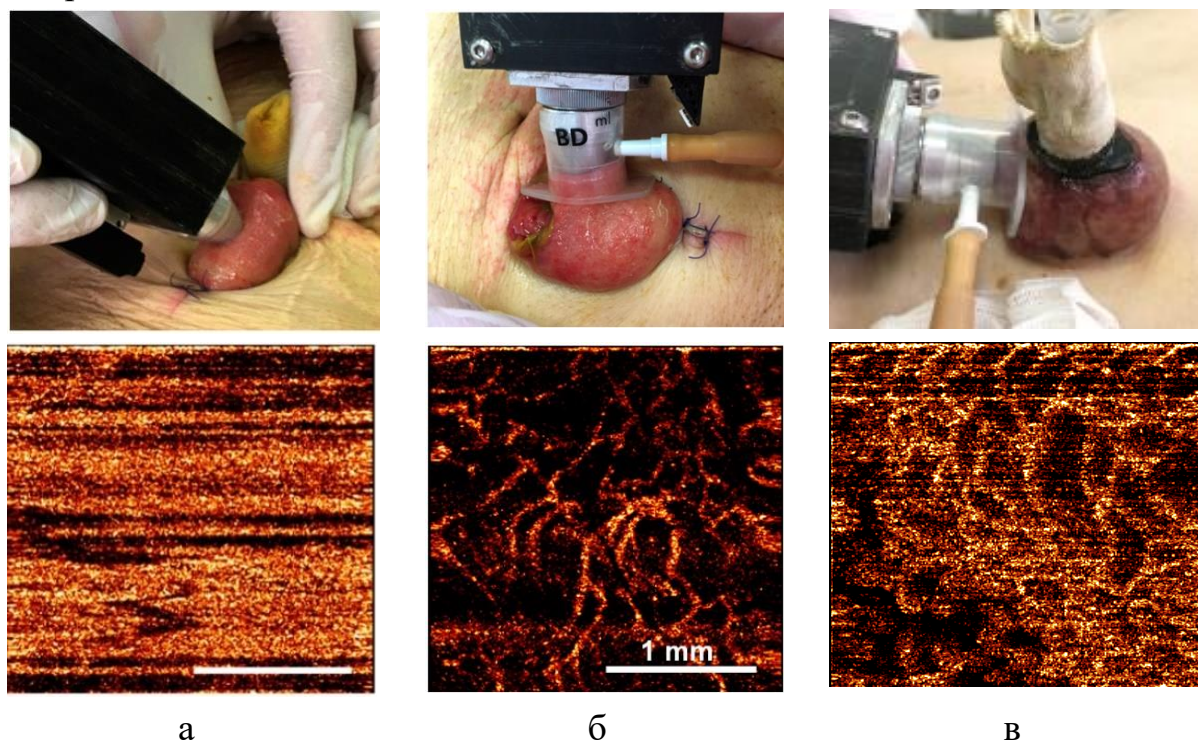


Рис. 6. Исследование микроциркуляции кишечной стенки энтеростомы: а) простое прижатие поверхности ОКТ-зонда к ткани (содержит артефакты движения); б и в) применение вакуум аспиратора для фиксации тканей к ОКТ-зонду.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработанные устройства для снижения количества артефактов движения при ОКТ кишечника позволили получать объективные данные о микроциркуляции в стенке ишемизированной кишки после ее резекции. Устройство для экстренного шунтирования кишечника после резекции его поврежденной части эффективно, безопасно и позволяет осуществить раннее восстановление непрерывности кишечного тракта без формирования первичного анастомоза и без риска развития осложнений, ассоциированных с выведением энтеростомы.

На основе устройств разработана технология интраоперационной ОКТ-диагностики параметров стенки ишемизированной кишки для выбора способа завершения операции после ее экстренной резекции. По данным экспериментальных и клинических исследований, стомирование кишки сопровождается ишемическими явлениями и снижением тонуса сохранившихся перфузируемых сосудов, выраженным отеком и частичным разрушением слизистого слоя и мезотелия серозной оболочки. Обструктивная резекция кишки с погружением ее концов в брюшную полость ассоциирована с менее значимыми нарушениями микроциркуляции, однако сопряжена с неравномерно выраженными дисциркуляторными явлениями в приводящем и отводящем отделах кишки и с нарушением микроструктуры кишечной стенки. Наименее выраженные и наиболее сбалансированные изменения происходят в приводящем и отводящем концах кишки в случае ее шунтирования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Хунафин С.Н., Кунафин М.С., Абдуллина Г.А. и др. Актуальные вопросы диагностики и лечения больных с острым тромбозом мезентериальных сосудов. В сборнике: *Фундаментальная наука и технологии - перспективные разработки. Материалы XVIII международной научно-практической конференции.* 2019. С. 12-14;
2. Sun S.L., Ding W.W., Liu B.C. et al. The application of intestinal stomas in mesenteric ischemia. *Zhonghua Wai Ke Za Zhi.* 2018 Aug 1;56(8):603-606. doi: 10.3760/cma.j.issn.0529-5815.2018.08.010;
3. Malik T.A.M., Lee M.J. The incidence of stoma related morbidity - a systematic review of randomised controlled trials. *Ann R Coll Surg Engl.* 2018 Sep; 100(7): 501- 508 (doi: 10.1308/rcsann.2018.0126);
4. Steinhagen E., Colwell J., Lisa M. Cannon. Intestinal Stomas— Postoperative Stoma Care and Peristomal Skin Complications. *Clin Colon Rectal Surg.* 2017

- Jul; 30(3): 184-192. Published online 2017 May 22 (doi: 10.1055/s-0037-1598159);
5. Yong-Ming Yu, Fu-Ji Lai, Chun Feng et al. Pyoderma gangrenosum around an ileostoma. *Medicine (Baltimore)*. 2018 Nov; 97(48): e13415 (doi: 10.1097/MD.00000000000013415);
 6. Ярощук С.А., Баранов А.И., Каташева Л.Ю. и др. Некоторые аспекты лечения больных с острой мезентериальной ишемией осложненной некрозом кишки и перитонитом. *Вопросы реконструктивной и пластической хирургии*. 2019. Т. 22. № 1 (68). С. 24-30;
 7. Киселева Е.Б., Рябков М.Г., Сизов М.А. и др. Влияние хирургической техники на микроструктуру и микроциркуляцию культи тонкой кишки при отсроченном наложении анастомоза по данным мультимодальной ОКТ. *Современные технологии в медицине*. 2021. Т. 13. № 4. С. 36-47;
 8. Рябков М.Г., Киселева Е.Б., Гладкова Н.Д. и др. Роль дисфункции интрамурального сосудистого русла в развитии ишемического некроза тонкой кишки. *Новости хирургии*. 2018. Т. 26. № 2. С. 135-145.

THE EFFECT OF CHYME REPERFUSION ON THE PARAMETERS OF MICROSTRUCTURE AND METABOLISM OF THE SMALL INTESTINE ACCORDING TO OPTICAL BIOIMAGING

M.A. Sizov¹, M.G. Ryabkov¹, E.B. Kiselyova¹, E.L. Bederina¹

*¹Privolzhsky Research Medical University
(10/1 Minin and Pozharsky Square, Nizhny Novgorod, 603005, Russia)
e-mail: sizov.mikhail2015@yandex.ru*

The aim of our study was to study the effect of surgical technique on the parameters of microcirculation and microstructure in the adductor and efferent sections of the intestine after its emergency resection for acute intestinal ischemia using multimodal optical coherence tomography (MM OCT). The study was carried out on three groups of male Wistar rats. Acute occlusive arterial ischemia of the small intestine was simulated in all animals, after 60 min the ischemic non-viable part of the intestine was resected and the operation was completed by excretion of the stoma, obstructive resection or shunting of the afferent and outlet sections ends of the small intestine. After 2 days, relaparotomy and anastomosis formation were performed. The microstructure of the intestinal wall and intramural blood circulation from the serous membrane were studied using the MM OCT method at each stage

of the surgical intervention. MM OCT data obtained in the terminal sections of the intestine immediately after resection and 2 days later were compared between study groups, as well as with data before ischemia modeling. All resected sections of the intestine were subjected to histological examination. The obtained MM OCT data were compared with the results of histological and intravital macroscopic examinations. As a result of the study of the microstructure of the intestinal wall in vivo by OCT, it was found that during stoma and obstructive resection, OCT images revealed signs of tissue edema and destructive changes in the mucous membrane, confirmed histologically, while with shunting, the changes compared to the norm were minimal. According to the OCA data, it was found that on the 2nd day, with a stoma in the adductor and efferent ends of the intestine, there was a noticeable prolapse of most vessels of small and medium diameter, mainly large arteries and veins were visualized. . The dynamics of the L index, calculated from the images of the OCA and characterizing the total length of the intramural perfused vascular network, showed a statistically significant decrease in the values in the intestinal stumps when applying a stoma: 12.18 [10.40; 14.20] μm in the adductor and 10.67 [7.98; 13.05] μm in the abducent sections compared with the values of the index before ischemia - 18.90 [17.98; 19.73] and 18.74 [17.46; 19.90] μm , respectively ($p=0.0001$). During obstructive resection, statistically significant differences in the values of the parameter L were found only for the excretory part of the intestine: 16.39 [12.37; 18.10] μm compared with the index before ischemia — 18.74 [17.46; 19.90] μm ($p=0.041$). After shunting, there were no statistically significant changes in the L-index relative to the norm. When using MM OCT, it was found that the least pronounced and most balanced changes occur in the adductor and efferent sections of the intestine during shunting.

Keywords: optical coherence tomography (MM OCT), acute intestinal ischemia, small intestine.

МЕТОД ИЗМЕРЕНИЯ ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ И ИНДЕКСА ГИДРАТАЦИИ БИОТКАНИ С ПОМОЩЬЮ КОМБИНАЦИИ ОПТИЧЕСКОЙ КОГЕРЕНТНОЙ ТОМОГРАФИИ И ВЫСОКОЧАСТОТНОГО УЛЬТРАЗВУКОВОГО ИССЛЕДОВАНИЯ

Ю.И. Сурков^{1,2} И.А. Серебрякова^{1,2}, Э.А. Генина^{1,2}

*¹Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского
(410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83)*

*²Национальный исследовательский Томский государственный университет
(634050, г. Томск, просп. Ленина, 36)
e-mail: surkov9898@gmail.com*

В работе представлен неинвазивный метод определения среднего по толщине показателя преломления и индекса гидратации в биологических тканях с помощью комбинирования оптической когерентной томографии (ОКТ) и высокочастотного ультразвукового исследования (УЗИ). Показатель преломления и индекс гидратации оценивается путем анализа совместно зарегистрированных изображений ОКТ и УЗИ. Метод протестирован на желатиновых фантомах с различной степенью гидратации.

Ключевые слова: оптическая когерентная томография, ультразвук, индекс гидратации, показатель преломления.

1. ВВЕДЕНИЕ

Показатель преломления биологических тканей является одним из ключевых параметров, влияющий на распределение и распространение оптического излучения в образцах. [1, 2] Знание показателя преломления играет важную роль во многих биомедицинских приложениях, так, например в диагностике злокачественных новообразований - патологическую ткань можно отличить от здоровой путем измерения и сравнения их показателей преломления. [2, 3]

Мониторинг индекса гидратации биотканей крайне важен для диагностики и лечения различных отеков, состояний обезвоживания, ожогов и других морфо-дегенеративных процессов в тканях, а также для косметических приложений [4-6]. Несмотря на то, что изучение гидратации кожи при различных морфофункциональных состояниях является одной из основных задач в современной дерматологии и косметологии [7-9], в настоящее время не представлена доступная, точная, неинвазивная методика контроля

содержания воды в тканях с достаточным разрешением и глубиной зондирования [4, 7]. Что послужило мотивацией для исследования.

Сообщалось о нескольких методах измерения показателя преломления в биотканях. Один из них, в частности, основан на полном внутреннем отражении с использованием полуцилиндрической линзы для определения критического угла и, следовательно, показателя преломления биологической тканей [10-11], однако при таком методе требуется непосредственный контакт с исследуемым образцом и измеряется только показатель преломления слоя, который контактирует с оптикой. Ван и др. показали возможность количественного определения пространственных колебаний показателя преломления тканей используя фазово-контрастную микроскопию [12]. С помощью данного метода определялась длина оптического пути в образце, а физическая толщина образца определялась путем разрезания образца на тонкие срезы с заданной толщиной.

Также сообщалось, что для неинвазивного измерения показателя преломления использовали ОКТ, показатель преломления был получен путем взятия соотношения между длиной оптического пути, измеренной с помощью ОКТ, и смещением фокуса, возникающим в результате перемещения фокуса линзы объектива внутрь биологических тканей [13].

ОКТ и УЗИ являются эффективными инструментами для неинвазивной функциональной и структурной визуализации биотканей. В настоящей работе мы представляем новый метод, который может быть использован для неинвазивного измерения показателя преломления и позволяет оценивать объёмную долю воды в относительно толстых биологических тканях. Он основан на комбинированной системе ОКТ и высокочастотного УЗИ. Данный метод не требует пробоподготовки, он способен измерять физическую толщину и распределение среднего по толщине показателя преломления в латеральном направлении. Кроме того, этот метод также обеспечивает визуализацию оптических и акустических неоднородностей.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

ОКТ – это метод оптической интерферометрии, при котором наблюдаемая интерференция возникает только тогда, когда длины оптических путей образца и эталонного плеча совпадают в пределах длины когерентности источника света. Следовательно, толщина образца, полученная из ОКТ-изображения, представляет собой длину оптического пути, которая является произведением физической толщины и показателя

преломления.

$$l_{opt} = \int_0^{d_{real}} n_{gr}(z) dz = \bar{n}_{gr} d_{real} , \quad (1)$$

где \bar{n}_{gr} – средний групповой показатель преломления между точками, расположенными на одной линии вертикального ОКТ-зондирования, d_{real} – физическое расстояние между этими точками [13, 14].

Аналогично (1) для расстояния между изображениями двух точек для скана высокочастотного УЗИ:

$$l_{son} = \bar{k}_{US} d_{real} , \quad (2)$$

где \bar{k}_{US} – акустический аналог среднего по толщине показателя преломления между точками, расположенными на одной линии вертикального УЗИ-зондирования [15, 16]. Акустический аналог показателя преломления

$$\bar{k}_{US} = C_{ref} / \bar{C}_{real} , \quad (3)$$

зависит от запрограммированной скорости ультразвуковой волны в сканере – C_{ref} , используемой для реконструкции изображения (для DUB SkinScanner C_{ref} составляет 1540 м/с), и действительной скорости распространения волны в среде – \bar{C}_{real} .

В нашей работе мы предполагаем, что скорость распространения УЗ продольных волн в образце биоткани определяется формулой Ньютона-Лапласа:

$$C = \sqrt{\beta \rho}^{-1} , \quad (4)$$

которая определяется плотностью – ρ и сжимаемостью среды – β [15, 16].

Для дисперсных гетерогенных сред применимо правило аддитивности плотности и сжимаемости среды. Таким образом, для двухкомпонентных образцов, состоящих из воды и «сухого» остатка, плотность и сжимаемость определяется выражениями:

$$\rho_{\Sigma} = \rho_w \varphi_w + \rho_{dry} (1 - \varphi_w) , \quad (5)$$

$$\beta_{\Sigma} = \beta_w \varphi_w + \beta_{dry} (1 - \varphi_w) , \quad (6)$$

где ρ_w и ρ_{dry} – плотность воды и сухого остатка, β_w и β_{dry} – сжимаемость воды и сухого остатка, φ_w – объемная доля воды [16]. Согласно (5) и (6):

$$\bar{C}_{real} = \sqrt{[\beta_w \bar{\varphi}_w + \beta_{dry} (1 - \bar{\varphi}_w)] \times [\rho_w \bar{\varphi}_w + \rho_{dry} (1 - \bar{\varphi}_w)]}^{-1} , \quad (7)$$

где верхнее подчеркивание означает усреднение по толщине зондируемого слоя ткани.

В данной работе мы рассматриваем биоткань как дисперсную гетерогенную двухкомпонентную среду, состоящую из «сухой», то есть безводной составляющей, и воды, а также предполагаем применимость к этой

системе правила Гладстона-Дейла [17]. Таким образом, имеем зависимость среднего группового показателя преломления от объемной доли воды:

$$n_{gp} = n_{gel}(1 - \varphi_w) + n_w \varphi_w, \quad (8)$$

где n_{gel} – групповой показатель преломления «сухого» желатина (исходного порошка), n_w – групповой показатель преломления воды.

Из (1-8) имеем систему из двух уравнений и 2 неизвестных – $\bar{\varphi}_w$, d_{real} :

$$\begin{cases} l_{opt} = (n_{gel}(1 - \bar{\varphi}_w) + n_w \bar{\varphi}_w) d_{real} \\ l_{son} = d_{real} C_{ref} \sqrt{[\beta_w \bar{\varphi}_w + \beta_{gel}(1 - \bar{\varphi}_w)] \times [\rho_w \bar{\varphi}_w + \rho_{gel}(1 - \bar{\varphi}_w)]} \end{cases} \quad (9)$$

Анализируя систему (9), мы можем определить геометрическую толщину исследуемого слоя биоткани – d_{real} как:

$$\begin{cases} d_{real}^{(OCT)} = \frac{l_{opt}}{(n_{gel}(1 - \bar{\varphi}_w) + n_w \bar{\varphi}_w)} \\ d_{real}^{(US)} = \frac{l_{son}}{C_{ref} \sqrt{[\beta_w \bar{\varphi}_w + \beta_{gel}(1 - \bar{\varphi}_w)] \times [\rho_w \bar{\varphi}_w + \rho_{gel}(1 - \bar{\varphi}_w)]}} \end{cases}, \quad (10)$$

где $^{(OCT)}$ и $^{(US)}$ означает метод, с помощью которого определяется d_{real} . В случае, когда измерения ОКТ и высокочастотного УЗИ пространственно согласованы, то есть, когда изображения ОКТ и УЗИ получены с одного и того же участка биоткани и при одинаковой ориентации плоскости зондирования,

$$d_{real}^{(OCT)} \equiv d_{real}^{(US)}. \quad (11)$$

Система (10) определяют зависимость геометрической толщины образца от объемной доли воды в нем, то есть формируют прямую задачу. Обратной задачей в данном случае будет являться восстановление индекса гидратации по измерениям оптической – l_{opt} и акустической – l_{son} толщины образца. Эту задачу можно решить минимизацией целевого функционала:

$$F(\bar{\varphi}_w) = \left(d_{real}^{(OCT)}(\bar{\varphi}_w) - d_{real}^{(US)}(\bar{\varphi}_w) \right)^2. \quad (12)$$

Для решения (12) необходимы параметры ρ_w , ρ_{dry} , β_w и β_{dry} , которые могут быть оценены из известных литературных данных или оценены экспериментально на основе формулы Ньютона-Лапласа (7). Так для оценки сжимаемости воды – β_w использовались данные скорости звука в воде – C_w (1480 м/с [18]), а для оценки ρ_{dry} и β_{dry} использовались экспериментально измеренные акустические и геометрические толщины желатиновых фантомов с известной объемной доли воды. Для измерения геометрической толщины – d_{real} использовался микрометр с точностью измерения 1 мкм.

Для апробации предложенного метода были изготовлены желатиновые фантомы толщиной 1000 ± 10 мкм с различным содержанием воды – 85, 80, 75

и 30 %. Для фантомов использовали раствор пищевого желатина (ООО ТД-холдинг, Россия, ГОСТ 11293-89) в дистиллированной воде.

Групповой показатель преломления воды и «сухого» желатина (исходный желатиновый порошок) был оценен как $n_w = 1.3416$, и $n_{gel} = 1.5473$ для $\lambda_0 = 930$ нм с шириной спектра на полувысоте 100 нм. Плотности воды и сухого желатина составили 1000 кг/м³ и 1390 кг/м³ [18], соответственно, коэффициенты сжимаемости воды и «сухого» чистого желатина были оценены из [18] по формуле (5) и составили 4.5×10^{-10} Па⁻¹ и 1.3×10^{-10} Па⁻¹, соответственно.

Для измерения оптической толщины проводилось зондирование желатинового фантома с помощью ОКТ GAN930V2-BU (Thorlabs, США), работающего на центральной длине волны 930 нм с аксиальным разрешением 5.34 мкм и глубиной сканирования до 2 мм. Для измерения акустической толщины использовался высокочастотный ультразвуковой сканер DUB SkinScanner (tprn taberna pro medicum GmbH, Германия) с зондом работающим на центральной частоте 75 МГц с глубиной сканирования 3.2 мм и аксиальным разрешением 21 мкм. Для пространственно согласованного ОКТ и УЗИ зондирования область фантома 5×2 мм² выделялась с помощью клейкой ленты. Таким образом, области зондирования для ОКТ и УЗИ совпадали.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

На рисунке 1 приводятся примеры ОКТ и УЗ сканов прозрачных желатиновых фантомов. Потому как, фантомы не содержат рассеивающих элементов, можно наблюдать только верхнюю и нижнюю границы в виде ярких линий на темном фоне.

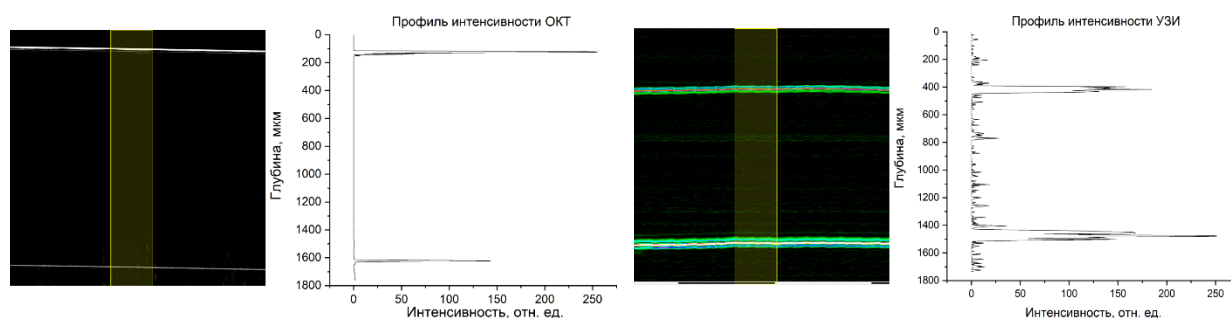


Рис. 1. Типичные ОКТ (слева) и УЗ (справа) сканы нерассеивающих желатиновых фантомов, со средними профилями интенсивности, для выделенных областей на ОКТ и УЗИ изображениях

Коэффициент сжимаемости желатина был оценен как $(1.05 \pm 0.2) \times 10^{-10}$ Па⁻¹, плотность желатина 1410 ± 92 кг/м³.

Рисунок 2 демонстрирует концентрационные зависимости среднего группового показателя преломления и объемной доли воды в фантомах: теоретическую, и экспериментальные: i) полученную с использованием экспериментально оцененных плотности и коэффициента сжимаемости желатина, ii) полученную с использованием данных о плотности и коэффициентов сжимаемости из литературных источников.

Можно заметить, что метод обладает чувствительностью к уровню гидратации и к изменению группового показателя преломления. Зависимость, полученная с использованием экспериментально измеренных плотности и коэффициентов сжимаемости для воды и сухого желатина (на рисунке 15 отмечен звездочкой), удовлетворительно согласуются с теоретической кривой. Отклонение данных, рассчитанных методом ОКТ+УЗИ с использованием данных из литературных источников, вероятно связано с содержанием воды в исходном желатиновом порошке, который для расчетов искомых параметров был принят полностью дегидратированным.

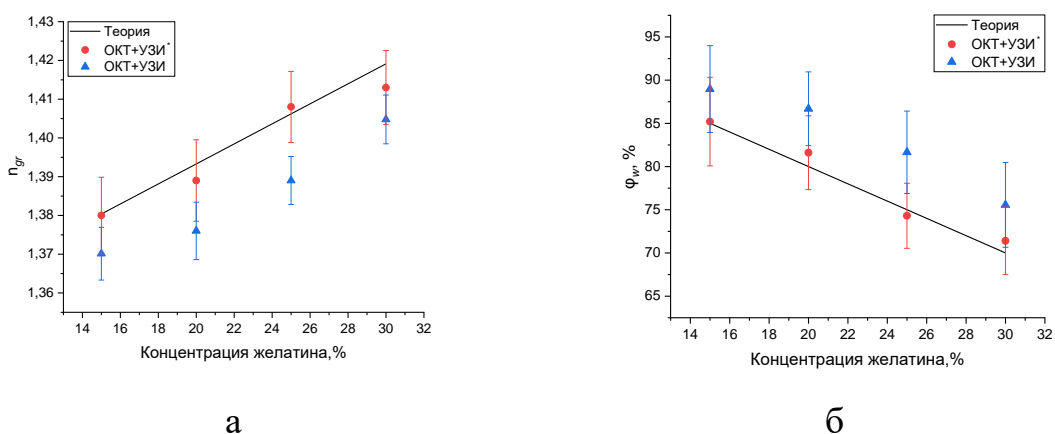


Рис. 2. Зависимость а) среднего группового показателя преломления и б) объемной доли воды от объемной доли желатина в фантоме, звездочкой отмечена зависимость, для расчета которой использовались экспериментально оцененные плотность и сжимаемость сухого желатина

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлен неинвазивный метод оценки среднего по толщине слоя образца биологической ткани группового показателя преломления и объёмной доли воды с использованием комбинации ОКТ и высокочастотного УЗИ. Метод апробирован на желатиновых фантомах с различной степенью гидратации, показана чувствительность к изменениям показателя преломления и объёмной доли воды. Результаты показывают, что разработанный метод подходит для слоев образца толщиной порядка 1 мм, границы которого можно различить с помощью ОКТ и УЗИ. Представленный

метод может оказаться полезным инструментом для мониторинга содержания воды в коже, включая диагностику различных морфо-дегенеративных состояний и лечения отека.

Работа поддержана грантом РФФИ (№ 20-52-56005) и гранта по постановлению Правительства Российской Федерации № 220 от 09 апреля 2010 г. (Соглашение № 075-15-2021-615 от 04 июня 2021 г.).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Khan R. et al. Refractive index of biological tissues: Review, measurement techniques, and applications // *Photodiagnosis and Photodynamic Therapy*. – 2021. – V. 33. – P. 102192.
2. Lazareva E. N. et al. Refractive index measurements of tissue and blood components and OCAs in a wide spectral range // *Handbook of Tissue Optical Clearing*. – CRC Press, 2022. – p. 141-166.
3. Tuchin V. V., Pop J., Zakharov V. *Multimodal optical diagnostics of cancer*. – Springer International Publishing, 2020. – p. 1-605.
4. Leyden J. J., Rawlings A. V. *Skin moisturization*. – CRC Press, 2002. – P. 1-696.
5. Qassem M., Kyriacou P. Review of modern techniques for the assessment of skin hydration // *Cosmetics*. – 2019. – V. 6. – №. 1. – P. 19.
6. Scallan J, Huxley VH, Korthuis RJ (2010) Capillary fluid exchange: regulation, functions, and pathology. In: *Colloquium lectures on integrated systems physiology: from molecules to function*. Morgan & Claypool Publishers, p 1–94
7. Sdobnov A. Y. et al. Water migration at skin optical clearing // *Handbook of Tissue Optical Clearing: New Prospects in Optical Imaging*. – CRC Press, 2022. – p. 167-184.
8. Kanitakis J. *Anatomy, histology and immunohistochemistry of normal human skin* // *European journal of dermatology*. – 2002. – V. 12. – №. 4. – p. 390-401
9. James W. D., Berger T. G., Elston D. M. *Andrews' diseases of the skin clinical dermatology*. 10'uncu Baski //Canada, Saunders Elsevier. – 2006. – p. 519-22.
10. Lai J. et al. Experimental measurement of the refractive index of biological tissues by total internal reflection // *Aplied Optics*. – 2005. – T. 44. – №. 10. – p. 1845-1849.
11. Ding H. et al. Determination of refractive indices of porcine skin tissues and intralipid at eight wavelengths between 325 and 1557 nm // *JOSA A*. – 2005. – V. 22. – №. 6. – p. 1151-1157.
12. Wang Z. et al. Tissue refractive index as marker of disease // *Journal of biomedical optics*. – 2011. – V. 16. – №. 11. – P. 116017.

13. Tearney G. J. et al. Determination of the refractive index of highly scattering human tissue by optical coherence tomography // *Optics letters*. – 1995. – V. 20. – №. 21. – p. 2258-2260.
14. Shvachkina M. E. et al. Monitoring of the process of immersion optical clearing of collagen bundles using optical coherence tomography // *Optics and Spectroscopy*. – 2019. – V. 127. – №. 2. – p. 359-367.
15. Dachsel M. R. *Ultrasound in the Critically Ill*. – Springer, Cham, 2022. – P. 1-331.
16. Apfel R. E. Prediction of tissue composition from ultrasonic measurements and mixture rules // *The Journal of the Acoustical Society of America*. – 1986. – V. 79. – №. 1. – p. 148-152.
17. D.W. Leonard, K.M. Meek, Refractive indices of the collagen fibrils and extrafibrillar material of the corneal stroma. // *Biophys. J.* 1997, V. 72, № 3, P. 1382.
18. Duck F.A., *et al.* *Physical Properties of Tissue: A Comprehensive Reference Book*. Chapter 4. // London: Academic Press, 1990, p. 73-135.

MEASURING THE REFRACTIVE INDEX AND HYDRATION INDEX OF BIOLOGICAL TISSUES USING A COMBINATION OF OPTICAL COHERENCE TOMOGRAPHY AND HIGH-FREQUENCY ULTRASOUND

Yu.I. Surkov^{1,2} I.A. Serebryakova^{1,2}, E.A. Genina^{1,2}

¹*Saratov National Research State University, N.G. Chernyshevsky
(410012, Saratov, Astrakhanskaya st., 83)*

²*National Research Tomsk State University,
(634050, Tomsk, Lenin Ave., 36)
e-mail: surkov9898@gmail.com*

The paper presents a non-invasive method for measuring the thickness-average refractive index and hydration index in biological tissues using a combination of optical coherence tomography (OCT) and high-frequency ultrasound (US). The refractive index and hydration index are estimated by analyzing the jointly recorded images of OCT and ultrasound. Experimental examples of measuring the volume fraction of water in gelatin phantoms with different degrees of hydration are given.

Keywords: Optical coherence tomography, ultrasound, hydration index, refractive index.

ПРИНЦИПАЛЬНАЯ СХЕМА УСТРОЙСТВА ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ЭНДОВАЗАЛЬНОЙ ЛАЗЕРНОЙ ОБЛИТЕРАЦИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДВУХМИКРОННОГО ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

С.А. Артемов, А.Н. Беляев, О.С. Бушукина, С.В. Костин, П.А.
Рябочкина, С.А. Хрущалина, Д.В. Пьянзин, А.Д. Таратынова

*Мордовский государственный университет имени Н.П. Огарёва, Саранск
(430005, г. Саранск, ул. Большевикская, 68)
e-mail: alina.taratynova@mail.ru*

В настоящей работе предлагается схема аппаратно-программного комплекса с целью оптимизации метода проведения эндовазальной лазерной коагуляции (ЭВЛК) для лечения варикозного расширения вен с использованием двухмикронного лазерного излучения, возможностью визуализации венозного русла и дальнейшим регулированием энергетических характеристик лазерного излучения в зависимости от морфологии венозного русла.

Ключевые слова: ЭВЛК, двухмикронное лазерное излучение, венозное русло, компьютерное моделирование, гистологическое исследование.

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время при лечении варикозной болезни вен широко используется малоинвазивный метод эндовазальной лазерной коагуляции (ЭВЛК). При проведении процедуры наряду с применением гемоглобиновых лазеров, генерирующих излучение в области 970 нм, активно используются лазеры, генерирующие излучение с длиной волны 1470 нм, что соответствует полосе поглощения воды. Представленные в последние годы экспериментальные результаты демонстрируют возможность эффективного использования двухмикронного лазерного излучения при проведении процедуры ЭВЛК. Излучение данного диапазона более эффективно поглощается водой, что дает возможность осуществлять коагуляцию с использованием меньшего значения плотности энергии [1-3].

Несмотря на широкое распространение процедуры ЭВЛК в настоящее время, послеоперационные осложнения встречаются достаточно часто. По статистике после проведения процедуры ЭВЛК боли, синяки, уплотнения и дискомфорт в ногах регистрируются у 66 % пациентов. Данные осложнения

можно минимизировать в результате подбора оптимальных значений энергетических характеристик и скорости извлечения световода в зависимости от морфологии венозного русла.

В настоящей работе предлагается схема аппаратно-программного комплекса для оптимизации метода проведения операции с возможностью визуализации венозного русла и дальнейшим регулированием энергетических характеристик лазерного излучения в зависимости от морфологии венозного русла.

Функционально предложенный комплекс представляет из себя лазерную установку с дополнительными блоками:

- блок оптической системы;
- блок обработки изображений венозного русла;
- блока выбора оптимальных значений мощности лазерного излучения и скорости извлечения световода;
- блок задания мощности лазера и скорости извлечения световода.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

2.1. Эксперименты *in-vivo*

В работе проведены эксперименты на овцах эдельбаевской породы с оценкой результатов структурной трансформации вен после ЭВЛК. Проведение экспериментов на животных одобрено этическим комитетом медицинского института Национального исследовательского Мордовского государственного университета им. Н.П. Огарева ((№ 69 от 27.11.2018 г.). Процедура ЭВЛК выполнена на 8 подкожных венах конечностей с использованием твердотельного LiYF₄:Tm лазера, генерирующего излучение с длиной волны 1910 нм мощностью до 10 Вт. Для процедуры ЭВЛК использовался оптический световод с однокольцевой диаграммами рассеяния.

Коагуляцию вен осуществляли путем их пункции и введения в просвет лазерного световода. Скорость извлечения световода составляла 2 мм/сек. После завершения процесса коагуляции извлекались сегменты вен для их гистологического исследования, на конечность накладывали эластическую повязку с целью компрессии вены, тем самым приближая условия эксперимента к клинической ситуации. На 8-е сутки после эксперимента снимали швы и эластическую повязку.

2.2. Компьютерное моделирование процесса ЭВЛК

Моделирование процесса ЭВЛК осуществлялось в программном пакете COMSOL Multiphysics 5.6 с использованием модуля «Теплопередача».

Для построения модели учитывались следующие физические процессы, происходящие при ЭВЛК: распространение лазерного излучения в среде, включающее поглощение и рассеяние, нагрев среды вследствие поглощения падающего излучения и распространение тепла (конвекция в крови, теплопроводность в стенке вены и паравенозных тканях). Также в модели учитывался анализ теплообмена в биологических тканях, который включает в себя источники тепла от перфузии крови и метаболизма организма и влияние горячего карбонизированного слоя, который образуется на торце волокна в процессе ЭВЛК и выступает в качестве дополнительного источника тепла. Следует отметить, что поглощенной энергии достаточно для нагревания рассматриваемого объема воды, которая является основным компонентом крови, от 37°C до 100°C и ее дальнейшего испарения. В связи с этим учитывался фазовый переход жидкости в пар, и рассчитывалась скрытая теплота парообразования. Решение уравнения теплопроводности осуществлялось методом конечных элементов с использованием треугольной сетки.

Основными параметрами модели процессов теплопередачи поглощенной энергии падающего лазерного излучения с длиной волны являлись мощность лазерного излучения с длиной волны 1910 нм и диаметр сосуда от 4 до 8 мм. В результате моделирования была определена зависимость температуры стенки вены и паравенозных тканей от данных параметров.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Необходимым критерием возникновения коагуляционного процесса в вене и дальнейшая ее облитерация является достижение температуры стенки вены 75-85 градусов. Именно при 75 градусов разрушается коллаген, что ведет к необратимому термическому повреждению стенки вены. В ходе компьютерного моделирования было проанализировано распределение температуры в стенке вены и прилежащих тканях при применении различных мощностей лазерного излучения для вены с радиусов 2 мм и проведено сравнение с повреждениями, полученными в ходе экспериментов *in-vivo*.

На рисунке 1 представлены результаты экспериментов с использованием двухмикронного лазерного излучения с линейной плотностью энергии 15 Дж/см. С помощью компьютерного моделирования было получено

распределение температуры внутри вены (рисунок 1 (а)), которое демонстрирует следующие результаты: стенка вены разогревается от 83⁰С интима до 78⁰С для адвентиции – внешней оболочки. Из этого следует, что при проведении процедуры ЭВЛК с использованием данных энергетических характеристик на венах радиусом 2 мм будут наблюдаться существенные ее повреждения. Этот факт подтверждается гистологическим исследованием срезов, изъятых непосредственно после проведения процедуры. На рисунке 1(б) видно тотальное повреждение интимы стенки вены, не наблюдается дифференциация оболочек вены, определяются некторизированные ткани.

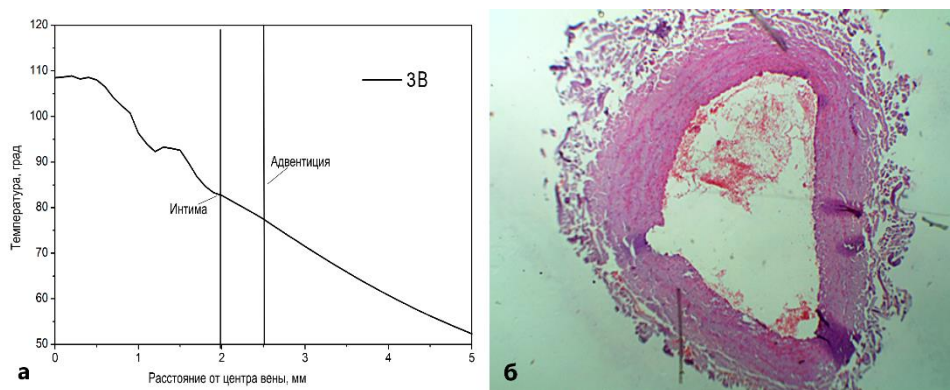


Рис. 1. Результаты экспериментов при использовании лазерного излучения с длиной волны 1910 нм $LEED = 15$ Дж/см ($P = 3$ Вт) а) График зависимости температуры от расстояния от центра венозного русла; б) гистологические срезы стенки вены после ЭВЛК (радиус вены 2,5 мм)

При применении двухмикронного лазерного излучения с линейной плотностью энергии 20 Дж/см согласно распределению температуры (рисунок 2(а)), полученного в ходе компьютерного моделирования, мы можем наблюдать, что стенка вены разогревается от 87⁰С интима до 80⁰С для адвентиции. Гистологические срезы демонстрируют сильно выраженные повреждения стенки вены, с захватом паравенозных тканей, наблюдаемые разрушения носят необратимый характер. Также просматриваются некротизированные околовенозные ткани, что свидетельствует о том, что после операции у пациента возникнут осложнения, которые необходимо минимизировать. Данный факт свидетельствует о том, что данные

энергетические характеристики являются завышенными для коагуляции сосуда такого диаметра.

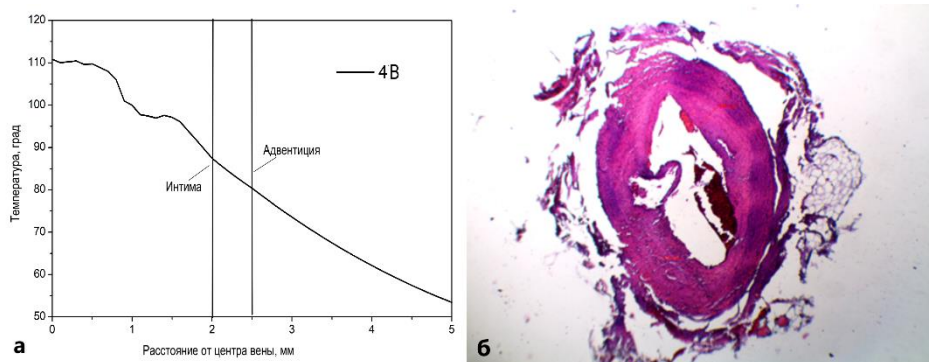


Рис. 2. Результаты экспериментов при использовании лазерного излучения с длиной волны 1910 нм $LEED = 20$ Дж/см ($P = 4$ Вт) а) График зависимости температуры от расстояния от центра венозного русла; б) гистологические срезы стенки вены после ЭВЛК (радиус вены 2 мм)

Стоит предположить, что еще большее повышение температуры в стенке вены и, как следствие, большие повреждения должны быть получены при использовании излучения с линейной плотностью энергии 30 Дж/см. Данный факт подтверждает рисунок 3. Как видно из результатов компьютерного моделирования (рисунок 3(а)), стенка вены разогревается до 95°C, о чем свидетельствуют и гистологические срезы, полученные после проведения экспериментов *in-vivo*. Тотальное повреждение венозного русла, включая паравенозные ткани, демонстрируют использование сверхвысоких энергетических характеристик двухмикронного лазерного излучения, которое будет приводить к возникновению синяков, отеков, болей.

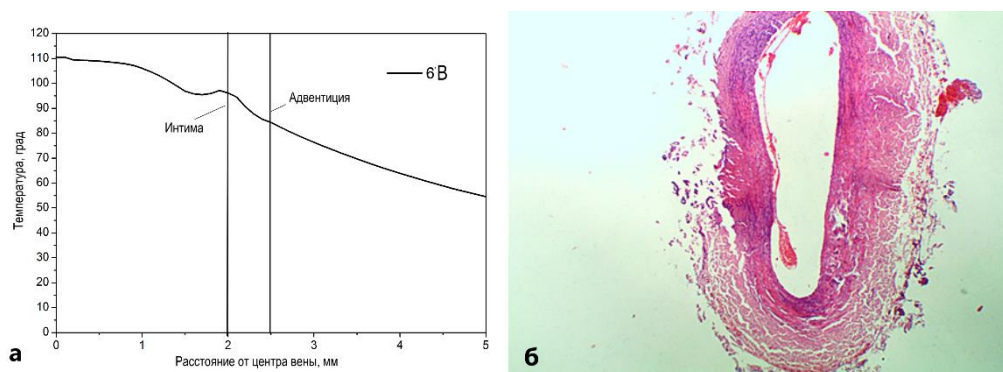


Рис. 3. Результаты экспериментов при использовании лазерного излучения с длиной волны 1910 нм $LEED = 30$ Дж/см ($P = 6$ Вт) а) График зависимости температуры от расстояния от центра венозного русла; б) гистологические срезы стенки вены после ЭВЛК (радиус вены 2,7 мм)

На основании данных исследований возможно создать зависимость необходимых энергетических характеристик лазерного излучения от диаметра визуализированного сосуда (рисунок 4). Данная зависимость станет основой для разработки алгоритма аппаратно-программного комплекса для проведения процедуры ЭВЛК с возможностью регуляции мощности лазерного излучения в зависимости от диаметра вены.

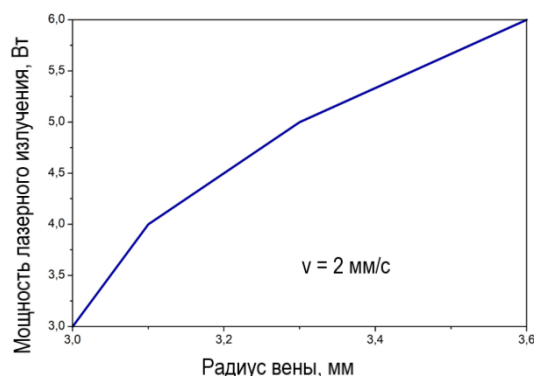


Рис. 4. Зависимость необходимой мощности лазерного излучения от радиуса вены

Функционально предложенный комплекс представляет из себя лазерную установку с дополнительными блоками:

- блок оптической системы;
- блок обработки изображений венозного русла;
- блока выбора оптимальных значений мощности лазерного излучения и скорости извлечения световода;
- блок задания мощности лазера и скорости извлечения световода.

Основные операции, которые будут выполняться в ходе реализации процедуры:

1. поглощение излучения хромофорами ткани;
2. визуализация сосуда;
3. обработка изображения искусственным интеллектом с целью получения значения диаметра вены и морфологии сосуда;
4. пересчет характеристик вены в энергетические характеристики лазерного излучения (мощность, скорость извлечения световода и его траектория);
5. подача сигнала на источник лазерного излучения для установления определенной мощности и на трактат – для скорости и траектории извлечения;

б. регистрация послеоперационного эффекта методами визуализации, представленными в клинической практике.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе данного исследования была разработана модель процесса ЭВЛК для описания распределения температуры во всех слоях венозного русла. Проведены эксперименты *in-vivo* на животных с использованием различных значений линейной плотности энергии (LEED) 15, 20, 30 Дж/см. Результаты, полученные при моделировании процесса ЭВЛК, коррелируют с результатами экспериментов *in-vivo*.

Характерные термические повреждения стенки вены продемонстрировали возможность использования LEED = 15-20 Дж/см при проведении процедуры ЭВЛК на венах с диаметром 4 мм.

Получена зависимость необходимой мощности лазерного излучения от радиуса коагулируемой вены. Разработана схема аппаратно-программного комплекса для оптимизации метода проведения операции с указанием основных блоков.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. S.A. Artemov, A.N. Belyaev, O.S. Bushukina, S.A. Khrushchalina, S.V. Kostin, A.A. Lyapin, P.A. Ryabochkina. Optimization of endovenous laser coagulation: *in vivo* experiment // *Lasers in Medical Science* (2020).
2. Sroka R, Weick K, Steckmaier S, Steckmaier B, Blagova R, Sroka I, et al. The ox-foot-model for investigating endoluminal thermal treatment modalities of varicosis vein diseases. *ALTEX-Altern Anim Exp*. 2012;29(4):403–10.
3. V.P. Minaev, N.V. Minaev, V.Yu. Bogachev, K.A. Kaperez, V.I. Yusupov. Endovenous laser coagulation: asymmetrical heat transfer (modeling in water) // *Lasers in Medical Science* (2020).

THE SCHEME OF THE HARDWARE AND SOFTWARE COMPLEX FOR EVLC PROCEDURE WITH USING TWO-MICRON LASER RADIATION

A.A. Artemov, A.N. Belyaev, O.S. Bushukina, S.A. Khrushchalina, S.V. Kostin, D.V. Pyanzin P.A. Ryabochkina, A.D. Taratynova

*National Research Mordovia State University
(Bolshevistskaya Str., 68, Saransk, Russia)
e-mail: alina.taratynova@mail.ru*

At the present work we suggest a scheme of the hardware and software complex for optimization the method of conduct operation with ability of the vein visualization and regulation of energy laser characteristics depending on morphology of venous bed.

Keywords: EVLC, two-micron laser radiation, venous bed, computer simulation, histological studies.

СЛУЧАЙНАЯ ЛАЗЕРНАЯ ГЕНЕРАЦИЯ – ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ

С. Ф. Уманская¹, А.Н. Маресев^{1,2}, А.А. Матрохин^{1,2}, М.А. Шевченко¹,
Н.В. Чернега¹

¹Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН
(119991, г. Москва, Ленинский проспект, 53)

²Московский физико-технический институт,
(117303, г. Москва, Керченская улица, 1А, корп. 1)
e-mail: umanskaya@lebedev.ru

Приведены результаты экспериментальных исследований параметров случайной лазерной генерации в порошке $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ и в суспензии частиц LiNbO_3 при разных условиях возбуждения. Для порошка $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ наблюдалось увеличение эффективности ВКР на два порядка при понижении температуры до температуры жидкого азота. Экспериментально измеренное максимальное значение коэффициента преобразования составило 30 %. В суспензии частиц LiNbO_3 было обнаружено значительное усиление эффективности генерации второй гармоники при замораживании, обусловленное образованием плотноупакованных структур в процессе затвердевания.

Ключевые слова: случайный лазер, генерация второй гармоники, вынужденное комбинационное рассеяние.

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование лазерной генерации в неупорядоченных средах, таких как рассеивающие порошки, тонкие пленки, коллоидные растворы, биологические ткани и др., началось в 1968 году с теоретической работы В.С. Летохова [1]. Данные источники, получившие название “случайные лазеры”, находят практическое применение во многих областях физики и активно изучаются до сих пор. Главная особенность таких источников заключается в том, что обратная связь осуществляется не за счет резонатора, а за счет многократного рассеяния на неоднородностях среды. В то же время среда, как и в обычных лазерах, должна обладать усилением. Более подробно о механизмах и свойствах генерации описано в [2-4].

Случайная лазерная генерация была реализована в большом количестве различных материалов, в том числе ВКР-активных средах [5] и средах,

генерирующих вторую гармонику [6]. Случайная генерация в ВКР-активных средах – это особый тип случайной генерации, который использует вынужденное комбинационное рассеяние (ВКР) в качестве механизма усиления.

В данной работе случайная лазерная генерация зарегистрирована в ВКР-активном порошке нитрата бария ($\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$) и в образцах на основе частиц кристалла ниобата лития (LiNbO_3), генерирующего вторую гармонику, при пико- и наносекундной накачке. Исследованы энергетические и температурные зависимости, коэффициенты преобразования и определен режим рассеяния для каждого из образцов.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

2.1. Материалы и методы

Для исследования особенностей ВКР в случайных средах в данной работе использовался порошок нитрата бария $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$. Нитрат бария обладает высоким коэффициентом усиления ($g = 47 \pm 5$ см/ГВт), узкой шириной линии ($1,5$ см⁻¹) и малым порогом ВКР.

Ниобат лития обладает нецентросимметричной структурой и широко используется как оптический нелинейный материал для различных приложений в том числе для генерации второй гармоники.

Образцы ниобата лития изучались в виде порошка, водной суспензии и тонкого слоя частиц, нанесенных на стеклянную подложку. Коллоидный раствор частиц LiNbO_3 был получен методом лазерной абляции в воде при помощи Nd:YAG лазера ($\lambda = 532$ нм, $\tau = 11$ нс, $E = 0.1$ Дж). Полученную суспензию многократно наносили и высушивали на стеклянной подложке для моделирования слоя частиц, образующихся при замерзании суспензии. Также порошок частиц ниобата лития был получен механическим измельчением объемного кристалла.

Для возбуждения излучения в образцах использовались два источника накачки: Nd:YAG лазер с модуляцией добротности ($\lambda = 1064$ нм, $\tau = 11$ нс, $E_{\text{max}} = 0,4$ Дж, частота 10 Гц) и Nd:YAG лазер с синхронизацией мод ($\lambda = 1064$ нм, $\tau = 30$ пс, $E_{\text{max}} = 50$ мДж, частота 10 Гц). Для регистрации спектров использовался спектрометр со спектральным разрешением 1 нм.

2.2. Результаты

Для определения режима рассеяния в неупорядоченных средах используется метод когерентного обратного рассеяния. Параметром,

определяющим режим рассеяния при распространении света в неупорядоченной среде, является длина свободного пробега рассеяния фотонов l_s [7]. Чтобы определить эту величину, регистрировалась угловая зависимость интенсивности рассеянного в обратном направлении света. Для измерений использовалась типичная схема [8], результаты показаны на рис.1. Полуширина на полувысоте конуса $\omega \approx \lambda/2\pi l$, где λ — длина волны света, откуда можно определить транспортную длину свободного пробега света в среде l . Измеренная таким образом длина свободного пробега в порошке ниобата лития составила $l \cong 28$ мкм, а длина свободного пробега для порошка $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ составила 5,4 мкм. В обоих случаях длина свободного пробега соответствует режиму слабого рассеяния.

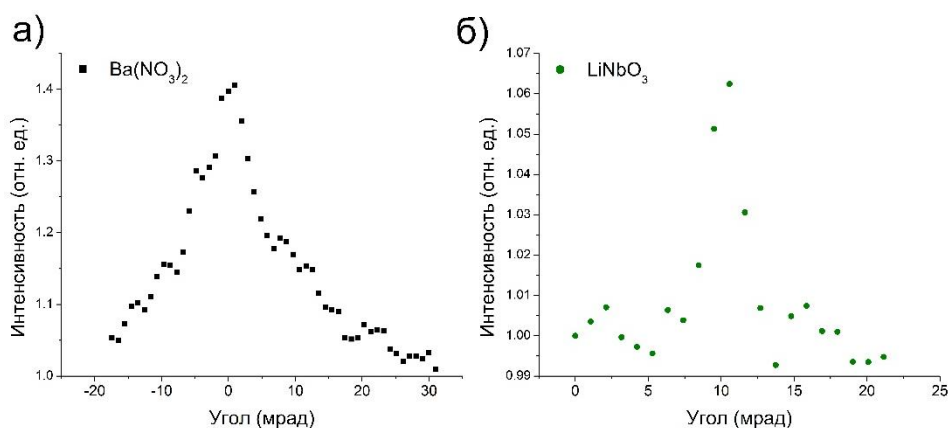


Рис. 1. Интенсивность обратного рассеяния в зависимости от угла для порошка сульфата бария (а) и ниобата лития (б)

Зависимость интенсивности первой стоксовой компоненты порошка нитрата бария от энергии накачки для пико- и наносекундного импульсов показана на рис.2 (а, б). При превышении энергией накачки порогового значения начинается случайная ВКР-генерация за счет превышения усиления над потерями в неупорядоченных средах. Пороговое значение энергии накачки для пикосекундного режима ниже, чем для наносекундного. Такое поведение связано с тем, что виртуальные состояния, участвующие в рамановских переходах, намного быстрее, чем электронные переходы, включающие реальные атомные или молекулярные уровни, а также с более длительным пребыванием фотонов в среде из-за многократного рассеяния. При охлаждении образца до температуры жидкого азота для пикосекундной накачки порог первого Стокса уменьшился, а для случая наносекундной длительности практически не изменился.

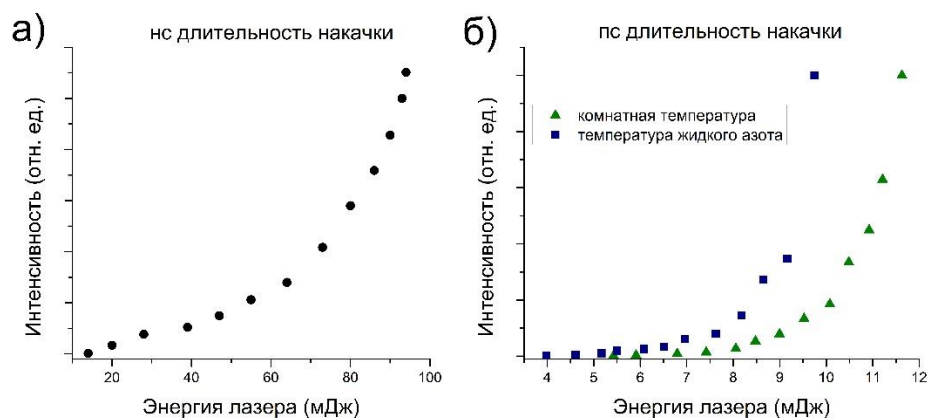


Рис. 2. Зависимость интенсивности излучения первого стока для порошка нитрата бария при нс длительности накачки (а) и пс длительности накачки (б)

Предполагая отсутствие поглощения в образце, эффективность преобразования была определена как отношение энергии излучения комбинационного рассеяния во всех направлениях к энергии падающего импульса. Максимальная эффективность 30% была достигнута при интенсивности накачки 5,2 ГВт/см² при комнатной температуре.

В суспензии частиц ниобата лития при обеих длительностях импульса накачивающего лазера генерация второй гармоники в спектрах пропускания не наблюдалась. Затем суспензия той же концентрации замораживалась, и компонента второй гармоники появлялась в спектрах пропускания (рис. 3). При дальнейшем понижении температуры до температуры жидкого азота изменение интенсивности данной компоненты не происходило. Появление компоненты второй гармоники при замораживании суспензии объясняется образованием слоя частиц на поверхности, как показано в работах [9-10]. Механизм образования слоя частиц зависит от скорости замораживания, объемной доли частиц и других параметров. При стягивании частиц к поверхности, в образованных слоях частиц происходит уменьшение длины свободного пробега фотонов по сравнению с ее значением для жидкой суспензии (Рис 3а), что способствует возникновению случайной генерации (Рис 3б), и в нашем случае увеличению эффективности генерации второй гармоники.

Генерация второй гармоники наблюдалась также и в случае слоя осажденных частиц, и в случае порошка. На рис. 3в представлена зависимость интенсивности второй гармоники в замороженной суспензии от энергии лазера при накачке наносекундной длительности. Как известно, интенсивность излучения второй гармоники $I_{2\omega} = A(d_{eff}L^2)I_{\omega}^2$, где L —

толщина образца, A — константа пропорциональности, d_{eff} — коэффициент эффективности ГВГ. Полученная экспериментально зависимость является практически квадратичной и имеет показатель степени 2,19. Аналогичная зависимость наблюдалась для слоя частиц на подложке и для порошка при нано- и пикосекундной длительности накачки, что свидетельствует о влиянии процесса многократного рассеяния на усиление.

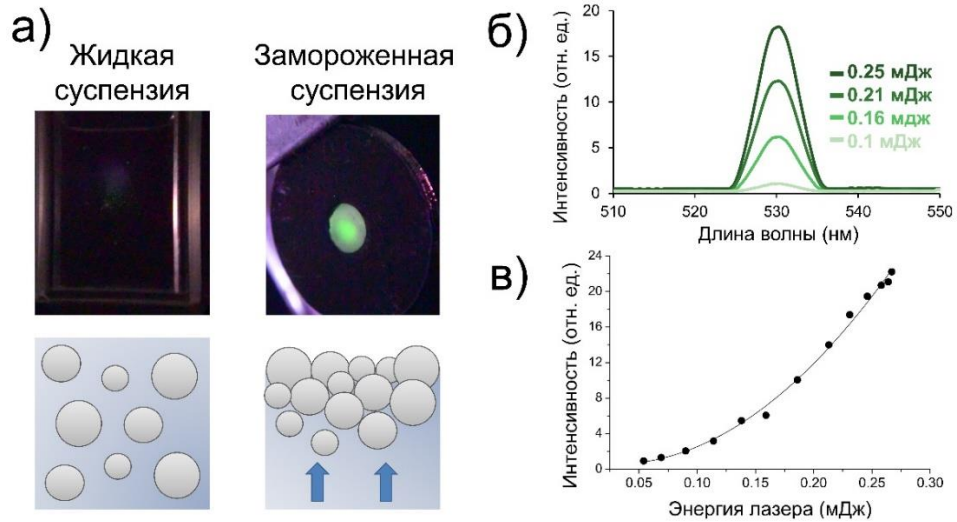


Рис. 3. Фотография жидкой и замороженной суспензии с сигналом второй гармоники и схематическое изображение расположения частиц (а); Спектр излучения второй гармоники при различных энергиях накачивающего лазера (б); Зависимость интенсивности излучения второй гармоники от энергии накачивающего лазера (в).

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе была зарегистрирована случайная лазерная генерация в порошке $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ и в образцах на основе частиц кристалла LiNbO_3 .

Максимальное значение коэффициента преобразования ВКР в порошке $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ составило 30 %. Было показано, что свойства ВКР в порошке нитрата бария сильно зависят от температуры, что позволяет использовать данный источник как датчик температуры.

Генерация второй гармоники в частицах LiNbO_3 происходит после образования слоя частиц на поверхности в результате замораживания суспензии. Таким образом, путем включения в оптически прозрачные вещества частиц, генерирующих вторую гармонику, процесс усиления света за счет многократного рассеяния можно использовать для изучения различных фазовых переходов. Данный метод также может быть использован для изучения процессов организации частиц при формировании льда, а также для

увеличения эффективности различных нелинейных процессов в жидких суспензиях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Letokhov V. S. Generation of light by a scattering medium with negative resonance absorption //Sov. Phys. JETP. – 1968. – Т. 26. – С. 835-840.
2. Wiersma D. S. The physics and applications of random lasers //Nature physics. – 2008. – Т. 4. – №. 5. – С. 359-367.
3. Noginov M. A. Other types of solid-state random lasers. – Springer New York, 2005. – С. 198-221.
4. Kamil N. A. I. M. et al. Principles and characteristics of random lasers and their applications in medical, bioimaging and biosensing //AIP Conference Proceedings. – AIP Publishing LLC, 2020. – Т. 2203. – №. 1. – С. 020017.
5. Hokr B. H. et al. Bright emission from a random Raman laser //Nature communications. – 2014. – Т. 5. – №. 1. – С. 1-5.
6. Qiao Y. et al. Random laser action with coherent feedback via second-harmonic generation //arXiv preprint arXiv:1611.07720. – 2016.
7. Wolf P. E., Maret G. Weak localization and coherent backscattering of photons in disordered media //Physical review letters. – 1985. – Т. 55. – №. 24. – С. 2696.
8. Van Albada M. P., Lagendijk A. Observation of weak localization of light in a random medium //Physical review letters. – 1985. – Т. 55. – №. 24. – С. 2692.
9. You J. et al. Dynamic particle packing in freezing colloidal suspensions //Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. – 2017. – Т. 531. – С. 93-98.
10. Dedovets D., Deville S. Multiphase imaging of freezing particle suspensions by confocal microscopy //Journal of the European Ceramic Society. – 2018. – Т. 38. – №. 7. – С. 2687-2693.

RANDOM LASING – TEMPERATURE DEPENDENCE

S.F. Umanskaya¹, A.N. Maresev¹, A.A. Matrokhin^{1,2}, M.A. Shevchenko¹,
N.V. Tcherniega¹

¹*Lebedev Physical Institute*

(Leninsky avenue, 53, Moscow, Russia, 119991)

²*Moscow Institute of Physics and Technology*

(1 “A” Kerchenskaya st., Moscow, Russia, 117303)

e-mail: umanskaya@lebedev.ru

The results of experimental studies of the parameters of random laser generation in Ba(NO₃)₂ powder and in a suspension of LiNbO₃ particles under different excitation conditions are presented. For the Ba(NO₃)₂ powder, an increase in the SRS conversion efficiency by two orders of magnitude was observed when the temperature was lowered to the temperature of liquid nitrogen. The maximum value of the conversion efficiency was 30%. In a suspension of LiNbO₃ particles, a significant increase in the efficiency of second harmonic generation during freezing due to the formation of close-packed structures during solidification was shown.

Keywords: random laser, second harmonic generation, stimulated Raman scattering.

ВЫСОКОЧУВСТВИТЕЛЬНОЕ ОБНАРУЖЕНИЕ ИОНОВ Cu^{2+} ФЛУОРИСЦЕНТНЫМ НАНОСЕНСОРОМ С УСИЛЕННЫМ ОТКЛИКОМ ФЁРСТЕРОВСКИМ РЕЗОНАНСНЫМ ПЕРЕНОСОМ ЭНЕРГИИ

А.К. Чепак^{1,2}, М.В. Тутов^{1,2}, С.Ю. Братская¹, А.Ю. Мироненко¹

¹*Институт химии ДВО РАН*

(690022, г. Владивосток, просп. 100-летия Владивостока, 159)

²*Дальневосточный федеральный университет,*

(690950, г. Владивосток, ул. Суханова 8)

e-mail: chepak.ak@mail.ru

В настоящей работе мы демонстрируем новую стратегию повышения чувствительности флуоресцентных хемосенсоров на основе родамина за счёт усиления их флуоресцентного сигнала внутри светособирающих наночастиц. Данная стратегия основана на включении сенсорных молекул в светособирающие наночастицы для накачки оптического сигнала за счет Фёрстеровского переноса энергии (FRET). Этот подход был реализован на простом хемосенсоре для определения Cu^{2+} , в результате чего его предел обнаружения был снижен на 2 порядка и составил менее 1 нМоль/л.

Ключевые слова: флуоресцентный нанозонд, хемосенсор, FRET.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы флуоресцентные хемосенсоры стали эффективным аналитическим инструментом благодаря уникальной возможности быстрого и простого обнаружения аналитов различной природы, в том числе, ионов металлов [1,2] и анионов [3,4]. Среди известных флуорофоров лактамы родаминов представляют собой одну из наиболее интересных платформ для дизайна селективных флуоресцентных зондов. Сенсорные характеристики таких зондов зависят от их яркости (поглощение \times квантовый выход флуоресценции), а также от константы взаимодействия зонд-аналит. Так, реальные хемосенсоры на основе родамина бЖ обычно имеют рабочий диапазон обнаружения аналита от 1 мкМ до 0,1 мМ, что значительно превышает предельно допустимую концентрацию наиболее токсичных металлов.

Очевидно, что для улучшения сенсорных характеристик таких флуоресцентных зондов необходимо значительно усилить генерируемый

сесорный сигнал за счет резонансного фотовозбуждения молекул зонда значительно более яркими квантовыми излучателями. Так, недавно была показана уникальная возможность такой резонансной накачки органических красителей внутри светособирающих наночастиц на основе катионных красителей, разделенных объемными гидрофобными анионами, предотвращающими самогашение молекул красителя донора и обеспечивающими сверхбыструю миграцию энергии возбуждения от множества молекул доноров к единому акцептору [5–8].

В данной работе, с использованием данного подхода, на основе коммерчески доступного хемосенсора для определения Cu^{2+} мы разработали эффективный подход к значительному улучшению его сенсорных характеристик.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

2.1. Получение флуоресцентных НЧ.

В качестве исходных растворов использовали 1 мМ кумарина 30 (C30), 0,2 мМ родамина 6 Ж (R6G) и d98 и 5 мМ тетрафенилборатов F6 (тетраakis[3,5-бис(трифторметил)фенил]борат натрия) и F12 (тетраakis[3,5-бис(1,1,1,3,3,3-гексафтор-2-метокси-2-пропил)фенил]борат натрия) в ацетонитриле. Для получения флуоресцентных НЧ, раствор, состоящий из 10 мкл C30, 0-10 мкл R 6G или d98 и 2-160 мкл f-TPB, быстро добавляли в 5 мл дистиллированной воды при интенсивном перемешивании.

2.2. Методы и приборы

Исследования УФ-видимой и флуоресцентной спектроскопии проводились на спектрофотометре Shimadzu UV-2600 и спектрофлуориметре Shimadzu RF-6000 с использованием кювет длиной 1 см при комнатной температуре. Размер и электрокинетический потенциал флуоресцентных частиц определяли с помощью анализатора ZetaSizer Nano ZS (Malvern Instruments Ltd.).

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ

В ранее опубликованных работах [5-8] родамин Б, имеющий полосу люминесценции в области 580 нм, использовался в качестве донора для накачки акцептора, излучающего в ближнем ИК диапазоне. В данной работе было необходимо возбудить родамин 6Ж (R6G), для чего требуется катионный краситель с высоким квантовым выходом флуоресценции, излучающий в

зеленой области спектра (500-550 нм). Поиск подходящего донора среди коммерчески доступных лазерных красителей показал, что только нейтральные красители (кумарины) обладают требуемыми спектральными свойствами. Мы предположили, что нейтральные молекулы, содержащие аминогруппы, способные к протонированию, также будут формировать нерастворимые в воде ассоциаты с гидрофобными анионами, поскольку химическое равновесие всегда сдвинуто в сторону образования нерастворимых продуктов. Принимая во внимание молекулярную структуру и спектральные свойства, мы использовали кумарин 30 (C30) в качестве донора, родамин 6Ж (R6G) и d98 в качестве акцептора и фторированные тетрафенилбораты (f-TPB) в качестве анионов. Способ получения наночастиц C30/f-TPB был основан на методе осаждения из смешивающегося с водой растворителя, содержащего необходимые прекурсоры (C30, R6G или d98 и f-TPB).

После предварительных экспериментов для дальнейших исследований мы использовали наночастицы (НЧ) с фиксированными соотношениями C30/f-TPB (C30/F6=1/50, C30/F12=1/20) и переменным количеством акцептора R6G. Так, допирование НЧ на основе кумарина молекулами родамина 6Ж приводит к появлению эмиссии родамина в области 540-550 нм и одновременному уменьшению эмиссии кумарина, что свидетельствует о возникновении резонансного переноса энергии (Рисунок 1 a,b,c,d). На Рисунок 1e показано, что для 50% эффективности FRET в НЧ на основе F12 и F6 требуется 4,8 и 6,2 молекул акцептора на 100 молекул донора соответственно, а максимальный квантовый выход флуоресценции достигается при соотношении R6G/C30 = 1/10 (Рис 1f).

Далее, для реализации хемосенсорной сборки, вместо родамина 6Ж мы использовали синтезированное ранее хемосенсорное производное d98, которое представляет собой гидразид R6G, модифицированный аминоароматической группой. Как следует из Рисунка 2 полученные НЧ, допированные d98, оказались значительно более чувствительным самого d98, снизив его предел обнаружения на 2 порядка.

Финальным этапом нашего исследования стали эксперименты для изучения влияния других ионов на сенсорный отклик НЧ C30/d98/F12. На Рис. 2d представлен отклик зонда на присутствие $5 \cdot 10^{-7}$ М Cu^{2+} в среде десятикратного избытка испытуемого катиона. Полученные результаты показывают, что разработанный наносенсор подходит для селективного

обнаружения Cu^{2+} в присутствии широкого спектра конкурирующих ионов даже невооружённым глазом (рис. 2е).

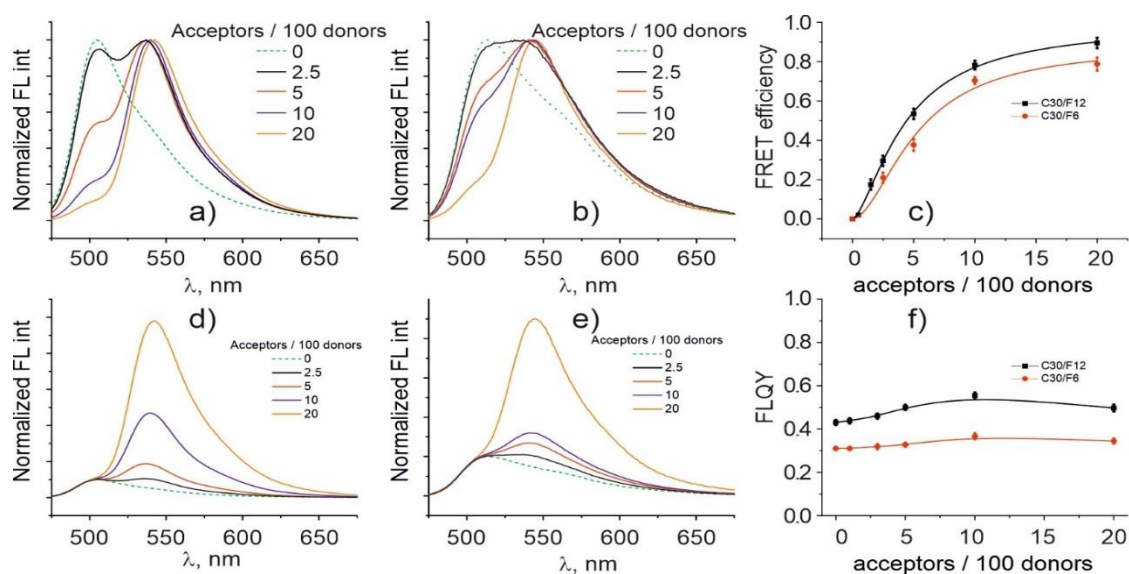


Рис.1. Оптические характеристика FRET наночастиц состава C30/R6G/f-TPB: Нормированные на единицу и на эмиссию донора спектры флуоресценции наночастиц C30/R6G/F12 (a, d) и C30/R6G/F5 (b, e). Зависимость эффективности FRET (c) и КВ (f) от степени допирования для соответствующих наночастиц.

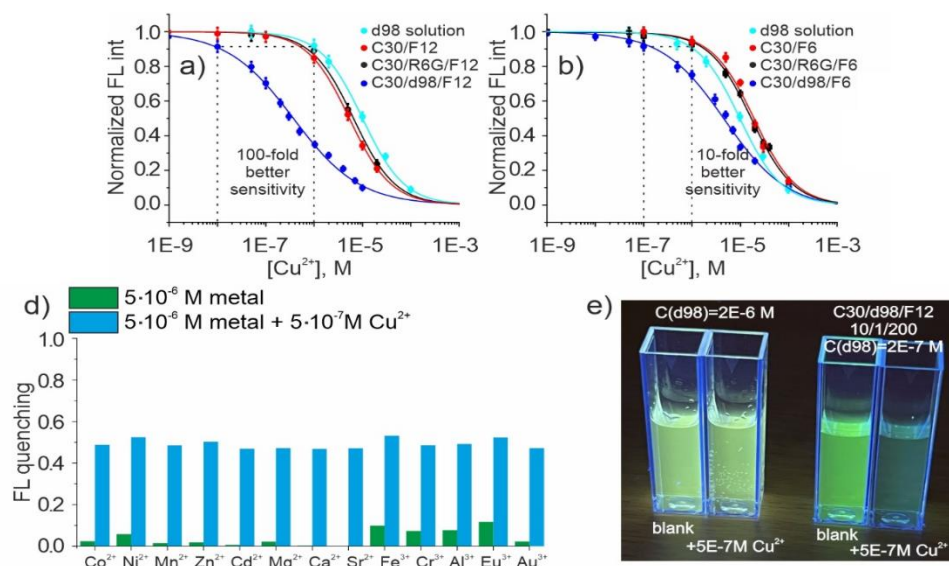


Рис. 2. Зависимость флуоресцентного отклика от концентрации анализируемого вещества для НЧ (a) C30/F12, C30/R6G/F12, C30/d98/F12 и (b) C30/F6, C30/RG/F6, C30/d98/F12. (d) Влияние конкурирующих ионов ($5 \cdot 10^{-6}$ М) на величину отклика наносенсора C30/d98/F12 при концентрации Cu^{2+} $5 \cdot 10^{-7}$ М. (e) Фотография, демонстрирующая оптический отклик d98 в растворе и внутри НЧ при освещении светодиодом 365 нм.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе продемонстрирована новая стратегия усиления сенсорных характеристик флуоресцентных хемосенсоров на основе родаминовых красителей, которая основана на включении молекулы хемосенсора в светособирающие наночастицы, способствующие его резонансному фотовозбуждению множеством молекул доноров. На основе коммерчески доступного хемосенсора мы разработали FRET-наносенсор с пределом обнаружения 1 нМ, который возможность обнаружения низких концентраций Cu^{2+} невооруженным глазом даже в присутствии широко спектра конкурирующих ионов.

БЛАГОДРНОСТЬ

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 20-53-76016 ЭРА_т.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Tutov MV, Sergeev AA, Zadorozhny PA, Bratskaya SY, Mironenko AY. Dendrimeric rhodamine based fluorescent probe for selective detection of Au // *Sensors Actuators, B Chem* 2018, v. 273, p. 916–920.
2. Mironenko AY, Tutov M V., Sergeev AA, Voznesenskiy, Bratskaya SY. On/off rhodamine based fluorescent probe for detection of Au and Pd in aqueous solutions // *Sensors Actuators, B Chem* 2017, v. 246, p. 389–394.
3. Wang L, Ding H, Ran X, Tang H, Cao D. Recent progress on reaction-based BODIPY probes for anion detection // *Dye Pigment* 2020, v. 172, P. 107857.
4. La M, Hao Y, Wang Z, Han GC, Qu L. Selective and Sensitive Detection of Cyanide Based on the Displacement Strategy Using a Water-Soluble Fluorescent Probe // *J Anal Methods Chem* 2016.
5. Sergeeva KA, Tutov M V., Voznesenskiy SS, Shamich NI, Mironenko AY, Sergeev AA. Highly-sensitive fluorescent detection of chemical compounds via photonic nanojet excitation // *Sensors Actuators, B Chem* 2020, v. 305.
6. Trofymchuk K, Reisch A, Didier P, Frasc F, Gilliot P, Mely Y, et al. Giant light-harvesting nanoantenna for single-molecule detection in ambient light // *Nat Photonics* 2017, v. 11, p. 657–653.
7. Andreiuk B, Aparin IO, Reisch A, Klymchenko AS. Bulky Barbiturates as Non-Toxic Ionic Dye Insulators for Enhanced Emission in Polymeric Nanoparticles // *Chem – A Eur J* 2021, v. 27, p. 12877–83.
8. Shulov I, Oncul S, Reisch A, Arntz Y, Collot M, Mely Y, et al. Fluorinated counterion-enhanced emission of rhodamine aggregates: Ultrabright

- nanoparticles for bioimaging and light-harvesting //Nanoscale 2015,v.7,p.18198–210.
9. Aparin IO, Melnychuk N, Klymchenko AS. Ionic Aggregation-Induced Emission: Bulky Hydrophobic Counterions Light Up Dyes in Polymeric Nanoparticles // Adv Opt Mater 2020, v. 8, P. 2000027.
10. Mironenko A. Y. et al. A novel rhodamine-based turn-on probe for fluorescent detection of Au³⁺ and colorimetric detection of Cu²⁺ // Tetrahedron. – 2019, v. 75, p. 1492-1496.

HIGHLY SENSITIVE DETECTION OF CU²⁺ IONS BY A FLUORESCENT NANOSENSOR WITH ENHANCED RESPONSE BY FÖRSTER RESONANT ENERGY TRANSFER

A.K. Chepak ^{1,2}, M.V. Tutov ^{1,2}, S.Yu. Bratskaya ¹, A.Yu. Mironenko ¹

¹Institute of Chemistry FEB RAS

(690022, Vladivostok, Ave. 100th Anniversary of Vladivostok, 159)

²Far Eastern Federal University,

(690950, Vladivostok, Sukhanova st. 8)

e-mail: chepak.ak@mail.ru

In this work, we demonstrate a new strategy for increasing the sensitivity of rhodamine-based fluorescent chemosensors by enhancing their fluorescent signal inside light-harvesting nanoparticles. This strategy is based on the inclusion of sensor molecules in light-harvesting nanoparticles for pumping an optical signal due to Förster energy transfer (FRET). This approach was implemented on a simple chemosensor for the determination of Cu²⁺, as a result of which its detection limit was reduced by 2 orders of magnitude and amounted to less than 1 nmol/l.

Keywords: fluorescent nanoprobe, chemosensor, FRET.

ТРЕХЧАСТИЧНЫЕ МЮОННЫЕ СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ В МЕТОДЕ КОМПЛЕКСНОГО ВРАЩЕНИЯ КООРДИНАТ

А.В. Эскин¹

¹Самарский государственный университет,
кафедра общей и теоретической физики
(443011, г. Самара, ул. Академика Павлова, 1)
e-mail: EskinAlexey1992@gmail.com

Выполнен расчет уровней энергии трехчастичных мюонных связанных состояний с использованием метода комплексного вращения координат и стохастического вариационного метода в квантовой электродинамике. Базисные волновые функции выбраны в гауссовой форме, что позволило вычислить матричные элементы гамильтониана аналитически. Для численного расчета энергии связанных состояний написан компьютерный код в системе MATLAB.

Ключевые слова: стохастический вариационный метод, метод комплексного вращения координат, гауссовы волновые функции.

1. ВВЕДЕНИЕ

Низкоэнергетические взаимодействия атомных ядер представляют большой интерес. Они дают ценную информацию о нуклон-нуклонном взаимодействии [1], имеют большое значение для астрофизики и космологии [2, 3], легкие ядра участвуют в первичном нуклеосинтезе. Также очень интересная физика может быть найдена в реакциях синтеза дейтронов и ядер лития $d+{}^7_3\text{Li}$ под воздействием лазерного излучения [4]:



Данные о столкновении ядра с ядром плохо изучены при энергиях ниже области 1 кэВ [5]. Между тем ядерная астрофизика имеет дело с ядерными реакциями, происходящими внутри звездных объектов при таких низких энергиях, и, таким образом, в этой области производится экстраполяция по имеющимся данным рассеяния. Однако в некоторых системах легких ядер можно изучать ядерные реакции при низких энергиях, а именно реакции между ядрами, заключенными в мюонные молекулы [6]. Находясь в молекулярном состоянии, ядра имеют относительно небольшую кинетическую энергию, и любая возможная реакция может рассматриваться

как пороговая реакция. Новейшее развитие мюонного катализа связано с изучением мезоатомных и мезомолекулярных процессов в смеси дейтерия и трития.

1.МЕТОД КОМПЛЕКСНОГО ВРАЩЕНИЯ КООРДИНАТ В ЗАДАЧЕ ОКВАЗИСВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЯХ $HeD\mu$ И $LiD\mu$

В этом параграфе представлены точные численные расчеты квазисвязанных состояний молекулярных ионов ${}^3HeD\mu$, ${}^4HeD\mu$, ${}^6LiD\mu$ и ${}^7LiD\mu$, которые могут быть полезны для изучения низкоэнергетических реакций.

Чтобы решить трехчастичную ($d\mu Li^{++}$) кулоновскую задачу, мы используем метод комплексного координатного вращения (CCR), который успешно используется в атомной физике для расчета положений и ширин резонансных состояний [7]. Преимущество метода вращения комплексных координат для исследования резонансов состоит в том, что параметры резонанса могут быть получены с использованием волновых функций L^2 -типа (типа связанного состояния). Этот метод, в котором асимптотические волновые функции не обязательно включены имеет большое вычислительное преимущество.

Основная идея этого метода заключается в сложном вращении пространственных координат:

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r} \exp \theta, \quad \theta = \theta_r + i\theta_i. \quad (2)$$

что делает волновую функцию резонансного состояния квадратно интегрируемой. Это, в свою очередь, позволяет использовать вариационные методы для определений местоположения, поскольку при вращении положения резонансных полюсов остаются нетронутыми. Другое преимущество этого подхода состоит в том, что поиск резонансов как собственных значений в комплексной плоскости имеет строгую математическую основу [8].

Представляющая интерес система состоит из трех частиц, отрицательного мюона с массой m_μ и двух ядер с массами M_a и M_b , где a в дальнейшем обозначает ядро лития (для примера), а b - дейтрон. Гамильтониан (в мюонных атомных единицах $e = \hbar = m_\mu = 1$) после отделения центра масс можно записать в виде:

$$H = -\frac{1}{2\mu_1}\Delta_{r_1} - \frac{1}{2\mu_2}\Delta_{r_2} - \Delta_{r_1} \cdot \Delta_{r_2} - \frac{3}{r_1} - \frac{1}{r_2} + \frac{3}{R}, \quad (3)$$

где \bar{r}_1 и \bar{r}_2 – векторы к мюону от двух ядер, R обозначает расстояние между ядрами, а $\mu_i = \frac{m_\mu M_i}{m_\mu + M_i}$ – приведенные массы соответствующих мюонных атомов ($i = 1, 2$). Этот набор координат \bar{r}_1, \bar{r}_2 и \bar{R} наиболее подходит для решения молекулярной задачи трех тел.

В теории вращения комплексных координат резонансное состояние определяется как решение задачи на собственные значения

$$(H(\theta) - E)\Psi = 0, \quad H(\theta) = U(\theta)HU^{-1}(\theta), \quad (4)$$

для гамильтониана $H(\theta)$ аналитически продолжается в комплексную плоскость параметра дилатации θ преобразования (2)[9, 10]. Соответствующее преобразование молекулярных состояний в гильбертовом пространстве определяется через:

$$[U(\theta)\Psi](\bar{r}) = e^{\frac{3\theta}{2}}\Psi(e^\theta\bar{r}). \quad (5)$$

Такое преобразование имеет большое вычислительное преимущество для систем с кулоновскими взаимодействиями. Кинетическая и потенциальная части масштабируются как $e^{-2\theta}$ и $e^{-\theta}$ соответственно, а гамильтониан может быть записан как

$$H(\theta) = Te^{-2\theta} + Ve^{-\theta}. \quad (6)$$

В расчетах используется стохастический вариационный метод, с использованием гауссова базиса со случайно выбранными нелинейными вариационными параметрами. Этот подход обсуждался и развивался в [11-14]. Детали и особенности стратегии выбора вариационных нелинейных параметров и построения базисных множеств, которые были приняты в настоящей работе, можно найти в [15].

Расчет резонансов с помощью стохастического вариационного метода осуществляется в четыре этапа:

1. Сначала применяется стандартный расчет с помощью стохастического вариационного метода с фиксированным размером базиса. В этом расчете нелинейные параметры оптимизируются для основного состояния энергии.

2. На втором этапе, используя нелинейные параметры, найденные на первом этапе, вычисление ССР метода выполняется на той же основе. Имея результат расчетов с несколькими значениями θ , можно легко определить предполагаемые положения нескольких резонансов.

3. На третьем этапе мы используем стандартный стохастический вариационный метод, но вместо оптимизации самого низкого энергетического (основного) состояния мы оптимизируем состояние, энергия которого

наиболее близка к положению (энергии) выбранного резонансного состояния. Для достижения этой цели:

3.1. Увеличиваем размер базиса, используя процесс стохастического выбора с требованием оптимизации для выбранного резонансного состояния, найденного на этапе 2;

3.2. Затем пересчитываем, какое состояние является наиболее близким к расчетному положению резонанса, и возвращаемся к этапу 3.1.

4. На четвертом и последнем этапе вычисление ССР метода выполняется с использованием нелинейных параметров, найденных на этапе 3.

Решая задачу на собственные значения комплексной неэрмитовой матрицы

$$Ac_k = E_k Bc_k, \quad (7)$$

где

$$A = \langle \Psi | H(\theta) | \Psi \rangle, B = \langle \Psi | \Psi \rangle. \quad (8)$$

Соответствующие дискретные комплексные собственные значения имеют вид

$$E_k = E_r - \frac{i\Gamma}{2}, \quad (9)$$

где E_r задает положение, а Γ - ширину резонанса.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью стохастического вариационного метода решаем численно (7) для получения энергии и ширины интересующих резонансных состояний. Мы используем гауссовы пробные волновые функции. Иллюстрация расчетов Р-состояния в ионе ${}^6_3\text{Li}d\mu$ показана на рис. 1. Взяв стационарную точку траекторий вращения, получим параметры резонанса: $E_r = -13,568$ эВ и $\Gamma/2 = 0,00817$ эВ. E_r отсчитывается от пороговой энергии $d\mu + {}^6_3\text{Li}$. Другие результаты наших расчетов приведены в таблице 1. Для

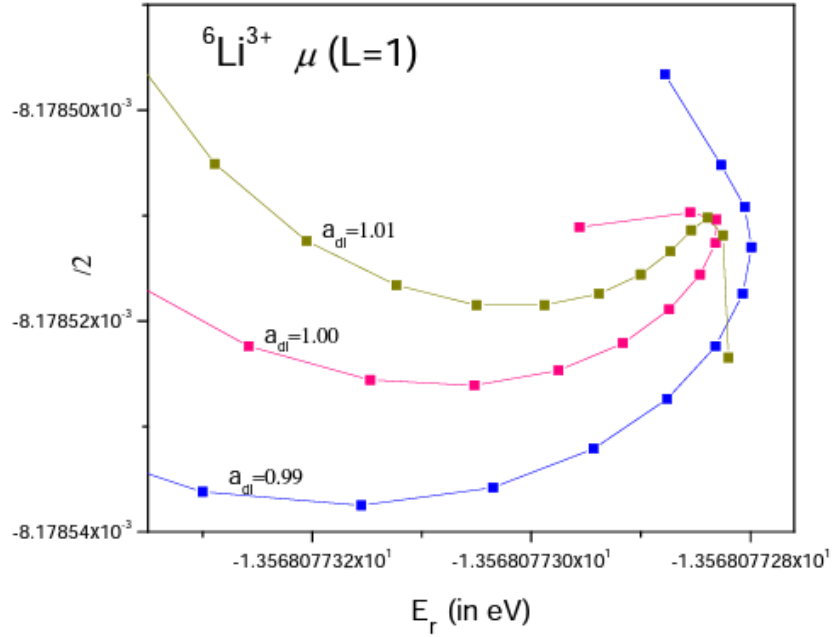


Рис. 1. Пути вращения, энергия (E_r) и полуширина ($\Gamma/2$) резонансного состояния ${}^6_3\text{Li}d\mu(L=1)$. В расчетах использовались три траектории с параметрами дилатации ($a_{dl} = e^{\text{Re}[\theta]}$): $a_{dl} = 0,99, 1,0, 1,01$ и параметрами вращения $\phi = \text{Im}[\theta] = 0,10, 0,11, \dots, 0,30$

состояний $L = 0,1$ полученная численная точность соответствует количеству цифр, указанному в таблице 1.

Таблица 1. Численные значения резонансных положений E_r для ${}^3_2\text{He}d\mu, {}^4_2\text{He}d\mu, {}^6_3\text{Li}d\mu$ и ${}^7_3\text{Li}d\mu$.

| $E_r({}^3_2\text{He}d\mu),$ $L = 0, \text{эВ}$ | $E_r({}^4_2\text{He}d\mu),$ $L = 0, \text{эВ}$ | $E_r({}^6_3\text{Li}d\mu),$ $L = 0, \text{эВ}$ | $E_r({}^7_3\text{Li}d\mu),$ $L = 0, \text{эВ}$ | $E_r({}^6_3\text{Li}d\mu),$ $L = 1, \text{эВ}$ | $E_r({}^7_3\text{Li}d\mu),$ $L = 1, \text{эВ}$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 70.483 70.6 [16] | 78.550 78.7 [16] | 20.308 | 21.456 | 13.568 | 14.817 |

Из таблицы 1 следует, что наши результаты расчетов энергий резонансных состояний для дейтерида гелия согласуются с результатами работы [16].

Данная работа была поддержана грантом Фонда развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (Грант 22-1-1-23-1).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. J.L. Friar, The structure of light nuclei and its effect on precise atomic measurements // *Can. J. Phys.*, 2002, v.80, p.1337-1346.
2. A.M. Boesgaard and G. Steigman, Big bang nucleosynthesis: theories and observations // *Annu. Rev. Astron. Astrophys.*, 1985, v.3, p.313-378.
3. R.H. Cyburt [et al], Big bang nucleosynthesis: present status // *Rev. Mod. Phys.*, 2016, v.88, p.015004.
4. J.R. Zhao [et al], A novel laser-collider used to produce monoenergetic 13.3 MeV ${}^7\text{Li}(d; n)$ neutrons // *Nature Sci. Rep.*, 2016, v.6, p.27363.
5. L.N. Bogdanova, S.S. Gershtein, and L.I. Ponomarev, Nuclear fusion in the mesic molecule $d\mu^3\text{He}$ // *JETP Lett.*, 1998, v.67, p.89-94.
6. S.S. Gershtein, Yu. V. Petrov, L.I. Ponomarev, Muon catalysis and nuclear breeding // *Sov. Phys. Usp*, 1990, v.33. p. 591-615.
7. Y.K. Ho, The Method of Complex Coordinate Rotation and its Applications to Atomic Collision Processes // *Phys. Reports*, 1983, v.99, p.1-68.
8. J.Zs. Mezei, A.T. Kruppa, K. Varga, Charged exciton resonances in two and three dimensions // *Few Body Syst.*, 2007, v. 41, p. 233–244.
9. A.M. Frolov and V.D. Efros, Accurate solution method in the three-body problem and binding energies of mesic molecules // *Pis'maZh. Eksp. Teor. Fiz.*, 1984, Vol.39, p.449–452.
10. S.A. Alexander and H.J. Monkhorst, High-accuracy calculation of muonic molecules using randomtempered basis sets // *Pis'maZh. Eksp. Phys. Rev. A.*, 1988, v. 38, p. 26–32.
11. A. V. Eskin [et al.], Energy levels of mesomolecular hydrogen ions in variational approach // *Bull. Lebedev Phys. Inst.*, 2019, v. 46, p. 143-147.
12. A.V. Eskin [et al], Fine and Hyperfine Structure of Muonic Helium // *Bull. RAS: Phys.*, 2020, v. 84, p. 258-262.
13. A. V. Eskin [et al.], Excited states of mesomolecules $d\mu$, $p\mu$, $t\mu$ in variational method // *Phys. Part. Nuclei*, 2019, v. 50, p. 633—634.
14. A.V. Eskin [et al], Energy levels in muonic helium // *EPJ Web Conf.*, 2019, v.222, p. 03009.
15. V.I. Korobov [et al], Nonrelativistic energies and predissociation widths of quasibound states in the Li^{3+} - $d\mu$ molecular ions // *J. Phys. B.*, 2020, v. 53, p. 065001.
16. A.V. Kravtsov, A.I. Mikhailov, V.I. Savichev, Calculation of the decay rates of hydrogen-helium mesic molecules // *Hyp. Inter.*, 1993, v. 82, p. 205-210.

THREE-PARTICLE MUON BOUND STATES IN THE METHOD OF COMPLEX COORDINATE ROTATION

A.V. Eskin¹

¹*Samara National Research University,
(Moskovskoyeshosse, 34, Samara, Russia, 443086)
e-mail: EskinAlexey1992@gmail.com*

Three-particle muon bound states are calculated using the method of complex rotation and the stochastic variational method in quantum electrodynamics. The basis wave functions are chosen in the Gaussian form, which made it possible to calculate the matrix elements of the Hamiltonian analytically. For numerical calculation of the energy levels, a computer code was written in the MATLAB system.

Keywords: stochastic variational method, complex coordinate rotation method, Gaussian wave functions.

ИССЛЕДОВАНИЕ АКТИВНОЙ СРЕДЫ ЛОНИГ МЕТОДОМ ДЛС

А.В. Юрьев, Ю.А. Адаменков, М.А. Горбунов, В.А. Шайдулина,

А.А. Калачева

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ»

(607190, г. Саров, ул. Мира, 37)

e-mail: oefimova@otd13.vniief.ru

Представлено определение концентрации и времени жизни метастабильных атомов, нарабатываемых в импульсно-периодическом разряде, методом диодной лазерной спектроскопии в различных режимах работы ЛОНИГ.

Ключевые слова: лазер с оптической накачкой, лазер с оптической накачкой на инертных газах (ЛОНИГ), диодная накачка, инертные газы, метод диодной лазерной спектроскопии (ДЛС), метастабильные атомы, лазерные технологии.

1. ВВЕДЕНИЕ

Лазер с оптической накачкой на инертных газах (ЛОНИГ) – это новый тип газовых лазеров с оптической накачкой и высокой квантовой эффективностью, позволяющий преобразовывать высокую выходную мощность диодного лазера в выходную мощность газового лазера с хорошим качеством луча. В работе [1] была продемонстрирована первая генерация на длине волны 912,55 нм. Согласно опубликованным открытым источникам в мире произошёл серьёзный скачок в изучении свойств активной среды на модели лазерного источника на смеси инертных газов с оптической накачкой. Был оптимизирован разряд [2,3]. Разряд стал устойчивым при атмосферном давлении и эффективным в наработке метастабильных атомов.

ЛОНИГ использует для генерации лазерного излучения метастабильные атомы инертных газов, наработанные в газовом разряде, и этап их получения является одним из ключевых в работе лазера. Поэтому важно иметь представление о концентрации и времени жизни метастабильных атомов в проводимых экспериментах.

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

На рисунке 1 изображена схема эксперимента по измерению интенсивности излучения зондирующего лазера. Electroды изготовлены из танталовой ленты и расположены параллельно на расстоянии 3 мм. Длина

электродов составляет 15 мм. Ширина электродов составляет 3 мм. Аналогичная схема используется в [4].

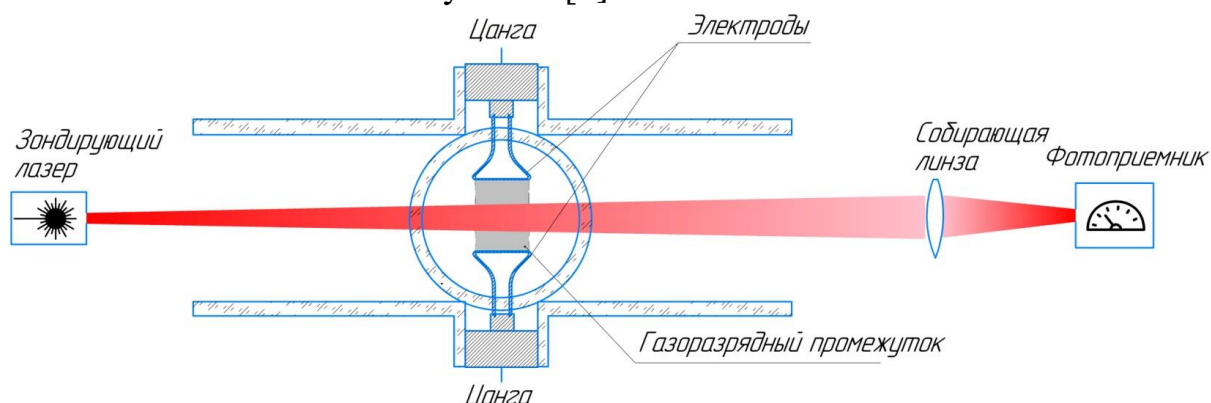


Рис. 1. Схема кюветы, содержащей активную зону ЛОНИГ (вид со стороны оптического окна)

В качестве активной среды использовалась смесь гелия с аргоном, концентрация которого составляла 3%. Эксперименты производились при давлении, равном 1,1 атм. Питание электродов осуществлялось от источника напряжения, который генерировал импульсы длительностью 80 нс с частотой повторения импульсов 100 кГц. Амплитуды силы тока и напряжения в разряде составляют 17 А и 1,8 кВ.

При проведении экспериментов излучение зондирующего лазера пропускать через активную среду и фокусировалось на входном окне фотоприемника. Проводились измерения интенсивности ЛИ при наличии поглощения (включенный разряд) и при отсутствии поглощения (выключенный разряд). По полученным данным определялись концентрация и время жизни метастабильных атомов аргона.

3. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

На рисунке 2 представлены энергетические уровни атомов аргона, участвующие в лазерном цикле, и кинетика переходов между ними [3]. В первом приближении данная модель упрощается до трех уровней – нижнего лазерного уровня, уровня накачки и верхнего лазерного уровня.

Нижним лазерным уровнем служит низшее по энергии метастабильное состояние аргона $1s_5$, заселение которого происходит при использовании электрического разряда. Лазерный цикл ЛОНИГ включает в себя оптическое возбуждение перехода между $1s_5$ и $2p_9$, столкновительную релаксацию на уровень $2p_{10}$ и лазерную генерацию на переходе между $2p_{10}$ и $1s_5$.

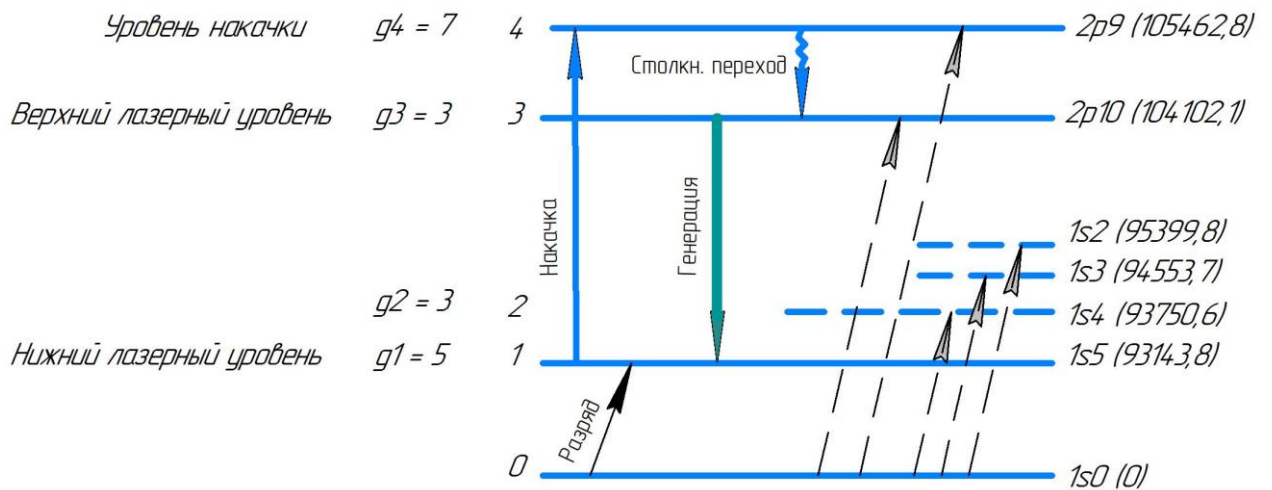


Рис. 2. Уровни атома аргона, принимающие участие в лазерном цикле

Проведенные эксперименты продемонстрировали, что максимум поглощения излучения зондирующего лазера наступает спустя 1-2 мкс после прохождения разряда, что значительно превышает время прохождения разряда (80 нс). Было выдвинуто и введено в математическую модель предположение о том, что при прохождении разряда происходит возбуждение атомов аргона из основного состояния на все уровни мультиплетов $-s$ и $-p$, и каскадная релаксация с этих уровней на метастабильный уровень $1s_5$ вызывает задержку.

Для введения данного предположения в математическую модель все заполняемые в разряде энергетические уровни аргона, кроме $1s_5$, объединялись в общий уровень с некоторым усредненным временем жизни τ_b .

Основой модели является закон Бугера – Ламберта - Бера, который после ряда математических преобразований принял вид

$$I(t) = I_0 \cdot e^{-\sigma_{ul} \cdot \frac{g_u}{g_l} \cdot N_r \cdot \left[1 + k \cdot e^{-\frac{t}{\tau_b}} + (1+k) \cdot \frac{e^{-\frac{T}{\tau_b}}}{1 - e^{-\frac{T}{\tau_b}}} \right]} \cdot e^{-\frac{t}{\tau_a} \cdot (1 - e^{-\frac{t}{\tau_p}})} \cdot L + I_F \quad (1)$$

где τ_a – время жизни уровня $1s_5$; τ_b – время жизни усредненного уровня; N_r – концентрация метастабильных атомов на нижнем лазерном уровне; k – коэффициент пропорциональности между концентрацией атомов на уровне $1s_5$ и концентрацией атомов на усредненном уровне; L – длина активной среды; I_0 – интенсивность излучения зондирующего лазера, проходящего через активную среду при отсутствии поглощения; I_F – интенсивность фонового излучения; σ_{ul} – сечение поглощения; τ_p – время нарастания фотодатчика; T – период разряда; g_u и g_l – кратности вырождения.

Данное соотношение справедливо для случая совпадения центров линий поглощения аргона и излучения зондирующего лазера.

В каждом из экспериментов оставались неизвестными время жизни усредненного уровня τ_b , время жизни нижнего лазерного уровня τ_a и концентрация метастабильных атомов на нижнем лазерном уровне N_r . Для определения данных параметров уравнение (1) записывалось для трех различных экспериментально полученных точек, и производилось решение системы уравнений.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА

Эксперименты были проведены для электродов 15 мм. Зондирование производилось при продольном режиме расположения электродов. Температура газа в кювете предполагалась равной 700 К.

При проведении экспериментов было выявлено, что переход ЛОНИГ от открытого к замкнутому режиму работы сопровождается постепенным уменьшением мощности генерации, которое указывает на наличие сторонних примесей, приводящих к тушению возбужденных атомов аргона и к уменьшению мощности генерации. Это подтверждалось тем фактом, что при включении в газовую систему перед входом в кювету ловушки с жидким азотом для вымораживания примесей мощность генерации в замкнутой системе увеличивалась.

Были проведены четыре серии измерений интенсивности излучения зондирующего лазера, прошедшего через активную среду ЛОНИГ – как в замкнутом, так и в открытом режиме работы лазера; как при охлаждении жидким азотом, так и без него. Результаты измерений представлены на рисунке 3 и в таблице 1.

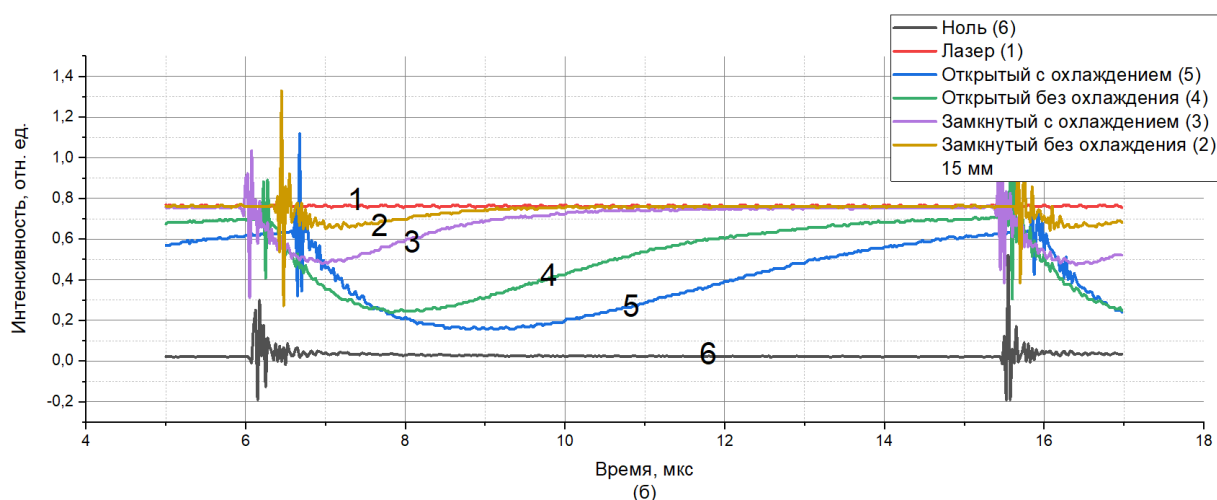


Рис. 3. Результаты измерений интенсивности излучения зондирующего лазера

Таблица 1. Концентрация и время жизни метастабильных атомов.

| | Концентрация метастабильных атомов N_0 , $10^{12} \cdot \text{см}^{-3}$ | Время жизни на нижнем лазерном уровне τ_a , мкс | Время жизни на усредненном уровне τ_b , мкс |
|--------------------------|---|--|--|
| Открытый с охлаждением | 7,1 | 2,9 | 0,30 – 0,33 |
| Открытый без охлаждения | 5,6 | 2,7 | 0,30 – 0,33 |
| Замкнутый с охлаждением | 2,3 | 1,8 | 0,30 – 0,33 |
| Замкнутый без охлаждения | 0,9 | 1,1 | 0,30 – 0,33 |

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Были проведены измерения интенсивности излучения зондирующего лазера в различных режимах работы ЛОНИГ и по полученным данным определены концентрация и время жизни метастабильных атомов на нижнем лазерном уровне. Значения концентрации и времени жизни находятся в пределах $(0.9 - 7.1) \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ и $1.1 - 2.9$ мкс соответственно. Полученные результаты демонстрируют увеличение концентрации и времени жизни метастабильных атомов при переходе от замкнутого режима работы ЛОНИГ к открытому и при использовании азотной ловушки, что позволяет сделать вывод о влиянии примесей, приводящих к тушению возбужденных атомов и оказывающих негативное влияние на мощность генерации.

Полученная модель позволяет проводить различные исследования активной среды для определения наиболее оптимальных параметров газовой системы и отслеживания процессов, приводящих к изменению концентрации и времени жизни метастабильных атомов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1 J. Han, M.C. Heaven. Gain and lasing of optically pumped metastable rare gas atoms // Optics Letters. – 2012. - Vol. 37, No. 11, pp 2157-2159
- 2 D. J. Emmons, D. E. Weeks. Kinetics of high pressure argon-helium pulsed gas discharge// Journal of Applied Physics. – 2017. – Vol. 121, No. 20.

- 3 J. Han, L. Glebov, G. Venus, M.C. Heaven. Demonstration of diode-pumped metastable Ar laser // Optics Letters. – 2013. - Vol. 38, No. 24, pp 5458-5461
- 4 А.Р. Гильдина, П.А. Михеев, А.К. Чернышов, Н.И. Уфимцев, В.Н. Аязов – Коэффициенты столкновительного уширения линий аргона и криптона в низкотемпературной плазме. – Фотоника, 2017, т.65, с.44 - 51

INVESTIGATION OF THE LONIG ACTIVE MEDIUM BY THE DLS METHOD

A.V. Yuriev, Yu.A. Adamenkov, M.A. Gorbunov, V.A. Shaidullina, A.A. Kalacheva

RFNC-VNIIEF

(Mira str, 37, Sarov, Russia, 607190)

The determination of the concentration and lifetime of metastable atoms produced in a repetitively pulsed discharge by diode laser spectroscopy in various OPRGL operating modes is presented.

Keywords: optical pump rare gas laser (OPRGL), diode pump, rare gas, gas laser, metastable atoms, diode laser spectroscopy (DLS).

ИССЛЕДОВАНИЕ ТИПОВ НЕУСТОЙЧИВОСТЕЙ В ШИРОКОАПЕРТУРНЫХ ЛАЗЕРАХ С ФАКТОРОМ ГЕНРИ

Е.А. Ярунова^{1,2}, А.А. Кренц^{1,2}, Н.Е. Молевич^{1,2}

¹Самарский университет им. С.П. Королёва
(443086, г. Самара, Московское шоссе, 34)

²Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева РАН
(443011, г. Самара, ул. Ново-Садовая, 221)
e-mail: liza.yarunova@mail.ru

В данной работе анализируется модель, описывающая широкоапертурный лазер с вертикальным резонатором, которая включает в себя основные физические процессы, а также диффузию и фактор Генри, который определяет различные нежелательные свойства лазера и характерен для полупроводников. В работе изучаются неустойчивости однородного стационарного решения, которые приводят либо к другому однородному состоянию - неустойчивость плоской волны (plane wave instability), либо к пространственным структурам (modulational instability). Для этого выполнялся линейный анализ устойчивости системы и получены области неустойчивости для различных значений параметров.

Ключевые слова: широкоапертурные лазеры, фактор Генри.

1. ВВЕДЕНИЕ

Ранее было обнаружено, что динамика широкоапертурных полупроводниковых лазеров подвержена неустойчивостям, которые формируют пространственные структуры [1]. Эта неустойчивость имеет тенденцию проявляться в таких условиях, когда зависимость однородного стационарного решения от вводимого в резонатор излучения имеет S-образную форму [2-4]. Это возможно за счет добавления внешней оптической инжекции в систему. Кроме того, для полупроводниковых лазеров необходимо учитывать наличие коэффициента увеличения ширины линии α (также называемый фактором Генри или альфа-фактором), который определяет зависимость показателя преломления от плотности носителей в полупроводнике [5], поэтому представляет интерес исследовать, как альфа фактор влияет на S - кривую. Ранее уже выполнялось исследование подобной системы при выборе опорной частоты, такой что отстройка от частоты резонатора $\theta = -\alpha$, где α - фактор Генри. [6] Интерес так же представляет

рассмотреть поведение системы при варьировании фактора Генри, это возможно лишь в том случае, когда в систему добавляется внешнее оптическое излучение и однородное стационарное решение принимает неявный вид. В работе определяются границы области неустойчивости в пространстве параметров системы, а также выводятся соответствующие дисперсионные кривые.

2.ОПТИЧЕСКАЯ БИСТАБИЛЬНОСТЬ В СИСТЕМЕ ШИРОКОАПЕРТУРНОГО ЛАЗЕРА

2.1. Математическая модель и однородное стационарное решение

В последние годы было опубликовано несколько работ, в которых подробно рассматривается система уравнений, описывающая динамику лазера с вертикальным резонатором (VCSEL) [7-9]:

$$\begin{cases} \frac{\partial E}{\partial t} = -[1 + i\theta + 2C(i\alpha - 1)(N - 1)]E + i\Delta_{\perp}E + E_i, \\ \frac{\partial N}{\partial t} = -\gamma[N - I_p + |E|^2(N - 1)] + \gamma d\Delta_{\perp}N, \end{cases} \quad (1)$$

где E , N , - безразмерные огибающие электрического поля и инверсии населённости соответственно. E_i - огибающая электрического поля, инжектируемого в резонатор. Рассматривается активная конфигурация системы, которая характеризуется Фактором Генри – α . Подробное описание параметров системы приведено в работе [1]. Стационарное однородное решение (E_s, N_s) системы уравнений (1) легко получить, положив равными нулю производные по времени и оператор Лапласа, что дает

$$|E_i|^2 = |E_s|^2 \left[(\theta + 2C\alpha(N_s - 1))^2 + (1 - 2C(N_s - 1))^2 \right], \quad (2)$$

$$N_s = \frac{I + |E_s|^2}{|E_s|^2 + 1} \quad (3)$$

При определенном выборе параметров зависимость $|E_s|$ как функции от $|E_i|$ принимает вид S - кривой, что соответствует оптической бистабильности.

На рис. 1(б) показана неявная зависимость $|E_s|(|E_i|)$, а также зависимость

решения уравнения $|E_s|$ при медленном росте $|E_i|$ и убывании $|E_i|$, соответственно (красные кривые). Установлено, что ход кривой для описанных случаев разный, что может свидетельствовать о нетривиальной динамике. Кривые красного пунктирного цвета соответствуют устойчивой области решений. Черные и зеленые кривые на рисунке 1(б) соответствуют неустойчивым значениям, которые согласуются с диаграммой на рисунке 1(а).

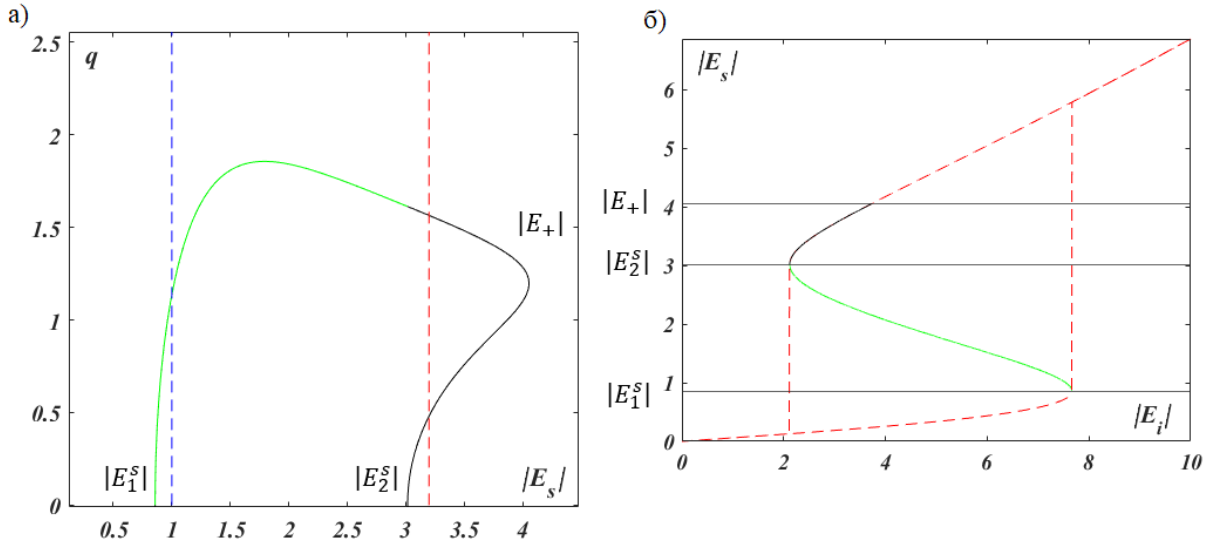


Рис. 1. а) Область неустойчивости б) S-кривая для параметров $\theta = -1.5, \alpha = 5, C = 0.6, I = 4, d = 0.052$.

Ранее уже выполнялся линейный анализ устойчивости при выборе частотной отстройки $\theta = -\alpha$, подробно описанный в [6]. В данной работе мы подробно рассмотрим случай, когда отстройка частоты не равна альфа фактору и для этого обратимся к свободному члену характеристического уравнения [6]:

$$d(q^2)^3 + b_2(q^2)^2 + b_1q^2 + b_0 = 0 \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} b_2 &= 1 + |E_s|^2 + 2d(\theta + 2C\alpha(N_s - 1)) \\ b_1 &= d[(1 - 2C(N_s - 1))^2 + (\theta + 2C\alpha(N_s - 1))^2] + \\ &+ 2(1 + |E_s|^2)(\theta + 2C\alpha(N_s - 1)) - 4C\alpha|E_s|^2(N_s - 1) \\ b_0 &= (1 + |E_s|^2)[(1 - 2(N_s - 1))^2 + (\theta + 2C\alpha(N_s - 1))^2] + \\ &+ 4C|E_s|^2(N_s - 1)[(1 - 2C(N_s - 1)) - \alpha(\theta + 2C\alpha(N_s - 1))] \end{aligned} \quad (5)$$

Данное выражение определяет границу области неустойчивости, которую можно изобразить на плоскости $(q, |E_s|)$, каждая точка представляющий собой положительное решение кубического уравнения, когда $|E_s|$ варьируется. По критерию Рауса-Гурвица [10] область волновых чисел внутри кривой на рисунке 1(а) является неустойчивой. Пересечение области неустойчивости с осью $q = 0$ на рис 1 (а) определяет те стационарные значения $|E_s^1|, |E_s^2|$, которые неустойчивы к возмущениям плоской волны. Они соответствуют так называемым верхней и нижней точке поворота, на бистабильной S - кривой (на рисунке 1 (б) показаны зеленым цветом), а соответствующие им волновые числа ограничены зеленой кривой на рисунке 1(а).

При этом мы можем видеть, что существует область модуляционной неустойчивости ($q \neq 0$), показанная черной кривой на рисунках 1(а,б), ограниченная значением $|E_+|$. Из выражения для области неустойчивости мы можем утверждать, что предельные значения $|E_{\pm}|$ существуют, когда кубическое уравнение (4) имеет два действительных решения, что определяется условием [11] и дает выражение:

$$b_2^2(b_1 - 4b_0b_2) - 2db_1(2b_1^2 - 9b_0b_2) - 27d^2b_0^2 = 0 \quad (6)$$

С помощью этого выражения можно определить границы неустойчивости при варьировании параметров системы.

2.2. Анализ типов неустойчивости в пространстве параметров системы

Используя выражение (4) и (6), были построены области неустойчивости в осях $(|E_s|, \alpha)$ и $(|E_s|, l)$ на рисунке 2. На рисунках хорошо видна область неустойчивых значений $|E_s|$ (показанная черным цветом), выходящих за пределы зеленой области – значения, которые неустойчивы к возмущениям плоской волны. Таким образом, с помощью описанной процедуры можно идентифицировать области в пространстве параметров, где есть несколько типов неустойчивостей.

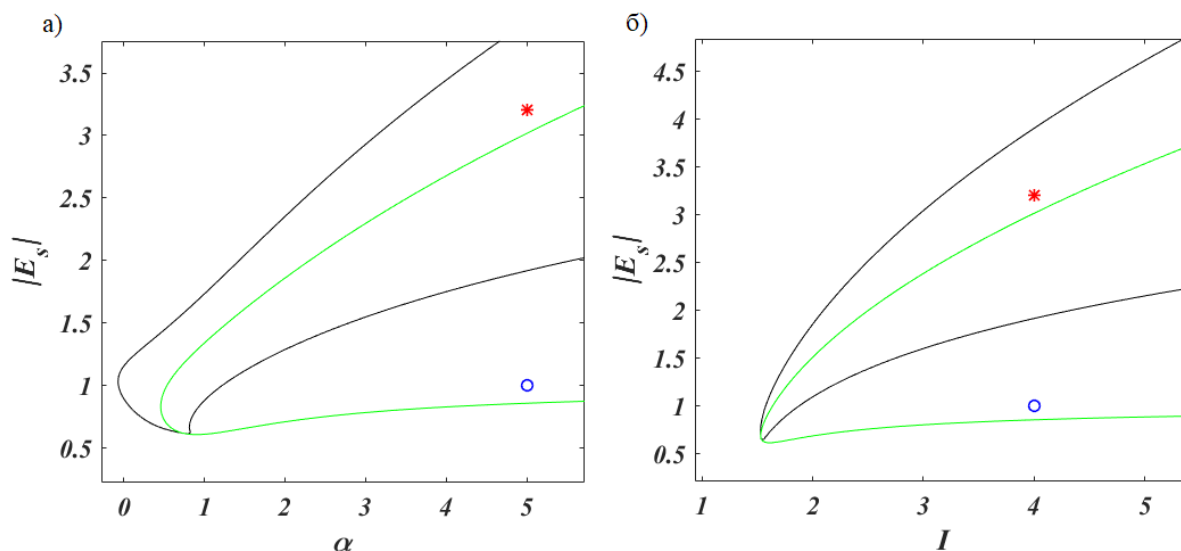


Рис. 2. Области неустойчивости в пространстве параметров а) $\theta = -1.5, C = 0.6, I = 4, d = 0.052$ б) $\theta = -1.5, \alpha = 5, C = 0.6, d = 0.052$.

С диаграмм на рисунке 2 возьмем значение параметров и соответствующие им $|E_s|$ из разных областей неустойчивостей (синие и красные точки). На рисунке 3 получены дисперсионные кривые для обоих случаев. Полученное пространство волновых чисел соответствует диаграмме на рисунке 1(а) и обозначено синей и красной пунктирной кривой, соответственно.

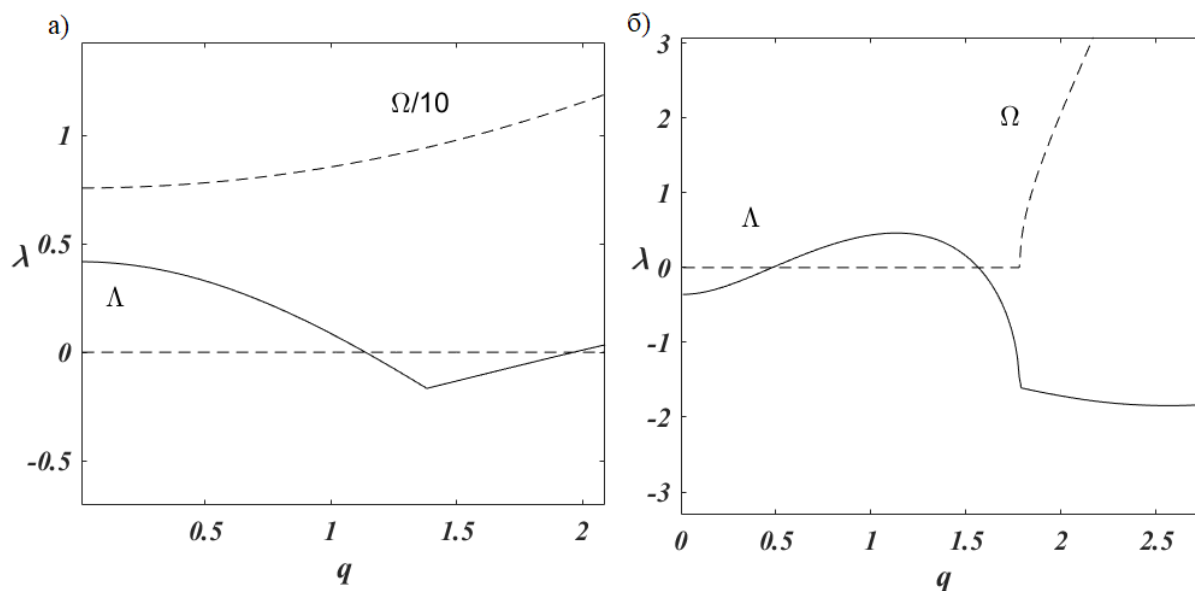


Рис. 3. Дисперсионные кривые для выбранных точек с рисунка 2 для параметров $\theta = -1.5, C = 0.6, I = 4, d = 0.052, \alpha = 5, \gamma = 1$ а) $|E_s| = 1$ - синяя точка б) $|E_s| = 3.2$ - красная точка

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В этой работе мы подробно описали процедуру идентификации областей в пространстве параметров, где есть неустойчивость плоской волны, либо модуляционная, возникающих в системе широкоапертурного лазера с фактором Генри.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (государственное задание по теме 0023-2019-0003, FSSS-2020-0014).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. L. Spinelli, G. Tissoni, M. Brambilla, F. Prati, Spatial solitons in semiconductor microcavities // *Phys. Rev. A.*, 1998, v. 58, p. 2542-2559.
2. M. Brambilla, L. A. Lugiato, F. Prati, L. Spinelli, W. J. Firth, Spatial Soliton Pixels in Semiconductor Devices // *Phys. Rev. Lett.*, 1997, v. 79, p. 2042—2045.
3. C. Rimoldi, F. Gustave, L. Columbo, M. Brambilla, Abnormal chiral events in a semiconductor laser with coherent injection // *Optics Express*, 2017, v. 25. p. 22017-22031.
4. C. Rimoldi, M. Eslami, F. Prati, G. Tissoni, Extreme events in a broad-area semiconductor laser with coherent injection // *Phys. Rev. A*, 2022, v. 105, p. 023525
5. C. Henry, Theory of the linewidth of semiconductor lasers // *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 1982, v. 18, p. 259-264
6. Е.А. Ярунова, А.А. Кренц, Н.Е. Молевич, Исследование влияния альфа фактора на динамику широкоапертурных полупроводниковых лазеров // XIX Всероссийский Молодежный Самарский конкурс-конференция научных работ по оптике и лазерной физике, 2021, стр. 116-122.
7. W. W. Ahmed, S. Kumar, R. Herrero, Stabilization of flat-mirror vertical-external-cavity surface-emitting lasers by spatiotemporal modulation of the pump profile // *Phys. Rev. A* 2015. V. 92. P.043829
8. L. Lugiato, L. Spinelli, G. Tissoni, M. Brambilla, Modulational instabilities and cavity solitons in semiconductor microcavities // *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics*, 1999, v. 1, p. 43-51.
9. G. Tissoni, L. Spinelli, M. Brambilla, Cavity solitons in passive bulk semiconductor microcavities. I. Microscopic model and modulational instabilities // *Journal of the Optical Society of America B*, 1999, v. 16, p. 2083-2094.

10. Н. Е. Молевич Нелинейная динамика: учеб. пособие // Самара: Изд - во Самар, гос. аэрокосм, ун-та, 2007. 160 с.
11. М. Abramowitz, Handbook of Mathematical Functions With Formulas, Graphs and Mathematical Tables // *Journal of Applied Mechanics* 32 .1964 P.17.

INVESTIGATION OF TYPES OF INSTABILITIES IN BROAD-AREA SEMICONDUCTOR LASERS WITH THE HENRY FACTOR

E.A. Yarunova^{1,2}, A.A. Krents^{1,2}, N.E. Molevich^{1,2}

¹LebedevPhysicalInstitute, Samara Branch

(Novo-Sadovaya str., 221, Samara, Russia, 443011)

²Samara National Research University,

(Moskovskoyeshosse, 34, Samara, Russia, 443086)

e-mail: liza.yarunova@mail.ru

In this paper, we analyze a model describing a broad-area laser with a vertical resonator, which includes the main physical processes, as well as diffusion and the Henry factor, which determines various undesirable properties of the laser and is characteristic of semiconductors. The paper studies the instabilities of a homogeneous stationary solution, which lead either to another homogeneous state - the instability of a plane wave, or to spatial structures (modulational instability). To do this, a linear analysis of the stability of the system was performed and instability regions were obtained for various sets of parameters.

Keywords: broad-area lasers, Henry factor.

ДОКЛАДЫ ВНЕ КОНКУРСА

ФАНТОМНАЯ МИКРОСКОПИЯ С ПРИМЕНЕНИЕМ НЕМАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ЯЧЕЙКИ В КАЧЕСТВЕ МОДУЛЯТОРА СВЕТА

Н.Н. Давлетшин^{1,2}

¹*Институт инженерной физики и радиоэлектроники СФУ*

²*Институт Физики им. Л.В. Киренского ФИЦ КНЦ СО РАН*

email: kdavletshin@iph.krasn.ru

В данной работе рассматривается применение нематической жидкокристаллической ячейки в качестве модулятора для метода фантомных изображений. Построена схема для получения микроскопических фантомных изображений. Продемонстрирована методика восстановления микроскопических объектов методом фантомных изображений. Проведен анализ качества полученных результатов с использованием индекса структурного подобия.

Ключевые слова: НРНТ, одиночные центры окраски, центры окраски в алмазах.

ЭФФЕКТ МЕРЦАНИЯ ЗАМЕДЛЕННОЙ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ ОДИНОЧНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ

М. А. Князева^{1,2,3,4}, А.О. Тарасевич^{1,2,3,4}, А.В. Наумов^{1,2,3}, И.Ю. Еремчев^{1,2,3}

¹*Институт спектроскопии Российской академии наук*

(108840, Москва, г. Троицк, ул. Физическая, д. 5)

²*Троицкое обособленное подразделение ФИАН*

(108840, Москва, г. Троицк, ул. Физическая, д. 11)

³*Московский педагогический государственный университет*

(119435, Москва, ул. Малая Пироговская, д. 29/7)

⁴*Национальный исследовательский университет*

«Высшая школа экономики»

(105066, Москва, ул. Старая Басманная, д. 21/4, стр. 5)

e-mail: lumosisgreat@outlook.com

В данной работе представлены результаты экспериментального исследования природы мерцания замедленной люминесценции в одиночных квантовых точках и наностержнях. Предложена новая техника зондирования люминесцентных состояний, основанная на квазиодновременном импульсном возбуждении образца на нескольких длинах волн. Данный подход позволил проверить гипотезу о захвате горячих носителей заряда на метастабильные ловушечные состояния, которые могут быть ответственны за появление замедленной люминесценции.

Ключевые слова: квантовые точки, люминесценция, мерцание.

Н.А.Ю., Е.И.Ю., Н.А.В. являются членами ведущей научной школы Российской Федерации (проект НШ-776.2022.1.2). Работа частично выполнена в рамках темы ГЗ МПГУ (АААА-А20-120061890084-9)».

ТРЕХМЕРНАЯ ФЛУОРЕСЦЕНТНАЯ DHPSF-НАНОСКОПИЯ КОЛЛОИДНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ (КВАНТОВЫХ ТОЧЕК)

И.Т. Мынжасаров^{2,3}, И.Ю. Еремчев^{1,2,4,*}, Д.В. Проконова⁵,
Н.Н. Лосевский⁵, С.П. Котова⁵, А.В. Наумов^{1,2,3,4}

¹*Институт спектроскопии РАН*

(142190 Троицк, Москва, ул. Физическая 5)

²*Московский Физико-Технический Институт*

(117303 Долгопрудный, Москва, ул. Керченская 1А, корп.1)

³*ТОП ФИАН*

(Троицк, Россия)

⁴*Московский Педагогический Государственный Университет*

(Москва, Россия)

⁵*Физический Институт им. П.Н. Лебедева РАН, Самарский филиал*

(Самара, Россия)

**e-mail: iliyas024@gmail.com*

Данная работа посвящена развитию метода трехмерной наноскопии коллоидных полупроводниковых нанокристаллов с использованием техники биспиральных пучков света. В данном методе излучение квантовых точек преобразуется при помощи фазовой маски в двухлепестковую функцию, ориентация которой однозначно связана с глубиной залегания источника излучения по отношению к фокальной плоскости объектива микроскопа. В работе удалось достигнуть улучшения точности в 1.5 раза при учете распределения интенсивности, создаваемого микрообъективом. Проведены эксперименты по трекингу наночастиц в вязкой анизотропной среде. Была выявлена нормальная диффузия (Броуновское движение) для поперечных направлений движения и субдиффузия для продольного направления, связанная с геометрией подложки (решеточный профиль).

Ключевые слова: трехмерная наноскопия, флуоресцентная микроскопия, DHPSF, квантовые точки, дифракционный оптический элемент (ДОЭ), спиральные пучки, моды Лагерра-Гаусса, трекинг, Броуновское движение, диффузия.

1. ВВЕДЕНИЕ

Для реализации метода DHPSF необходимо создание дифракционного оптического элемента (ДОЭ), формирующее вращающееся изображение [1].

Для этого используется свойство спиральных пучков вращаться при распространении. В данной задаче требуются спиральные пучки, распределение интенсивности которых представляет два главных максимума – двухлепестковые пучки [2], [3], [4]. В качестве начального приближения использовался спиральный пучок, который можно представить в виде суперпозиции пяти мод Лагерра-Гаусса (рис. 1).

В работе сравнивались два типа ДОЭ: «неоптимизированный» (рассчитанный для пространственно однородного распределения интенсивности падающего пучка) и «оптимизированный» (для неоднородного пучка с распределением интенсивности, создаваемым конкретным микрообъективом - Carl Zeiss 100x, 1.3NA) [5]. Результаты исследований показали, что точность восстановления координат в 1.5 раза выше при работе с оптимизированной фазовой маской.

С использованием оптимизированной фазовой маски были проведены эксперименты по трехмерному трекингу наночастиц в вязкой среде. В ходе работы сверху на образец были наложены профиль от атомно-силового микроскопа и покровное стекло. Анализ траектории движения частиц показал наличие субдиффузии по оси Z и нормальную диффузию (Броуновское движение) в плоскости XY, как и ожидалось при предварительных расчетах. Трехмерный трекинг наночастиц при помощи техники DHPF показал свою перспективность при изучении анизотропных сред на наличие неоднородностей.

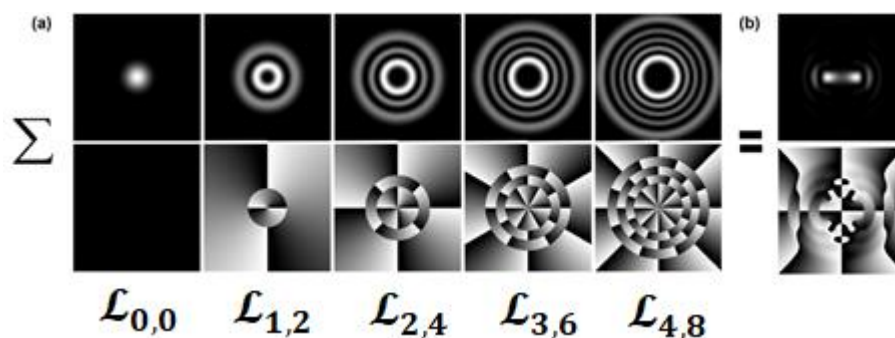


Рис. 1. Пять мод Лагерра-Гаусса ($\mathcal{L}_{0,0}$; $\mathcal{L}_{1,2}$; $\mathcal{L}_{2,4}$; $\mathcal{L}_{3,6}$; $\mathcal{L}_{4,8}$), используемых в качестве начального приближения при расчете ДОЭ для преобразования функции рассеяния точки по биспиральной схеме. (b) Суперпозиция указанных 5 мод Лаггера-Гаусса, составляющие биспиральный пучок. (Верхний ряд – распределения интенсивности в градациях серого цвета, нижний – соответствующие фазовые пространственные распределения для преобразующего ДОЭ)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Pavani, S.R.P. and R. Piestun, Three dimensional tracking of fluorescent microparticles using a photon-limited double-helix response system. *Optics Express*, 2008. 16(26): p. 22048-22057.
2. Abramochkin, E.G. and V.G. Volostnikov, Spiral light beams. *Physics-Uspekhi*, 2004. 47(12): p. 1177-1203.
3. Volostnikov, V.G., Modern optics of Gaussian beams. *Physics-Uspekhi*, 2012. 55(4): p. 412-420.
4. Razueva, E. and E. Abramochkin, Multiple-twisted spiral beams. *Journal of the Optical Society of America a-Optics Image Science and Vision*, 2019. 36(6): p. 1089-1097.
5. Prokopova, D.V., et al., Improving the Energy Efficiency of Diffraction Optical Elements for 3D Nanoscopy. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2019. 83(12): p. 1453-1458.

THREE-DIMENSIONAL FLUORESCENT DHPSF NANOSCOPY OF COLLOIDAL SEMICONDUCTOR NANOCRYSTALS (QUANTUM DOTS)

I.T. Mynzhasarov^{2,3}, **I.Y. Eremchev**^{1,2,4,*}, **D.V. Prokopova**⁵, **N.H. Losevsky**⁵, **S.P. Kotova**⁵, **A.V. Naumov**^{1,2,3,4}

¹*Institute of Spectroscopy of the Russian Academy of Sciences
(5 Fizicheskaya str., Moscow, Troitsk, 142190)*

²*Moscow Institute of Physics and Technology
(117303 Dolgoprudny, Moscow, 1A Kerchenskaya str., building 1)*

³*TOP FIAN
(Troitsk, Russia)*

⁴*Moscow Pedagogical State University
(Moscow, Russia)*

⁵*P.N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Samara
Branch
(Samara, Russia)*

This work is devoted to the development of the method of three-dimensional nanoscopy of colloidal semiconductor nanocrystals using the technique of bispiral light beams. In this method, the radiation of quantum dots is transformed using a

phase mask into a two-lobed function, the orientation of which is uniquely related to the depth of the radiation source with respect to the focal plane of the microscope lens. In the work, it was possible to achieve a 1.5-fold improvement in accuracy when taking into account the intensity distribution created by the micro lens. Experiments on tracking nanoparticles in a viscous anisotropic medium have been carried out. Normal diffusion (Brownian motion) for the transverse directions of motion and subdiffusion for the longitudinal direction associated with the geometry of the substrate (lattice profile) were revealed.

Keywords: three-dimensional nanoscopy, fluorescence microscopy, DPSF, quantum dots, diffraction optical element (DOE), spiral beams, Laguerre-Gauss modes, tracking, Brownian motion, diffusion.

ВЫСОКОСТАБИЛЬНЫЕ ОДИНОЧНЫЕ ЦЕНТРЫ ОКРАСКИ В НРНТ МИКРОАЛМАЗАХ С УЗКИМИ СПКТРАЛЬНЫМИ ЛИНИЯМИ

А.Ю. Нелюбов^{1,2,3}, И.Ю. Еремчев^{1,3,4}, С.С. Косолюбов², В.П. Драчев²,
Е.А. Екимов⁵, А.В. Наумов^{1,3,4}

¹Физический институт имени Лебедева РАН

²Сколковский институт науки и технологий

³Московский педагогический государственный университет

⁴Институт спектроскопии РАН

⁵ Институт физики высоких давлений РАН

email: semen.naid@yandex.ru

Центры окраски в алмазах представляют собой излучатели с высоким потенциалом для различных применений. В литературе описано более десятка различных типов центров дефектов. Однако они имеют ряд недостатков, включая недостаточную яркость, широкую и интенсивную фонную боковую полосу и другие.

В данной работе мы обнаружили новые центры окраски в алмазе, которые ранее не наблюдались. Исследования были проведены с использованием совмещенной техники люминесцентной и электронной микроскопии. Исследованные излучатели демонстрируют способность испускать одиночные фотоны с четко определенной линейной поляризацией, что перспективно для квантовой обработки информации и квантового распределения ключей. Другими уникальными особенностями обнаруженных излучателей являются узкополосные спектры возбуждения и испускания при комнатных температурах (FWHM ~ 0.5 нм). Эти особенности позволяют использовать данные излучатели для многоцветового флуоресцентного биомаркирования, а также в качестве чувствительных наносенсоров температуры.

Ключевые слова: НРНТ, одиночные центры окраски, центры окраски в алмазах.

Н.А.Ю., Е.И.Ю., Н.А.В. являются членами ведущей научной школы Российской Федерации (проект НШ-776.2022.1.2). Работа частично выполнена в рамках темы ГЗ МПГУ (АААА-А20-120061890084-9)».

СТУДЕНЧЕСКАЯ СЕКЦИЯ

КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ, СОЖЕРЖАЩИХ ПАРАЦЕТАМОЛ

М.С. Алёхин, В.А. Жукова

Самарский национальный исследовательский университет

(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)

e-mail: alekhin.misha@inbox.ru

В работе изучены возможности качественного и количественного определения парацетамола в лекарственных препаратах методом Фурье-спектроскопии. Проведена интерпретация наблюдаемых полос парацетамола и определены наиболее информативные полосы для осуществления качественного и количественного анализа препаратов, содержащих парацетамол.

Ключевые слова: конкурс-конференция, оптика, Фурье-спектры.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы в связи с ухудшением эпидемиологической обстановки увеличивается количество некачественных и поддельных препаратов.

Для контроля за качеством лекарственных препаратов используется ряд аналитических методов. Одним из наиболее известных и информативных является метод ИК-Фурье спектроскопии. Этот метод известен своей высокой точностью, простотой и что важно неразрушимостью препаратов.

В ряде работ [1-4] изучены спектры парацетамола и препаратов, содержащих парацетамол. Однако, эти работы носят разрозненный характер. В каждой конкретной работе для качественного и количественного определения парацетамола в лекарственных препаратах используются разные спектральные полосы.

Поэтому целью данной работы было провести отнесение полос соответствующим колебаниям молекулы парацетамола, измерить спектры парацетамола при различных концентрациях и выбрать аналитические

полосы для дальнейшей оценки количественного содержания парацетамола в таблетированных препаратах.

2. ТЕХНИКА И МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Для регистрации спектров использовали Фурье-спектрофотометр ФСМ 2201 в диапазоне $370-4000\text{ см}^{-1}$ при спектральное разрешение 4 см^{-1} . Погрешность измерения пропускания составляла 0.05% ; погрешность измерения волнового числа $\pm 0.05\text{ см}^{-1}$.

В качестве объектов исследования были выбраны препараты парацетамола различных производителей: парацетамол экстра г.Оболенское, парацетамол Велфарм, парацетамол Фармстандарт, парацетамол Новосибирск.

В работе использовались образцы порошков в виде смеси таблеток парацетамола и порошка КВг. Для приготовления смеси таблетки и КВг тщательно перетирались в агатовой ступке для получения пудрообразного порошка. Затем парацетамол и КВг смешивались в различных концентрациях.

В работе были изучены спектры диффузного отражения парацетамола в зависимости от его концентрации и производителя. Для этого готовилась смесь парацетамола с КВг в соотношении $1:10$, а затем к полученной смеси добавлялся КВг для получения содержания парацетамола в смеси - от $1:100$ до $1:300$.

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Колебаниям амид I соответствует основная полоса 1655 см^{-1} и максимумы $1610, 798\text{ см}^{-1}$. Деформационным колебанием типа амид II $\delta_{\text{C-NH}}$ соответствует полоса 1565 см^{-1} . Полоса 809 см^{-1} соответствует смешанному колебанию $\delta_{\text{Pn-амид}}$. Валентным колебаниям C-N одинарной связи принадлежит полоса с максимумом 1244 см^{-1} [3].

В состав молекулы парацетамола входит фенильная группа. В диапазоне $1500-1100\text{ см}^{-1}$ валентные колебания фенильной группы смешиваются с деформационными колебаниями амидной группы.

На рис.1 приведены спектры парацетамола различных производителей в трех областях спектра.

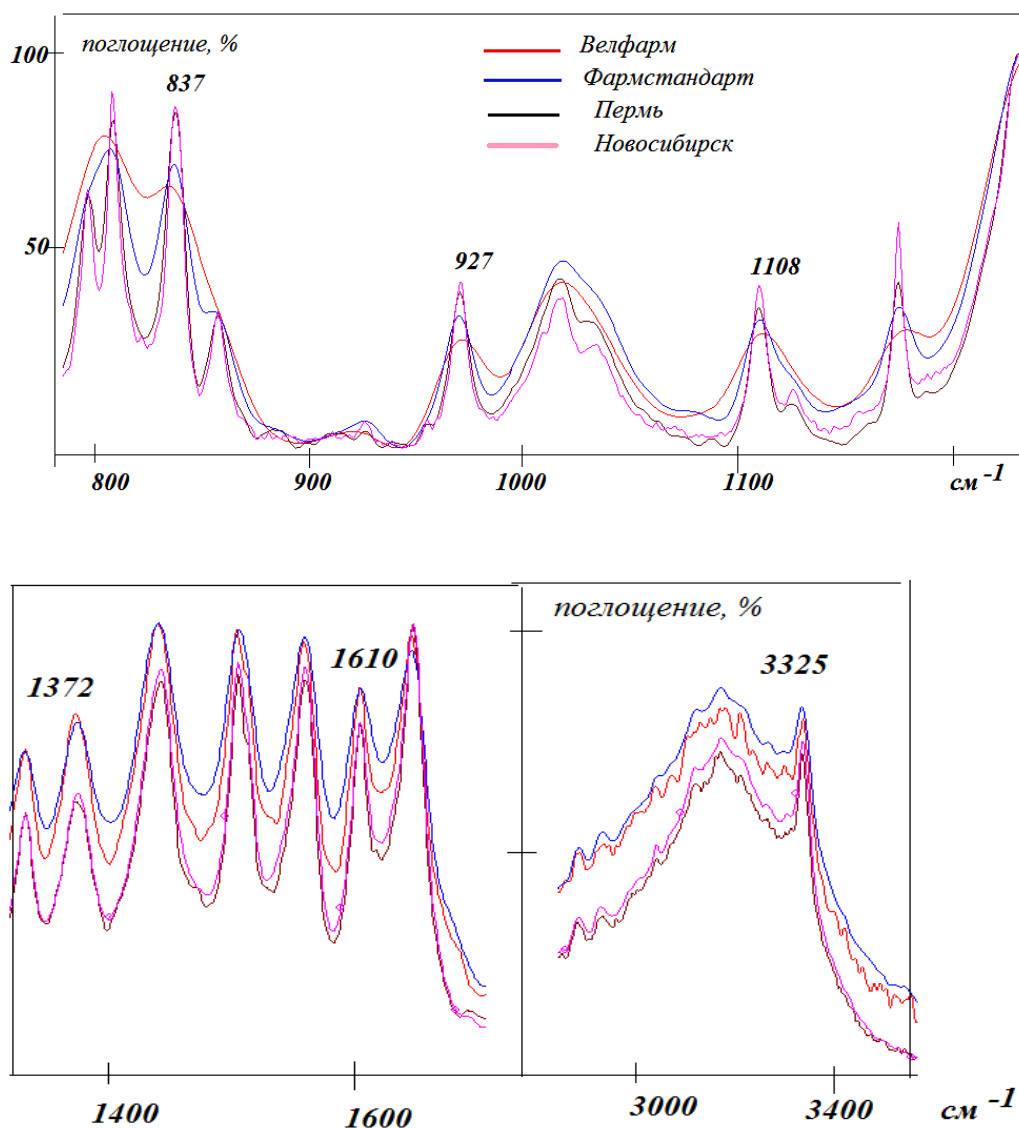


Рис.1. Фурье спектры парацетамола различных производителей

Из анализа спектров можно сделать вывод, что в низкочастотной области спектра наиболее информативными полосами являются 837 см^{-1} , 927 см^{-1} и 1108 см^{-1} , принадлежащие, соответственно, деформационным колебаниям амидной группы фенильного кольца, соответственно [4]. Остальные полосы являются в данном случае неудобными, так как для разных препаратов уширяются по-разному, что можно объяснить взаимодействием со вспомогательными компонентами.

В средней области спектра в качестве аналитических можно выбрать полосы 1372 и 1610 см^{-1} , принадлежащие сложным колебаниям амид 2 и

амид 1 молекулы парацетамола. В области валентных колебаний выбрана полоса 3325 см^{-1} , принадлежащая колебаниям N-H группы. Остальные полосы либо претерпевают сдвиг, либо уширяются и не могут быть использованы в качестве аналитических.

На рис.2 приведены концентрационные зависимости спектров в области низкочастотных колебаний.

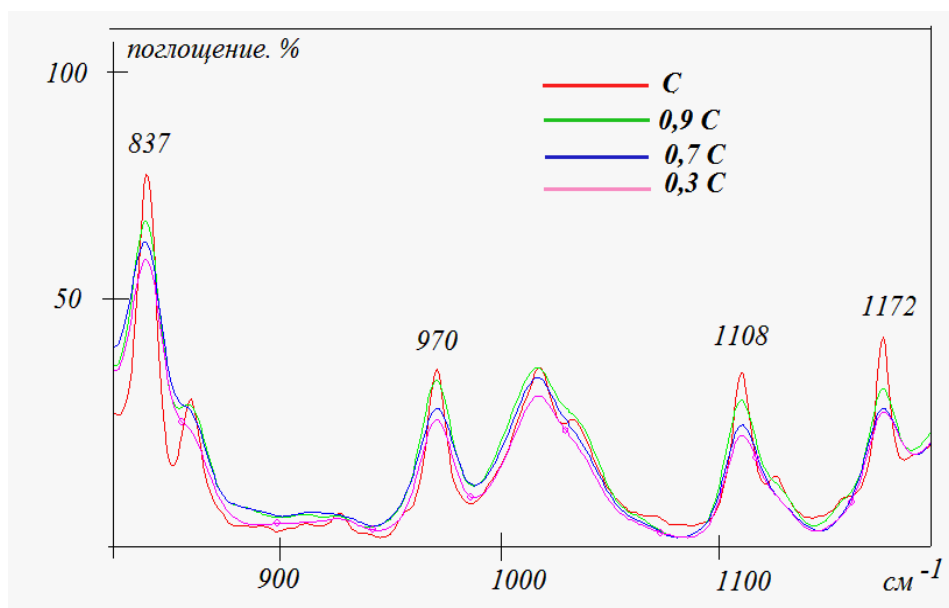


Рис.2. Спектры парацетамола при различной концентрации

Для количественного определения процентного содержания парацетамола в лекарственных препаратах необходимо построить градуировочные кривые. Для этого измеряли интенсивность полосы в максимуме поглощения для каждой концентрации

Экспериментальные результаты обрабатывались с помощью метода наименьших квадратов.

Таблица 1. Полученные уравнения градуировочных графиков/

| Волновое число | Уравнение | Волновое число | Уравнение |
|-----------------------|--------------|-----------------------|--------------|
| 837 см^{-1} | $0,31+0,25C$ | 1328 см^{-1} | $0,33+0,21C$ |
| 1015 см^{-1} | $0,26+0,18C$ | 1372 см^{-1} | $0,35+0,21C$ |
| 1108 см^{-1} | $0,27+0,15C$ | 1610 см^{-1} | $0,4+0,21C$ |
| 1172 см^{-1} | $0,28+0,16C$ | 3325 см^{-1} | $0,37+0,22C$ |

По полученным данным были оценены концентрации действующего препарата парацетамола в изученных лекарственных препаратах. Результаты вычислений при использовании полос поглощения 837, 1328, 1372, 1610 и 3325 см⁻¹ позволяют сделать вывод, что все изученные препараты содержат парацетамол в количестве, указанном в аннотации препарата. Точность измерений составляет 10%.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе изучены спектры парацетамола в зависимости от концентрации препарата и от производителя. Используя проведенное отнесение полос соответствующим колебаниям, выбраны аналитические полосы для проведения количественного анализа. Установлено, что все исследованные препараты являются подлинными.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. А.С. Саушкина. Идентификация некоторых лекарственных препаратов сложного состава, содержащих парацетамол, методом ик-спектроскопии/ А.С. Саушкина, Л.Н.Зинчук, М.А. Денисов, В.А. Шокуров, Д.В. Гончаров.- Текст: электронный//Фармация и фармакология.-2017-Т.5-№1-УДК 615.074.
2. Е.Б. Бургина. ИК спектры парацетамола и фенацетина./ Е.Б. Бургина1, В.П. Балтахинов, Е.В. Болдырева, Т.П. Шахтштейнер.- Текст: электронный // Журнал структурной химии.-2004.-Т.45,№1.-С. 67-76
3. Б.Н. Тарасевич. ИК спектры основных классов органических соединений./Текст: электронный//. Москва,2012.
4. А.Л. Лобачев. Анализ многокомпонентных смесей на примере лекарственного средства "Пенталгин" методами ТСХ и ИК-Фурье спектроскопии./ А. Л. Лобачев, Н. А. Редькин, Ю. В. Трифонова.- Текст: электронный//. Вестник СамГУ Естественнонаучный.-2015.-№3-С. 164-173.

VIBRATIONAL SPECTRA OF DUGS CONTAINING PARACETAMOL

M.S.Alekhin, V.A.Zhukova

*Samara National Research University
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)
e-mail: alekhin.misha@inbox.ru*

In this paper, the possibilities of qualitative and quantitative determination of paracetamol in drugs by Fourier spectroscopy were studied. The interpretation of the observed bands of paracetamol was carried out and the most informative bands were determined for the implementation of a qualitative and quantitative analysis of preparations containing paracetamol.

Keywords: competition-conference, optics, Fourier spectra.

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИЙ РАДИКАЛЬНОГО ЗАМЕЩЕНИЯ В НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ СРЕДЕ

Е.К. Башкиров¹, А.В. Асташова^{1,2}

¹ Самарский национальный исследовательский университет,
(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)

² Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева РАН
(443011, г. Самара, ул. Ново-Садовая, 221)
e-mail: avastas2345@gmail.com

В данной работе рассматриваются реакции радикального замещения, протекающие между CH_3 и H_2O , CH_4 и CH_3 , C_2H_5 и CH_4 , C_2H_5 и $\text{CH}_3\text{-OH}$, C_3H_7 и H_2O в газовой фазе, ведущие к образованию 1- и 2-пропанола. Для всех реакций были получены оптимизированные геометрии реагентов, продуктов и переходных состояний и колебательные частоты на уровне теории функционала плотности B3LYP/6-311G (d,p) и относительные энергии на уровне теории G3(MP2,CC)/6-311G (d,p) с химической точностью, рассчитаны константы скорости.

Ключевые слова: реакции радикального замещения, теория функционала плотности, композитный метод G3.

1. ВВЕДЕНИЕ

На сегодняшний день одной из актуальных областей научного исследования является область космического пространства, в частности, ученые задаются вопросом возникновения и эволюции органических молекул в Галактике. Так, например, уже удалось обнаружить более 200 межзвездных и околозвездных молекул [1,2,3], такие как алифатические спирты (метанол CH_3OH , этанол $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$), альдегиды, кетоны, кислоты и эфиры. Но пути образования данных сложных органических соединений (далее СОМ) в условиях космоса до конца пока не описаны.

На данный момент удалось установить, что органические вещества синтезируются в межзвездной среде за счет действия ионизационного излучения: покрытая льдом межзвездная пыль подвергается воздействию ультрафиолетовых фотонов или ГКЛ в холодных молекулярных облаках [4] и в областях звездообразования [5]. Межзвездная пыль представляет собой

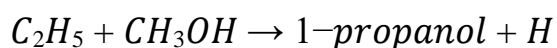
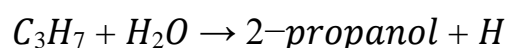
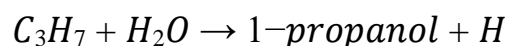
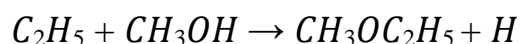
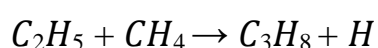
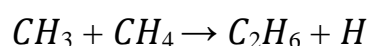
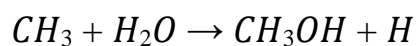
тонкие, сильно сплюснутые слои графита (углерод) и силикатов (минералы в виде камней), покрытых тонким (порядка нескольких сотен нанометров) слоем льда, который является смесью воды (H₂O), метанола (CH₃OH), окиси углерода (CO), углекислого газа (CO₂), метана (CH₄), формальдегида (H₂CO) и аммиака (NH₃) [6]. Взаимодействуя с подобным космическим аналогом льда, ионизационное изучение запускает процесс образования органических веществ, уплотняя молекулярные облака, которые под действием собственной гравитации начинают процесс формирования звезд.

Процесс звездообразования, который берет свое начало в области холодных облаков, зависит от соответствующего молекулярного состава. Данный факт подтверждает необходимость установления пути формирования распространенных групп СОМ в данных условиях, который определит ход протекания синтеза молекул в межзвёздной среде, а также поспособствует расчету уровня углерода во Вселенной. Здесь стоит учесть зависимость исследуемого процесса как от физических (температура, свойства фотонов), так и химических (состав космического льда) особенностей молекулярных облаков.

В связи со всем вышесказанным целью данной работы являлось рассмотрение реакции радикального замещения, ведущие к образованию ключевых СОМ в условиях перехода от холодного молекулярного облака к областям звездообразования, на примере реакций взаимодействия CH₃ и H₂O, CH₄ и CH₃, C₂H₅ и CH₄, C₂H₅ и CH₃-OH, C₃H₇ и H₂O в газовой фазе.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ХАРАКТЕРИСТИК РЕАКЦИЙ

Исследование процесса синтеза СОМ в космосе началось с изучения следующих реакций с нейтральными радикалами:



Для реализации поставленной цели решаются следующие задачи: оптимизация геометрии реагентов, продуктов и переходных состояний; определение колебательные частоты и энергий нулевых колебаний;

определение электронных энергии и уточнение полученных значений различными по степени точности методами; расчет констант скоростей; определение особенностей протекания исследуемых реакций.

2.1. Оптимизация

В программном пакете GaussView 5.0 осуществлялось построение молекул реагентов и продуктов реакций и их переходных состояний.

Далее, используя компьютерные программы GAUSSIAN 09, производилась оптимизация геометрий основных и переходных состояний. После получения оптимизированных структур осуществлялся расчет колебательных частот, результаты которого являются доказательством справедливости построенных минимумов (в этом случае все колебательные частоты должны быть вещественны) и построенных переходных состояний (в этом случае одна колебательная частота может принимать мнимое значение).

Геометрии реагентов, продуктов и переходных состояний оптимизировались на уровне теории функционала плотности (DFT) с использованием 3х- параметрического функционала Becke с гибридным функционалом Lee, Yang, Parr (B3LYP) с базисным набором валентно расщепленных базисных функций 6-311G (p,d). Колебательные частоты вычислялись на том же теоретическом уровне и учитывались при нахождении энергии нулевых колебаний (ZPE).

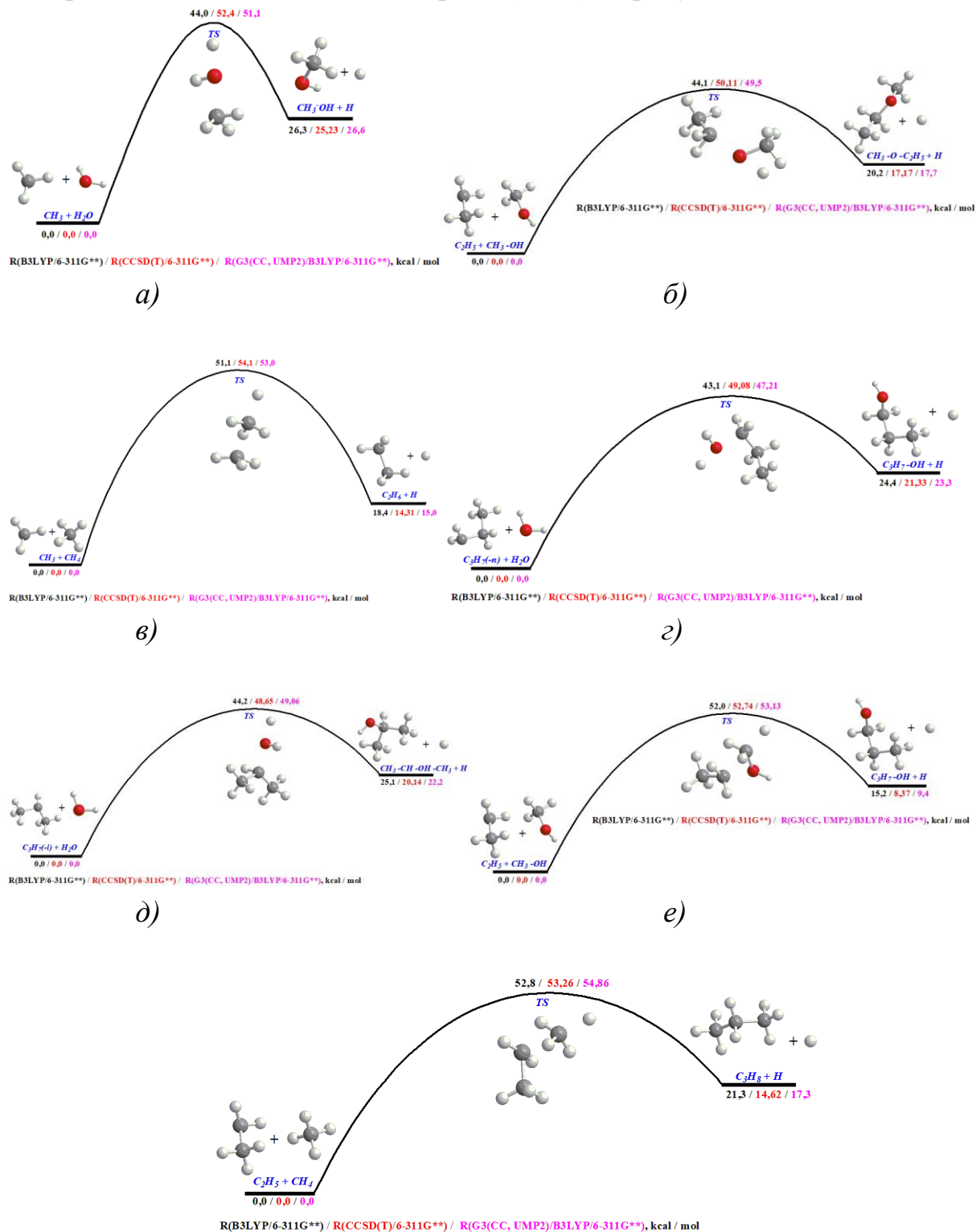
2.2. Энергии нулевых колебаний и полные энергии систем

Расчет энергий нулевых колебаний (ZPE) и электронные энергии производился методом B3LYP с базисом 6-311G (d, p) в программном пакете Gaussian 09. Для повышения точности полученных значений энергии рассчитаны методом теории возмущений Moller–Plesset второго порядка (MP2) с двумя базисными наборами: G3Large и 6-311G (d, p) и методом связанных кластеров одинарных, двойных и тройных (по теории возмущений) возбуждений CCSD(T) с базисным набором 6-311G (d, p).

Результирующие значения энергии рассчитаны композитным методом $G3(MP2, CC)/B3LYP(6-311G(d,p))$ по следующей схеме:

$$E(G3/6 - 311G(d, p)) = E(CCSD(T)/6 - 311G(d, p)) + E(MP2/G3Large) - E(MP2/6 - 311G(d, p)) + E(ZPE/6 - 311G(d, p))$$

Для иллюстрации полученных значений энергий велось построение поверхностей потенциальных энергий (ППЭ) на рисунке 2.



ЖС)

Рис. 2. ППЭ реакций, а) $CH_3+H_2O \rightarrow CH_3OH+H$, б) $C_2H_5+CH_3OH \rightarrow CH_3OC_2H_5+H$, в) $CH_3+CH_4 \rightarrow C_2H_6+H$, г) $C_3H_7 + H_2O \rightarrow 1-propanol + H$, д) $C_3H_7 + H_2O \rightarrow 2-propanol + H$, е) $C_2H_5 + CH_3OH \rightarrow 1-propanol + H$, ж) $C_2H_5+CH_4 \rightarrow C_3H_8 + H$

2.3. Константы скоростей протекания реакций

После уточнения значений электронных энергий необходимо приступить к расчету вероятностей протекания всех исследуемых реакций в интересующих нас условиях. С этой целью осуществляется вычисление констант скоростей данных реакций. Феноменологические константы скорости, зависящие от температуры, вычислялись в подпрограмме Abstraction пакета MESS [41,42]. Результаты вычислений предоставлены в виде графиков на рисунке 3.

Анализируя графики констант скоростей в газовой фазе, можно утверждать, что взаимодействия исследуемых газов радикалов с компонентами космического льда маловероятны. Необходимо дальнейшее изучение данных реакций, но уже протекающих непосредственно во льдах.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе выполнения работы были получены следующие результаты:

- Найдены оптимизированные геометрии реагентов, продуктов и переходных состояний реакций в рамках теории функционала плотности с использованием гибридного функционала B3LYP с базисным набором функций 6-311 G(d,p). На том же уровне теории посчитаны колебательные частоты.
- Для переходных состояний, реагентов и продуктов рассчитаны электронные энергии методом теории функционала плотности с использованием гибридного функционала B3LYP с базисным набором функций 6-311 G(d,p).
- Рассчитаны конечные значения электронных энергий композитным методом G3.

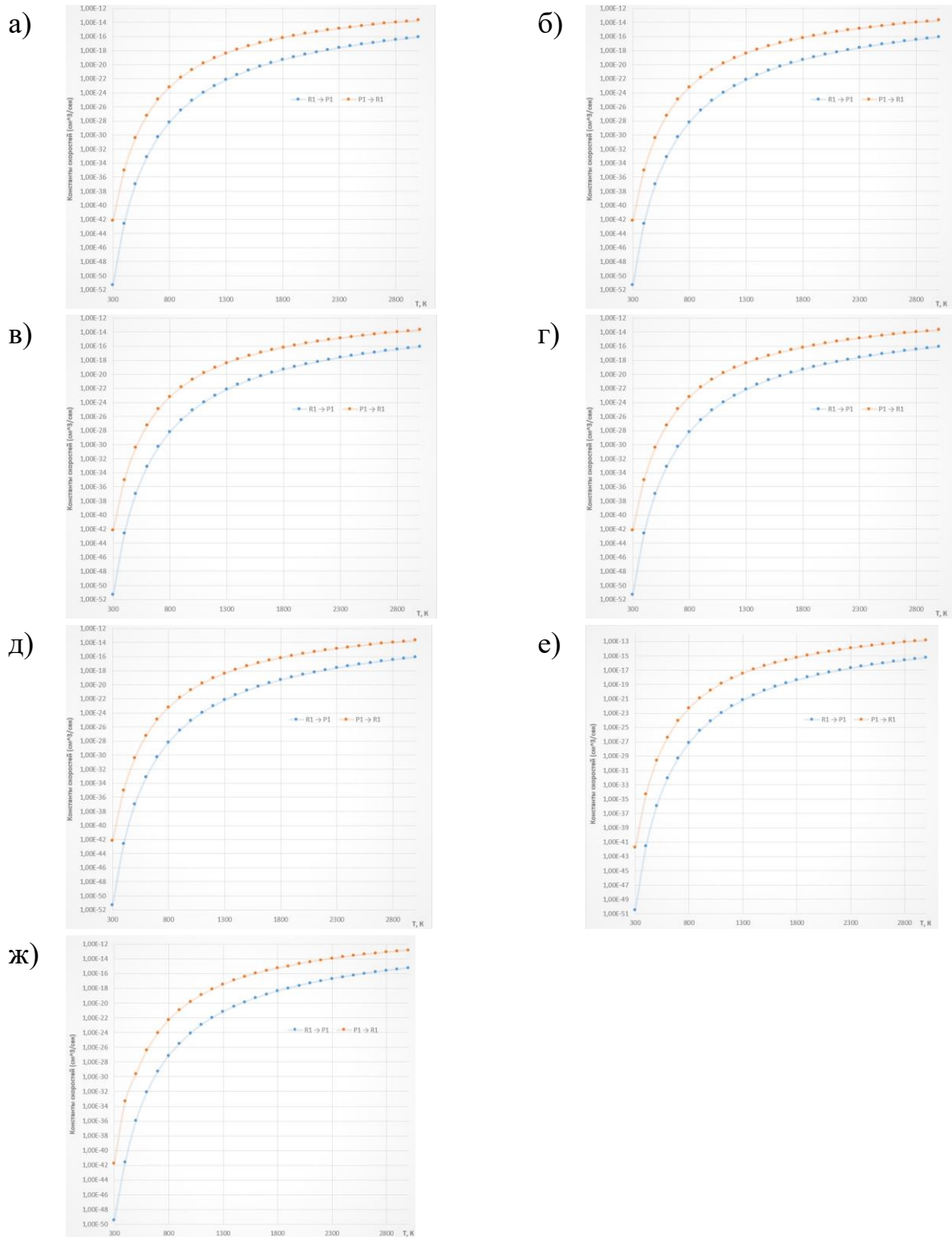


Рис. 3. Константы скоростей прямой($R1 \rightarrow P1$) и обратной($P1 \rightarrow R1$) реакций, а) $C_2H_5 + CH_3OH \rightarrow 1\text{-propanol} + H$, б) $C_2H_5 + CH_4 \rightarrow C_3H_8 + H$, в) $C_2H_5 + CH_3OH \rightarrow CH_3OC_2H_5 + H$, г) $CH_3 + H_2O \rightarrow CH_3OH + H$, д) $CH_3 + CH_4 \rightarrow C_2H_6 + H$, е) $C_3H_7 + H_2O \rightarrow 1\text{-propanol} + H$, ж) $C_3H_7 + H_2O \rightarrow 2\text{-propanol} + H$

- Рассчитаны константы скоростей прямых и обратных реакций в газовой фазе в зависимости от температур. Построены соответствующие графики зависимостей. Показано, что вероятности взаимодействия исследуемых нейтральных радикалов и компонентов космических аналогов льдов в условиях космоса в газовой фазе малы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. D. C. B. Whittet, A. M. Cook, E. Herbst, J. E. Chiar, S. S. Shenoy, Observational Constraints on Methanol Production in Interstellar and Preplanetary Ices. // *The Astrophysical Journal*, 2011, v. 742, p. 28-38.
2. E. Herbst, Chemistry in the Cold, Warm, and Hot Interstellar Medium. // *First International Conference on Chemical Evolution of Star Forming Region and Origin of Life*, 2013, v.1543, p. 15-30.
3. C. Walsh, T. J. Millar, H. Nomura, E. Herbst, S. W. Weaver, Y. Aikawa, J. C. Laas, A. I. Vasyunin, Complex Organic Molecules in Protoplanetary Disks. // *Astronomy and Astrophysics*, 2014, v. 563, p. 1-35.
4. Y. Aikawa, V. Wakelam, R. T. Garrod, E. Herbst, Molecular Evolution and Star Formation: From Prestellar Cores to Protostellar Cores. // *The Astrophysical Journal*, 2008, v. 674, p. 984-996.
5. P. Ehrenfreund, Molecules on a space odyssey. // *Science*, 1999, v. 283, p. 1123-1124.
6. A. C. A., Boogert, P. A., Gerakines, D. C. B. Whittet, Observations of the Icy Universe. // *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* 53, 2015, p. 541-580.

INVESTIGATION OF RADICAL SUBSTITUTION REACTIONS IN A LOW-TEMPERATURE ENVIRONMENT

E.K. Bashkirov¹, A.V. Astashova^{1,2}

¹ *Samara National Research University,
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)*

² *Lebedev Physical Institute, Samara Branch
(Novo-Sadovaya str., 221, Samara, Russia, 443011)*

e-mail: avastas2345@gmail.com

In this paper, we consider radical substitution reactions occurring between CH₃ and H₂O, CH₄ and CH₃, C₂H₅ and CH₄, C₂H₅ and CH₃-OH, C₃H₇ and H₂O in the gas phase, leading to the formation of 1- and 2-propanol. For all reactions, optimized geometries and vibrational frequencies for reactants, products, and transition states were obtained at the B3LYP/6-311G (d,p) level of theory. The calculations of the energies were carried out at the G3(MP2, CC)//B3LYP/6-311G(d,p) level of theory. The rate constants also were obtained.

Keywords: radical substitution reactions, density functional theory, compound model chemistry.

ПЕРЕПУТЫВАНИЕ ТРЕХ КУБИТОВ, ИНДУЦИРОВАННОЕ ТЕПЛОВЫМ ПОЛЕМ РЕЗОНАТОРА

А.Р. Багров, Е.К. Башкиров

*Самарский национальный исследовательский университет,
(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)
e-mail: bagrov_00@internet.ru*

В работе найдено точное решение квантового уравнения Лиувилля для системы трех кубитов, взаимодействующих с одной модой теплового поля резонатора без потерь. На его основе рассчитан критерий перепутывания пар кубитов - отрицательность. Проведено численное моделирование отрицательности для различных начальных сепарабельных состояний кубитов и среднего числа фотонов в резонаторе. Показано, что степень перепутывания сильно зависит от выбора начального состояния кубитов и интенсивности теплового поля резонатора.

Ключевые слова: кубиты, резонатор без потерь, тепловое поле, отрицательность, мгновенная смерть и рождение перепутывания

1. ВВЕДЕНИЕ

Перепутанные состояния являются фундаментом современной квантовой оптики и квантовой информатики, так как широко используются для квантовых вычислений, квантовых коммуникаций и квантовой криптографии [1, 2]. Для квантовых вычислений нужны максимально перепутанные, устойчивые состояния с большими временами декогеренции. В связи с этим, в задачу современной квантовой информатики и квантовой оптики входит создание эффективных методов генерации и управления перепутанными состояниями, а также изучение различных физических систем, которые могут быть использованы в качестве кубитов квантовых компьютеров. Для генерации перепутанных состояний кубитов используют их взаимодействие с электромагнитными полями резонаторов. Кубиты, взаимодействующие с выделенными модами резонаторов, в настоящее время исследуются не только теоретически, но и реализованы экспериментально на нейтральных атомах и ионах в резонаторах и ловушках, примесных спинах, сверхпроводящих кольцах с джозефсоновскими переходами, гибридных и оптомеханических системах и т.д. [3].

Взаимодействие квантовых объектов, приготовленных в перепутанном состоянии, с окружением обычно приводит к декогерентности и потере особых квантовых корреляций состояний или перепутывания. Недавно в большом количестве работ было показано, что в

некоторых случаях диссипация и шум могут, напротив, являться источником перепутывания [4]. В частности, Питер Найт с соавторами была предсказана возможность генерации перепутывания кубитов различной природы за счет их взаимодействия с тепловым полем резонатора [5]. Обобщение результатов работы [5] на случай трех кубитов было проведено Каем и Лиу [6]. Однако, полученные в указанной работе результаты применимы только для интенсивных тепловых полей резонаторов. Вместе с тем, для наиболее перспективных для квантовых вычислений кубитов, например сверхпроводящих джозефсоновских колец, температура копланарного микроволнового резонатора составляет всего 10 мК. Для таких температур резонатора среднее число фотонов в тепловом поле резонатора мало. Поэтому представляет значительный интерес обобщить результаты работы [6] на случай произвольных интенсивностей поля резонатора.

В настоящей работе мы исследуем динамику перепутывания трех кубитов (двухуровневых атомов), индуцированного тепловым полем резонатора для произвольных значений средних чисел тепловых фотонов.

2. МОДЕЛЬ И ЕЁ ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ

Рассмотрим систему трех идентичных кубитов (двухуровневых атомов), резонансно взаимодействующих с модой квантового электромагнитного поля идеального микроволнового резонатора. Гамильтониан взаимодействия такой системы в дипольном приближении и приближении вращающейся волны есть

$$H = \hbar\gamma \sum_{i=1}^3 (a^+ \sigma_i^- + \sigma_i^+ a),$$

где a^+ (a) – оператор рождения (уничтожения) фотонов резонаторной моды поля, σ_i^+ и σ_i^- – повышающий и понижающий оператор в i -ом кубите и γ – константа взаимодействия кубитов с полем резонатора.

Обозначим через $|+\rangle_i$ и $|-\rangle_i$ возбужденное и основное состояние i -го кубита. Выберем в качестве начальных состояний подсистемы кубитов сепарабельные состояния вида

$$|\Psi(0)\rangle_{q_1 q_2 q_3} = |+, +, -\rangle, \quad (1)$$

$$|\Psi(0)\rangle_{q_1 q_2 q_3} = |+, -, -\rangle. \quad (2)$$

В качестве начального состояния поля резонатора выберем тепловое состояние с матрицей плотности вида

$$\rho_F(0) = \sum_n p_n |n\rangle\langle n|.$$

Весовые коэффициенты есть

$$p_n = \frac{\bar{n}^n}{(1 + \bar{n})^{n+1}},$$

где \bar{n} – среднее число тепловых фотонов

$$\bar{n} = (\exp[\hbar\omega_{cav} / k_B T] - 1)^{-1},$$

k_B – постоянная Больцмана и T – температура резонатора.

Нами найдено точное решение временного уравнения Шредингера для волновой функции полной системы “три кубита+мода поля” для начальных состояний кубитов (1) и (2) и фоковского начального состояния поля $|n\rangle$ ($n = 0, 1, 2, \dots$)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_n(t)\rangle_{Q_1 Q_2 Q_3 F} = H |\Psi_n(t)\rangle_{Q_1 Q_2 Q_3 F}.$$

Явный вид волновых функций $|\Psi(t)\rangle_n$ не представлен в настоящей работе ввиду ее громоздкости. Имея временную волновую функцию рассматриваемой системы для фоковского состояния поля, мы можем построить временную матрицу плотности полной системы “три кубита+мода поля” в случае теплового состояния поля

$$\rho_{Q_1 Q_2 Q_3 F}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} p_n |\Psi_n(t)\rangle_{Q_1 Q_2 Q_3 F} \langle \Psi_n(t) |_{Q_1 Q_2 Q_3 F}. \quad (3)$$

Для исследования динамики перепутывания кубитов нам потребуется редуцированная матрица плотности трех кубитов. Её мы можем вычислить, усредняя выражение (3) по переменным поля

$$\rho_{Q_1 Q_2 Q_3}(t) = Sp_F \rho_{Q_1 Q_2 Q_3 F}(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \langle n | \rho_{Q_1 Q_2 Q_3 F}(t) | n \rangle. \quad (4)$$

Точные количественные меры перепутывания кубитов в настоящее время разработаны только для двухкубитных систем. В настоящей работе в качестве критерия перепутывания выбран критерий Переса-Хородецких или отрицательность. Для вычисления отрицательности двух кубитов необходимо вычислить редуцированную двухкубитную матрицу плотности. Для этого необходимо усреднить трехкубитную матрицу плотности (4) по переменным третьего кубита, т.е.

$$\rho_{Q_i Q_j}(t) = Sp_{Q_k} \rho_{Q_1 Q_2 Q_3}(t) \quad (i, j, k = 1, 2, 3; i \neq j, j \neq k, i \neq k).$$

3. ВЫЧИСЛЕНИЕ ОТРИЦАТЕЛЬНОСТИ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Для системы двух кубитов Q_i и Q_j , состояние которых задается матрицей плотности $\rho_{Q_i Q_j}(t)$, определим параметр Переса-Хородецких или отрицательность стандартным образом [7, 8]

$$\varepsilon_{ij} = -2 \sum_l (\mu_{ij}^-)_l, \quad (5)$$

где $(\mu_{ij}^-)_l$ – отрицательные собственные значения частично транспонированной по переменным одного кубита матрицы плотности $\rho_{Q_i Q_j}^{T_1}$.

Для начальных состояний кубитов (1) и (2) двухкубитная редуцированная матрица плотности кубитов Q_i и Q_j есть

$$\rho_{Q_i Q_j}(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(t) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{22}(t) & \rho_{23}(t) & 0 \\ 0 & \rho_{23}^*(t) & \rho_{33}(t) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{44}(t) \end{pmatrix}. \quad (6)$$

А частично транспонированная по переменным одного кубита для (6) матрица плотности $\rho_{Q_i Q_j}^{T_1}$ может быть представлена как

$$\rho_{Q_i Q_j}^{T_1}(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(t) & 0 & 0 & \rho_{23}^*(t) \\ 0 & \rho_{22}(t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33}(t) & 0 \\ \rho_{23}(t) & 0 & 0 & \rho_{44}(t) \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Матрица плотности (7) имеет всего одно собственное значение, которое может быть отрицательным. В результате для начальных состояний кубитов (1) и (2) и теплового поля резонатора отрицательность (5) принимает вид

$$\varepsilon_{ij} = \sqrt{(\rho_{11} - \rho_{44})^2 + |\rho_{23}|^2} - \rho_{11} - \rho_{44}. \quad (8)$$

Результаты компьютерного моделирования временной зависимости отрицательностей для кубитов 1 и 2 (ε_{12}) и 1 и 3 (ε_{13}) от приведенного времени для начального состояния кубитов, в котором два из них

возбуждены, а один находится в основном состоянии, например $|+, +, -\rangle$, и различных значений средних чисел тепловых фотонов в моде представлены на рисунке 1. Для выбранного начального состояния кубиты 1 и 2 перепутаны в любой момент времени, в то время для кубитов 1 и 3 имеет место эффект мгновенной смерти и возрождения перепутывания. Степень запутанности монотонно уменьшается с увеличением среднего числа фотонов. Поведение отрицательности в случае, когда два кубита изначально находятся в основном состоянии, а один – в возбужденном состоянии, например $|+, -, -\rangle$, аналогично приведенному выше случаю, как показано на рисунке 2.

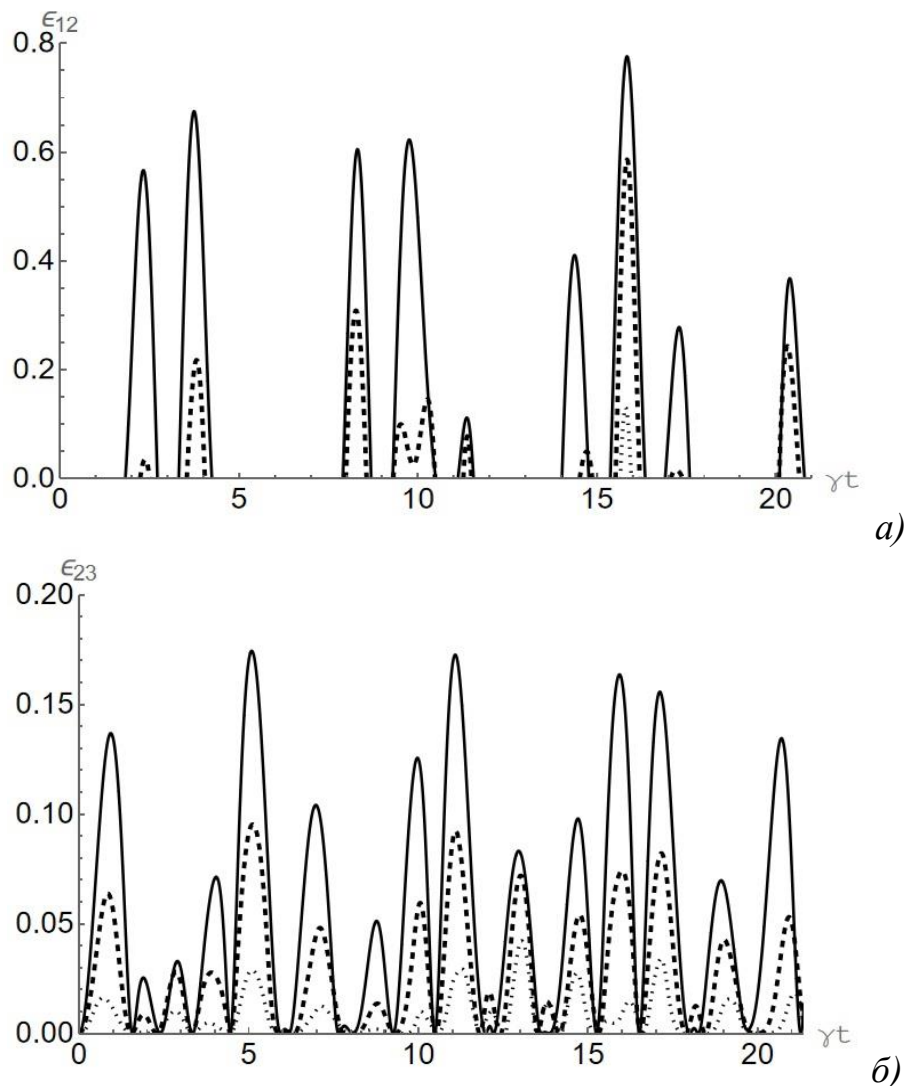
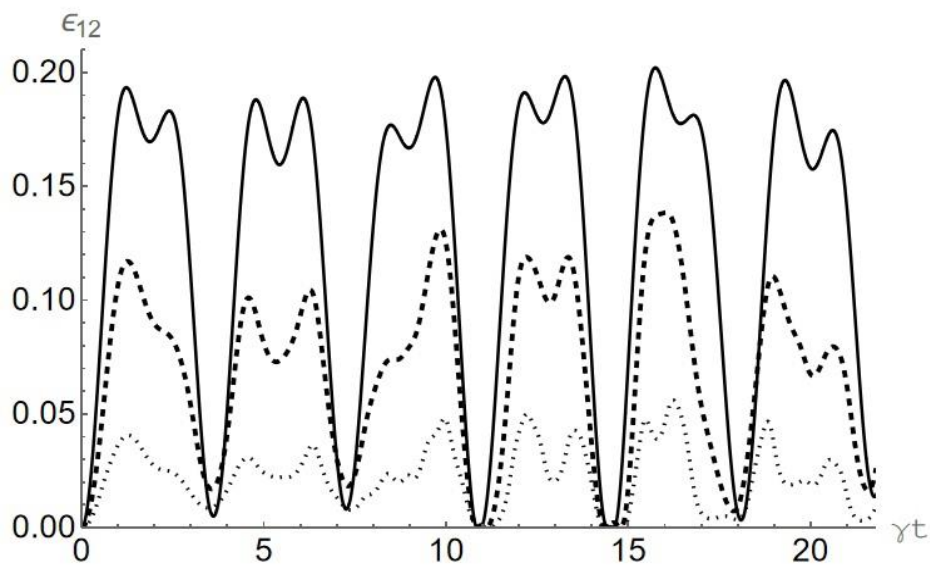
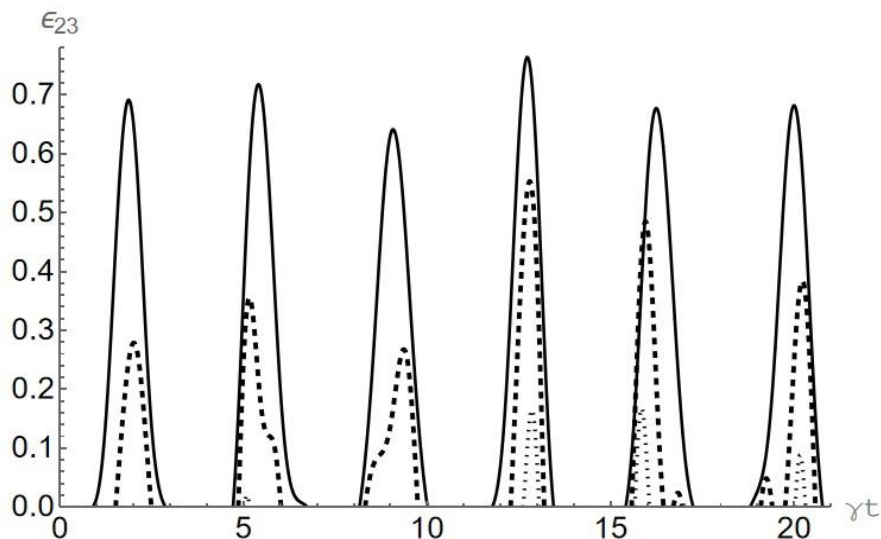


Рис. 1. Временные зависимости отрицательностей ε_{12} и ε_{23} от приведенного времени γt для начального состояния кубитов $|+, +, -\rangle$. Среднее число тепловых фотонов $\bar{n} = 0,1$ (сплошная линия), 1 (штриховая линия), 4 (точечная линия).



a)



б)

Рис. 2. Временные зависимости отрицательностей ε_{12} и ε_{23} от приведенного времени γt для начального состояния кубитов $|+, -, -\rangle$. Среднее число тепловых фотонов $\bar{n} = 0, 1$ (сплошная линия), 1 (штриховая линия), 4 (точечная линия).

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе получены следующие результаты.

1. Найдено точное решение квантового уравнения Лиувилля для матрицы плотности системы трех идентичных кубитов, резонансно взаимодействующих с тепловым полем резонатора без потерь.

2. Рассчитан параметр перепутывания пар кубитов для их различных начальных состояний.

3. Результаты численного моделирования отрицательности показали, что степень перепутывания кубитов существенно зависит от выбора начального состояния. Показано, что интенсивное тепловое поле резонатора не индуцирует перепутывание кубитов. Установлена возможность мгновенной смерти и рождения перепутывания кубитов для некоторых их начальных состояний.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. M. Georgescu, S. Ashhab, F. Nori, Quantum simulation // *Rev. Mod. Phys.*, 2014, v. 88, p. 153-185.
2. X. Gu, A.F. Kockum, A. Miranowicz, Y.-X. Liu, F. Nori, Microwave photonics with superconducting quantum circuits // *Phys. Repts.*, 2017, v. 718-719, p. 1-102.
3. G. Wendin, Quantum information processing with superconducting circuits: a review // *Rep. Prog. Phys.*, 2017, v. 80, p. 106001(1-51).
4. M. B. Plenio, S. F. Huelga, A. Beige, P. L. Knight, Cavity-loss-induced generation of entangled atoms // *Phys. Rev. A.*, 1999, v. 59, p. 2468-2475.
5. M. S. Kim, J. Kim, D. Ahn, P. L. Knight, Entanglement induced by a single-mode heat environment // *Phys. Rev. A.*, 2002, v. 65, p. 040101(1-4).
6. J.-F. Cai, H.-P. Liu, Entanglement in Three-Atom Tavis–Cummings Model Induced by a Thermal Field // *Commun. Theor. Phys.*, 2005, v. 43, p. 427–431.
7. A. Peres, A., "Separability Criterion for Density Matrices // *Phys. Rev. Lett.*, 1996, v. 77, p. 1413-1415.
8. R. Horodecki, M. Horodecki, P. Horodecki, Separability of Mixed States: Necessary and Sufficient Condition // *Phys.Lett.*, 1996, v. A 223, p. 333-339 (1996).

ENTANGLEMENT BETWEEN THREE QUBITS INDUCED BY A THERMAL FIELD

A.R. Bagrov, E.K. Bashkirov

*Samara National Research University,
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)
e-mail: bagrov_00@internet.ru*

The exact solution of the quantum Liouville equation for a system of three qubits interacting with a single mode of the resonator thermal field without loss is found. Based on it, the criterion of entanglement of qubit pairs - negativity - is calculated. Numerical simulation of the negativity for various initial separable states of qubits and the average number of photons in the resonator is carried out. It is shown that the degree of entanglement strongly depends on the choice of the initial state of the qubits and the intensity of the thermal field of the resonator.

Keywords: qubits, lossless cavity, thermal field, negativity, sudden death and birth of entanglement.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ РАДИОЧАСТОТНЫХ КВАДРУПОЛЬНЫХ ИОННЫХ ЛОВУШЕК

Е.А. Батракова^{1,2}, И.О. Антонов^{1,2}

¹Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева РАН
(443011, г. Самара, ул. Ново-Садовая, 221)

²Самарский национальный исследовательский университет
(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)
e-mail: evabatrakova2610@gmail.com

В данной работе построены численные модели квадрупольных ионных ловушек на стержнях и на лезвиях в программном пакете Simion. С помощью интерполяции получены поверхности потенциальной энергии ловушек и выполнено их сравнение между собой и с аналитическим квадрупольным потенциалом.

Ключевые слова: квадрупольная ионная ловушка на лезвиях, квадрупольная ионная ловушка на стержнях, поверхности потенциальной энергии.

1. ВВЕДЕНИЕ.

Ионная ловушка – это комбинация электрических или магнитных полей, которые необходимы для захвата заряженных частиц, ионов. Ионные ловушки имеют ряд научных применений:

- масс-спектрометрия;
- фундаментальные физические исследования;
- управление квантовыми состояниями.

Наиболее распространённым типом ионных ловушек являются квадрупольные ионные ловушки. Этот тип ионной ловушек формирует потенциал за счет комбинации статического и переменного электрических полей. Их также называют радиочастотными (ВЧ) ловушками или ловушками Пауля в честь Вольфганга Пауля, который получил Нобелевскую премию по физике в 1989 году за изобретение этого устройства.

Целью работы является сравнение полей двух типов квадрупольных ионных ловушек: ловушек на стержнях и на лезвиях, друг с другом, а также с идеальным квадруполем.

2. КВАДРУПОЛЬНЫЕ ИОННЫЕ ЛОВУШКИ

Рассмотрим ловушку с четырьмя протяженными электродами, расположенными симметрично вокруг продольной оси ловушки, каждый из которых имеет рабочую поверхность с поперечным сечением в форме

гиперболы. Поле таких ловушек представляет из себя идеальный квадруполь. [1]

Для квадруполя уравнение потенциала имеет вид:

$$V = \frac{2 V_0}{r_0^2 xy}, \quad (1)$$

r_0 - один из основных геометрических параметров ловушки, кратчайшее расстояние от оси ловушки до поверхности стержней. Его называют «радиусом поля» или вписанным радиусом ловушки.

Однако изготовление таких электродов является сложным и дорогостоящим процессом, в особенности, если учитывать миниатюрные размеры ионных ловушек. Поэтому используются другие типы квадруполевых ловушек. В данной работе исследуются два типа радиочастотных ионных ловушек.

Первый тип - линейные ионные ловушки, поле которых формируется четырьмя протяженными электродами (стержнями), расположенными вокруг общей оси. Поле таких ловушек представлено на рисунке 2.

В ловушках на стержнях удерживающее поле создается с помощью подачи высокочастотного напряжения RF+ и RF-. Положительный потенциал подаётся на одну пару противоположно расположенных электродов, отрицательный - на другую пару.

Ионная ловушка на стержнях правильно подобранного диаметра хорошо аппроксимирует идеальное квадруполевое электрическое поле.

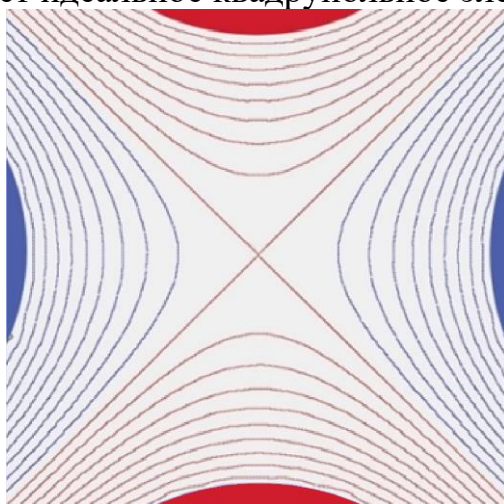


Рис. 1. Поле ловушки на стержнях

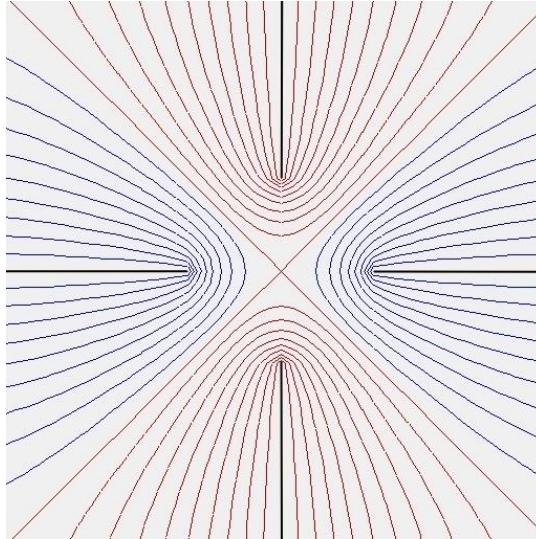


Рис. 2. Поле ловушки на лезвиях

Однако стержни из-за большого диаметра ухудшают оптический доступ к центру ловушки что отрицательно сказывается при использовании оптических методов детектирования и визуализации ионов в ловушке.

Этого недостатка позволяет избежать другая конструкция ионной ловушки, электроды которой представляют собой протяженные плоские пластины (лезвия). Однако такое упрощение конструкции ловушки приводит к существенному ухудшению формы поля (рисунок 4).

Ионная ловушка на лезвиях позволяет собрать и детектировать гораздо больше фотонов, исходящих из ее центра, но её поле более существенно отличается от идеального квадрупольного.

В безразмерных координатах траектория $x(t)$, $y(t)$ для иона с массой m и зарядом q_0 в квадрупольном переменном электрическом поле удовлетворяет уравнениям Матьё, которые представляют собой частный случай линейных дифференциальных уравнений с периодическими коэффициентами [2]:

$$\begin{aligned} \frac{d^2x}{d\xi^2} + (a_x - 2q_x \cos 2\xi)x &= 0 \\ \frac{d^2y}{d\xi^2} + (a_y - 2q_y \cos 2\xi)y &= 0 \end{aligned}, \quad (2)$$

где $\xi = \frac{\omega t}{2}$, $a_x = -a_y = \frac{8q_0U}{m\omega^2r_0^2}$, $q_x = -q_y = \frac{4q_0V}{m\omega^2r_0^2}$, U – постоянное напряжение, прикладываемое к электроду; r_0 – радиус поля; V – амплитуда радиочастотного напряжения; ω – радиочастота.

В результате их решения мы можем разделить движение частиц на быстрые колебания с частотой ловушки (микроремещения) и медленные секулярные движения в квадратичном радиочастотном электрическом поле.

Кинетическая энергия микроперемещений увеличивается пропорционально квадрату расстояния от центра ловушки. В результате микроперемещений на ионы в ловушке действует сила пондеромоторная сила которая стремится вернуть их в центр. Таким образом, движения частиц в ловушке можно представить, как медленные колебания с секулярной частотой в цилиндрически симметричном псевдопотенциале с энергией равной кинетической энергии микроперемещений и с минимумом на оси ловушки.

Движение по x не зависит от y , и аналогично движение по y не зависит от x . Это важное свойство квадрупольных полей. Для всех других более высоких многополюсников движение x и y сильно связано.

Псевдопотенциал для случая локализации одноатомного одиночного иона с зарядом q_0 и массой m в квадрупольной ловушке имеет вид [3]:

$$U_{pseudo} = \frac{(q_0 V)^2}{m \omega^2 r_0^4} (x^2 + y^2) = \frac{m \Omega_{сек}^2}{2} (x^2 + y^2), \quad (3)$$

где

$$\Omega_{сек} = (2n + \beta) \frac{\omega}{2} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4)$$

Для малых значений q и при условии, что $a = 0$, β задаётся, как

$$\beta \approx \frac{q}{\sqrt{2}} \quad (5)$$

Мы рассматриваем дипольный резонанс, для которого $n = 0$. При малых значениях q и $n = 0$ движение ионов имеет наибольшую амплитуду и частоту

$$\Omega_0 \approx \frac{q \omega}{2\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{2} q_0 V}{m \omega r_0^2} \quad (6)$$

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ

3.1. Определение предельных вероятностей попадания фотона на линзу.

На рисунке 3 представлена диаграмма с ловушкой на стержнях (вид с торца вдоль стержней) и линзой радиусом r , ограниченным углом из центра ловушки по касательной к поверхности двух соседних стержней. А также аналогичная диаграмма для ловушки на лезвиях.

Вероятность попадания фотона на линзу:

$$W = \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (7)$$

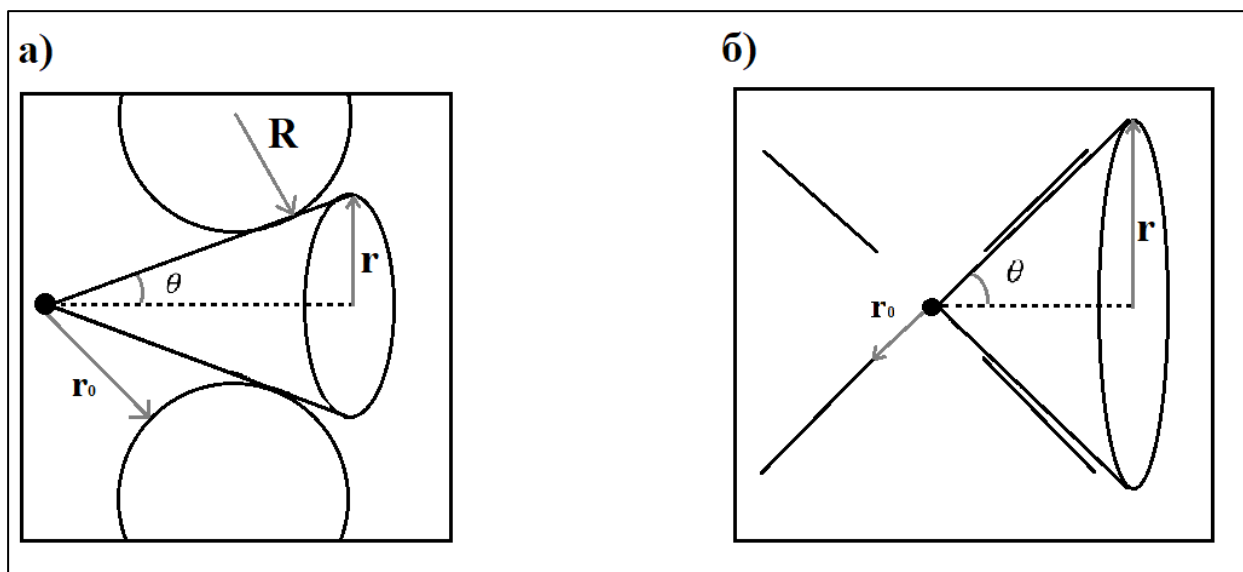


Рис. 3. К определению вероятности попадания фотона на линзу радиусом r для ионной ловушки на стержнях (а) и на лезвиях (б)

Видно, что предельное значение W для ловушки на лезвиях составляет 0.146 при $\theta = 45$ градусов.

Для ловушки на стержнях предельное значение W составляет 0.013 при $\theta = 13$ градусов.

Если использовать линзу большего диаметра, то можно собрать большее количество фотонов, однако наличие стержней всё равно сильно ограничивает предельное значение W .

3.2. Получение поверхностей потенциальной энергии.

Для расчётов использовались модели ионных ловушек, построенные в программном пакете Simion [4]. На рисунке 4 показаны электроды ловушки, к которым прикладывалось переменное напряжение. Размеры ловушек: $r_0 = 3.01$ мм; радиус стержней = 3.4 мм; размер лезвий = 3.46 мм; длина стержней/лезвий = 7.76. Параметры переменного тока: $\omega = 3.6$ МГц, $V = 150$ В.

Используя программный пакет Simion, мы определили значения поля в момент времени $t = 0$ при симуляции ионов. В программе был задан расчет на несколько сотен ионов в виде массива по всему интересующему нас объему симуляции. На старте иона фиксировались потенциал и координаты частицы. Из этих данных, путём двумерной интерполяции, были получены поверхности потенциальной энергии для электрического поля ловушек, после чего появилась возможность сравнить их между собой, а также с теоретическим идеальным полем квадруполя. Разность поверхностей потенциальной энергии ловушек на стержнях и лезвиях (рис. 5) растёт при удалении от центра и составляет более 20 В у электродов.

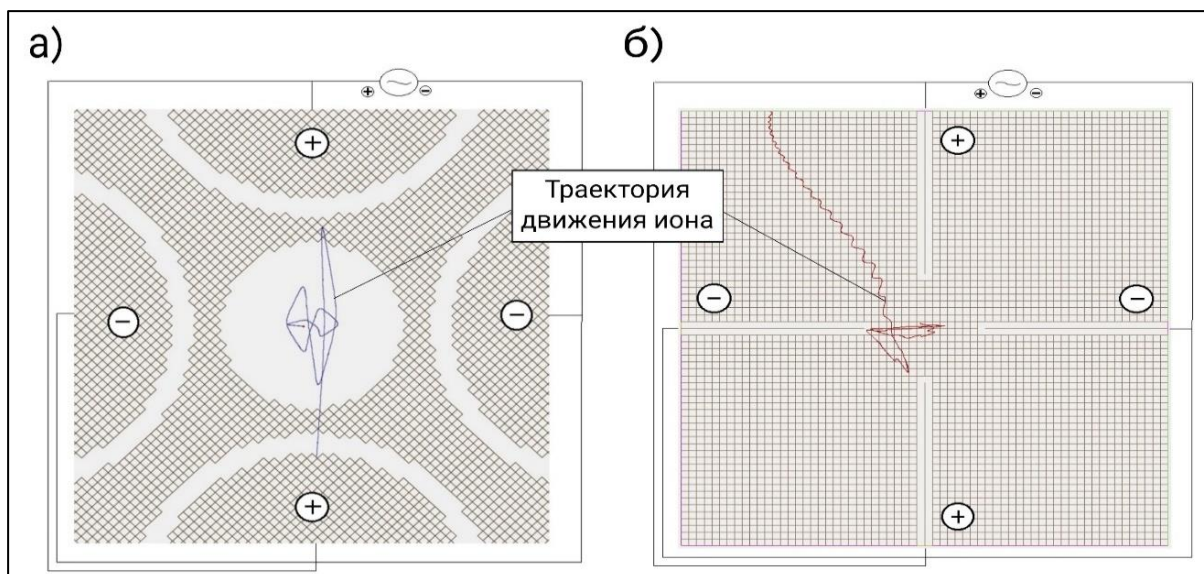


Рис. 4. Модели ионных ловушек на стержнях (а) и на лезвиях (б)

Разницу потенциалов лучше всего иллюстрируют радиальное и круговое сечение.

На рисунке 6 показаны графики сечений в радиальном направлении и кругового сечения на расстоянии 0.5 мм от центра ловушки. Также приведены графики сечений для ловушки, поле которой является идеальным квадруполем.

Из этих графиков видно, что поверхности потенциалов для различных типов ловушек разнятся. Расхождение с идеальным квадруполем больше у ловушки на лезвиях; для ловушки на стержнях расхождение минимально и наблюдается преимущественно на удалении от центра ловушки, т.е. вблизи стержней.

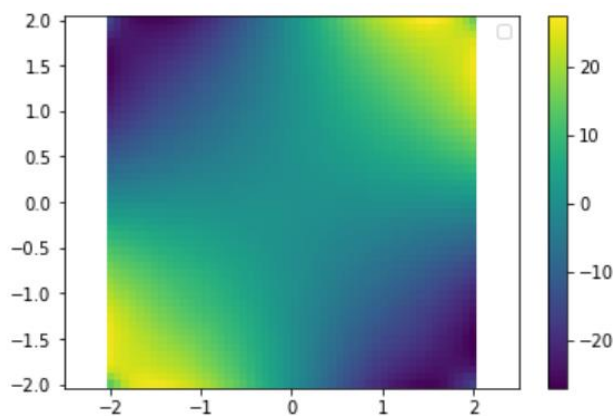


Рис. 5. Разность поверхностей потенциальной энергии для ловушки на лезвиях и стержнях. Электроды расположены диагонально

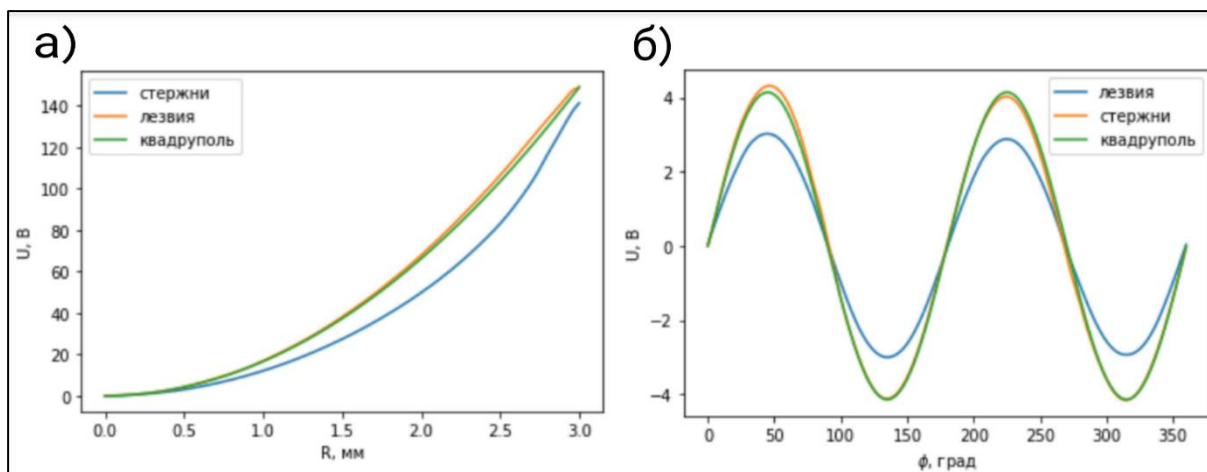


Рис. 6. Сечение в радиальном направлении (а) и круговое сечение (б)

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате данной работы мы подтвердили тот факт, что, несмотря на высокий оптический доступ при использовании ловушки на лезвиях, её поле сильно отличается от поля идеального квадруполь.

В случае же ловушки на стержнях, низкая эффективность сбора фотонов компенсируется тем, что поле близко к идеальному полю квадруполь.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Патент №2466475 Российская Федерация, МПК H01J 49/42 (2006.01). Система электродов линейной ионной ловушки: №2010104792: заявл: 2010.02.11: опубл. 2012.11.10/ Судаков Михаил Юрьевич. — 14 с.: ил. — Текст: непосредственный.
2. Douglas Donald. J. Linear ion traps in mass spectrometry/ Donald J. Douglas, Aaron J. Frank, Dunmin Mao. — Текст: непосредственный // Mass Spectrometry Reviews. — 2005. — № 24. — С. 1-29.
3. Sudakov M. Excitation Frequencies of Ions Confined in a Quadrupole Field With Quadrupole Excitation/ M. Sudakov, N. Konenkov, D. J. Douglas, T. Glebova. — Текст: непосредственный// American Society for Mass Spectrometry. — 2000. — №11. — С. 10-18.
4. D. A. Dahl, "SIMION for the personal computer in reflection," Int. J. Mass Spectrom. 200 (2000) 3. (source: Adaptas Solutions, LLC, Palmer, MA adaptas.com)

NUMERICAL SIMULATION OF VARIOUS TYPES OF RADIO FREQUENCY QUADRUPOLE ION TRAPS

E.A. Batrakova^{1,2}, I.O. Antonov^{1,2}

*¹Lebedev Physical Institute, Samara Branch
(Novo-Sadovaya str., 221, Samara, Russia, 443011)*

*²Samara National Research University,
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)
e-mail: evabatrakova2610@gmail.com*

In this paper, numerical simulation of blade- and rod-based ion traps are performed with the Simion software package. Interpolated potential energy surfaces for both types of traps are compared with each other and with the analytical quadrupole potential.

Keywords: blades ion trap, rods ion trap, potential energy surfaces.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛАЗЕРНОЙ ПЛАЗМЫ АЛЮМИНИЕВЫХ МИШЕНЕЙ В РЕНТГЕНОВСКОМ ДИАПАЗОНЕ СПЕКТРА

Д.М. Безверхняя¹, А.Т. Саакян¹, В.Н. Пузырёв¹, А.Н. Стародуб¹,
А.А. Кологривов¹

¹ФГБУН Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН
(119991, г. Москва, Ленинский проспект, 53)
e-mail: d.bezverhnyaya@lebedev.ru

На установке «Канал-2» проведены исследования пространственно-временных и спектральных свойств лазерной плазмы алюминиевых мишеней в диапазоне спектра рентгеновского излучения. Плазма создавалась при воздействии излучения лазера на неодимовом стекле на сплошные твердотельные мишени из алюминия. При длительности лазерного импульса по поперечному сечению 3.2 нс плотность мощности в пятне фокусировки на мишени варьировалась в диапазоне $6 \cdot 10^{12} - 4 \cdot 10^{13}$ Вт/см². В экспериментах использовались рентгеновская электронно-оптическая камера и спектрограф скользящего падения с отражающей дифракционной решёткой. В ходе экспериментов с применением камеры-обскуры были зарегистрированы изображения алюминиевой плазмы в режиме однокадровой съёмки и эволюция её разлёта в режиме линейной развёртки наносекундной длительности. Также зарегистрированы спектры излучения плазмы в диапазонах мягкого рентгеновского излучения и вакуумного ультрафиолета.

Ключевые слова: рентгеновское излучение, мягкое рентгеновское излучение, стрип-камера, плазма, лазерное излучения.

1. ВВЕДЕНИЕ

Задача создания мощных источников мягкого рентгеновского излучения (МРИ) в настоящее время актуальна для развития микроэлектроники (рентгеновская литография), биомедицины (рентгеновская микроскопия) и фундаментальных исследований (материаловедение) [1-3]. Для этих целей перспективным и компактным источником МРИ является лазерная плазма, эффективностью которой

можно управлять, корректируя характеристики как лазерного излучения, так и мишени, включая её материал и структуру [4].

Целью данной работы являлось исследование пространственно-временных характеристик и спектров создаваемой алюминиевой плазмы в рентгеновском диапазоне спектра при воздействии на мишень мощным лазерным импульсом наносекундной длительности.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА

Исследование проводилось на установке «Канал-2» с использованием лазера на неодимовом стекле: длина волны излучения – 1.06 мкм, ширина спектра $\approx 42 \text{ \AA}$, длительность импульса по полувысоте – 3.2 нс, плотность мощности в пятне фокусировки ($\varnothing 160 \text{ мкм}$) варьировалась в диапазоне $6 \cdot 10^{12} - 4 \cdot 10^{13} \text{ Вт/см}^2$. В качестве мишеней использовались пластины из сплошного твердотельного алюминия разной толщины.

Для изучения динамики образования плазмы в рентгеновском диапазоне спектра была введена в эксплуатацию электронно-оптическая камера (ЭОК) (стрик-камера) со спектральной чувствительностью фотокатода 0.1 – 10 кэВ, которая позволяет проводить регистрацию быстропротекающих процессов с высоким пространственным разрешением в нано- и микросекундных временных диапазонах линейной развёртки [5]. Детектирование сигнала производилось на микроканальную пластину (МКП), а регистрация изображения на выходе камеры производилась с помощью ПЗС считывающего устройства с непосредственным вводом изображения в персональный компьютер. Для установки ЭОК к экспериментальной камере взаимодействия был разработан, изготовлен и подсоединён дополнительный вакуумный канал (рукав), установленный под углом 60° относительно направления воздействующего по нормали на мишень лазерного излучения. Конструкция созданного вакуумного канала позволила разместить обскуру вблизи создаваемой плазмы с возможностью регулирования коэффициента увеличения (в данных экспериментах — 11 раз) в плоскости регистрации. Перед обскурой была закреплена алюминиевая фольга толщиной 10 мкм, которая отсекала излучение с длинами волн выше 16 \AA .

Часть излучения плазмы, образованной взаимодействием сфокусированного лазерного излучения с мишенью, распространялась в

направлении ЭОК. Для предотвращения пробоя и выхода из строя МКП, работающей под высоким напряжением, был установлен дополнительный компактный турбомолекулярный насос, что позволило повысить уровень вакуума в камере взаимодействия до значения $7 \cdot 10^{-5}$ Торр, а в канале с МКП – до уровня 10^{-6} Торр. Для своевременного запуска системы регистрации ЭОК, синхронизованного с воздействующим на мишень лазерным импульсом, была проведена работа по обеспечению диагностики запускающим электрическим импульсом необходимой амплитуды, длительности и временной задержки.

Для исследования спектральных характеристик излучения плазмы в широком диапазоне длин волн 20 – 600 Å, включающем МРИ и ВУФ, применялся спектрограф скользящего падения с отражающей дифракционной решёткой, обеспечивающий высокое спектральное разрешение (0.3 Å).

Таким образом, совместное использование этих двух диагностических приборов позволило исследовать диапазоны жёсткого и мягкого рентгеновского излучения, а также вакуумного ультрафиолета.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТОВ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В ходе исследований с применением камеры-обскуры на ЭОК было зарегистрировано пространственное распределение интенсивности излучения алюминиевой плазмы в диапазоне рентгеновского излучения с длиной волны ниже 16 Å в режиме однокадровой съёмки, а также эволюция свечения плазмы в режиме линейной развёртки наносекундной длительности. Также, для каждого лазерного выстрела были получены спектры излучения плазмы в диапазонах МРИ и ВУФ.

На рисунке 1 приведено изображение плазмы при экспозиции кадра 33 нс и энергии излучения лазерного импульса 13.2 Дж. С учётом 11-кратного увеличения и наличия алюминиевой фольги толщиной 10 мкм величина плазмы составила по вертикали 270 мкм, по горизонтали 170 мкм.

На рисунке 2 представлено изображение эволюции разлёта алюминиевой плазмы в режиме линейной развёртки с применением щелевого фотокатода при энергии излучения лазерного импульса 22.6 Дж. Полученное изображение демонстрирует пространственное расширение излучающей в рентгеновском диапазоне спектра области плазмы в течение

длительности воздействующего лазерного импульса. С завершением воздействия лазерного импульса в течение ≈ 1 нс происходит обратное сужение излучающей в рентгеновском диапазоне спектра области плазмы. Длительность наиболее яркого свечения плазмы составила 3.8 нс, а его максимальный пространственный размер по вертикали – 230 мкм.

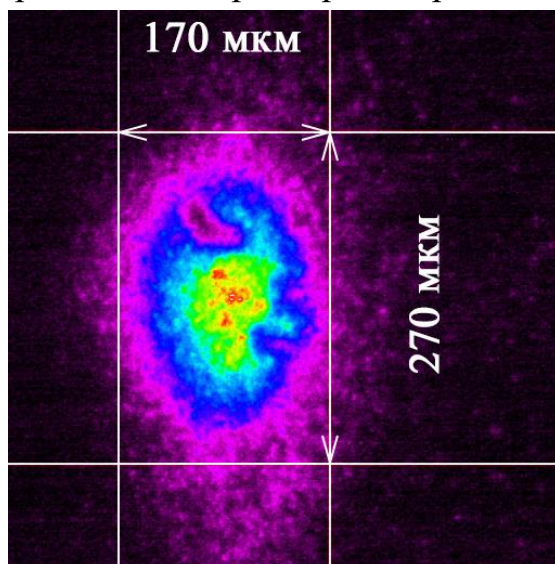


Рис. 1. Изображение свечения алюминиевой плазмы в рентгеновском диапазоне спектра, полученное с помощью камеры-обскуры при энергии лазерного импульса 13.2 Дж ($\approx 2 \cdot 10^{13}$ Вт/см²)

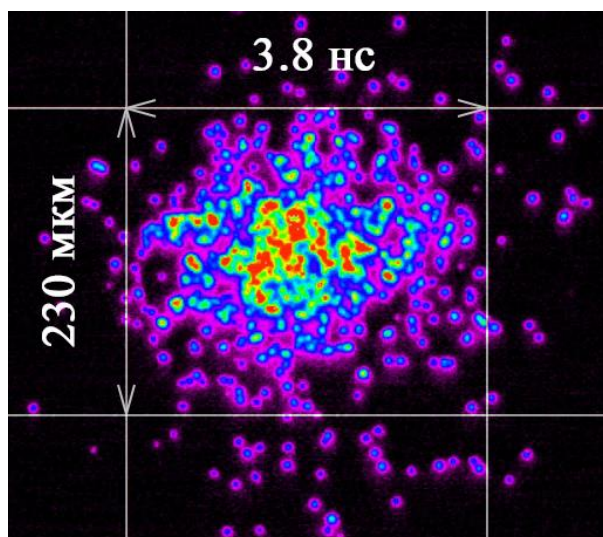


Рис.2. Изображение эволюции разлёта алюминиевой плазмы в рентгеновском диапазоне спектра в режиме линейной развёртки при энергии лазерного импульса 22.6 Дж ($\approx 3.5 \cdot 10^{13}$ Вт/см²)

Спектры МРИ и ВУФ алюминиевой плазмы, полученные в тех же лазерных выстрелах, что и результаты рисунков 1 и 2, приведены на рисунках 3 и 4, соответственно. По оси абсцисс отложена длина волны в ангстремах, по оси ординат – интенсивность в относительных единицах измерения. Видно, что с повышением энергии лазерного излучения возрастает интенсивность линий, находящихся в коротковолновом диапазоне спектров. Это свидетельствует о наличии более высокотемпературной плазмы при значении энергии лазерного импульса 22.6 Дж.

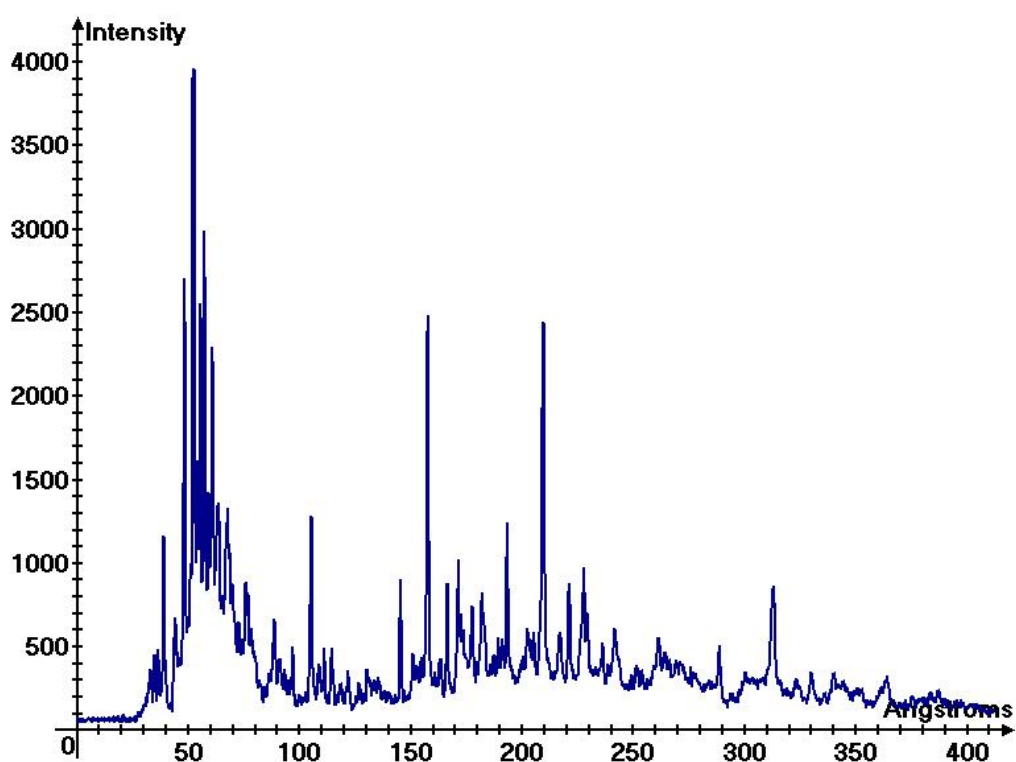


Рис. 3. Спектры МРИ и ВУФ алюминиевой плазмы, полученные при энергии лазерного импульса 13.2 Дж ($\approx 2 \cdot 10^{13}$ Вт/см²)

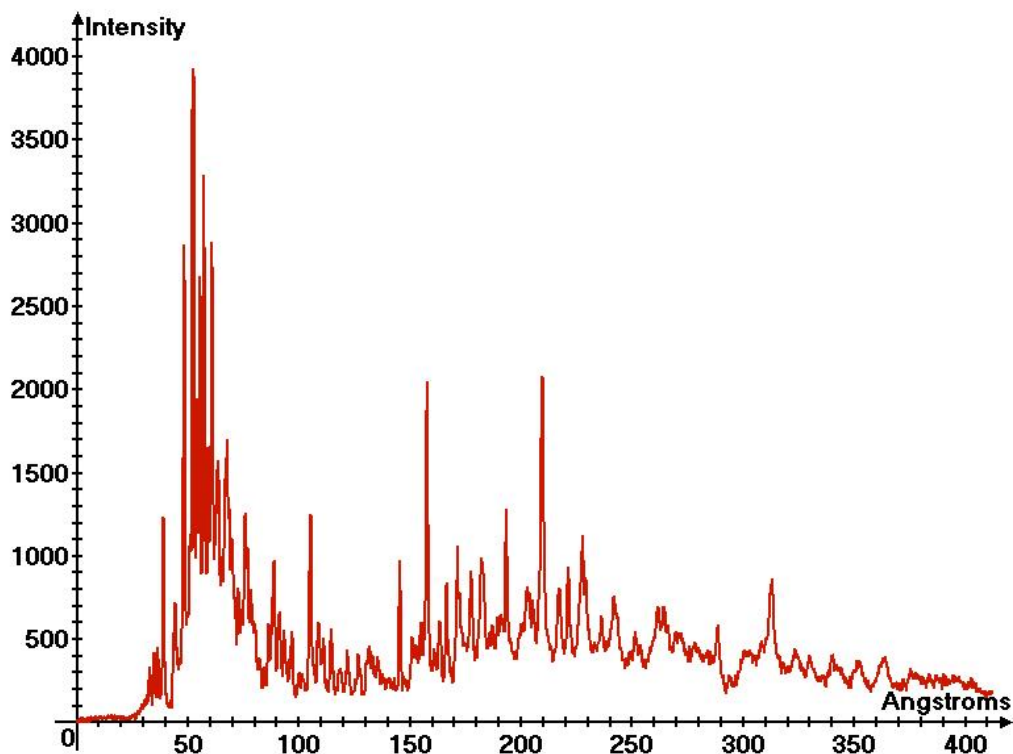


Рис. 4. Спектры МРИ и ВУФ алюминиевой плазмы, полученные при энергии лазерного импульса 22.6 Дж ($\approx 3.5 \cdot 10^{13}$ Вт/см²)

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведены исследования пространственно-временных и спектральных свойств лазерной плазмы в рентгеновском диапазоне спектра при взаимодействии излучения лазера на неодимовом стекле наносекундной длительности со сплошными твердотельными мишенями из алюминия. В экспериментах были зарегистрированы изображения плазмы в режимах однокадровой съёмки и линейной развёртки, оценены размеры и длительность излучения. Также исследованы спектры излучения плазмы в диапазонах длин волн МРИ и ВУФ, демонстрирующие повышение температуры создаваемой плазмы с увеличением энергии воздействующего лазерного импульса.

В экспериментах с рентгеновской электронно-оптической камерой для отсека ВУФ на камеру-обскуру была приклеена алюминиевая фольга толщиной 10 мкм, которая отсекала, в том числе, некоторую часть МРИ. В дальнейших исследованиях планируется использовать более тонкую алюминиевую фольгу, либо тонкие фольги из бериллия для увеличения

интенсивности регистрируемого МРИ и выделения необходимого в исследованиях диапазона длин волн.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Jacobsen C. Future challenges for x-ray microscopy.// AIP Conf. Proc. 1696, 2016, v. 1696, № 1, p. 020035.
2. Chen S., Paunesku T., Yuan Y., Deng J., Jin Q., Hong Y. P., Vine D. J., Lai B., Flachenecker C., Hornberger B., Brister K., Jacobsen C., Woloschak G. E., and Vogt S. 2D/3D cryo x-ray fluorescence imaging at the bionanoprobe at the advanced photon source.// AIP Conf. Proc. 1696, 020028 (2016).
3. Higashiguchi T., Otsuka T., Jiang W., Endo A., Li B., Dunne P. and O'Sullivan G. Efficient "water window" soft x-ray high-Z plasma source.// Journal of Physics: Conference Series 463 (2013) 012024.
4. Lokasani R. et al. Spectra of plasmas of Ru, Rh, Pd and Mo produced with nanosecond and picosecond laser pulses //Laser Acceleration of Electrons, Protons, and Ions III; and Medical Applications of Laser-Generated Beams of Particles III. – SPIE, 2015, v. 9514, p. 112-118.
5. Feldman G.G., Lebedev V.B., Siniichuk A.A. An apparatus for measuring the characteristics of the high-speed image converter cameras operating in the range of soft x-rays and vacuum UV.// Instruments and Experimental Techniques. 2020, v. 63, № 5, p. 767-772.

STUDIES OF THE LASER PLASMA OF AN ALUMINUM TARGETS IN THE X-RAY RANGE OF THE SPECTRUM

D.M. Bezverkhnyaya¹, A.T. Sahakyan¹, V.N. Puzyrev¹, A.N. Starodub¹,
A.A. Kologrivov¹

*¹Lebedev Physical Institute, Russian Academy of Sciences
(119991, Moscow, Leninsky prospect, 53)
e-mail: d.bezverhnyaya@lebedev.ru*

The Studies of spatio-temporal and spectral properties of the laser plasma of an aluminum targets in the soft X-ray range were carried out at the Kanal-2 facility. The plasma was created by irradiating solid aluminum targets with Nd:glass laser radiation. With a laser pulse duration at half maximum of 3.2 ns, the power density in the focusing spot on the target varied in the range $6 \cdot 10^{12}$ - $4 \cdot 10^{13}$ W/cm². An X-ray electron-optical camera and a grazing incidence spectrograph with a reflective diffraction grating were used in the experiments. Images of aluminum plasma in the single-frame shooting mode and the evolution of its expansion in the nanosecond linear sweep mode were recorded during experiments using a camera obscura. Plasma radiation spectra in the soft x-ray and vacuum ultraviolet ranges have also been recorded.

Keywords: soft x-rays, streak camera, plasma, laser radiation.

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МАССИВОВ СПЕКТРОВ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА СТАТИСТИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ АЛГОРИТМОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Я.А. Бычкова¹, А.Ю. Зюбин¹, И.Г. Самусев¹

*¹Балтийский федеральный университет им. И. Канта
(236016, г. Калининград, ул. Александра Невского, 14)
e-mail: 18377@mail.ru*

Данная работа посвящена разработке и применению математических методов классификации и различения малоразрешаемых спектральных массивов данных комбинационного рассеяния света для комплексных биологических соединений на примере тромбоцитов человека. Для решения данной задачи были применены: алгоритма NIPALS, основанного на методе главных компонент, и алгоритм случайного леса.

Ключевые слова: спектроскопия, спектры комбинационного рассеяния света, сердечно-сосудистые заболевания, алгоритм NIPALS, метод главных компонент, алгоритм случайного леса.

1. ВВЕДЕНИЕ

Сердечно-сосудистые заболевания (ССЗ) являются ведущей причиной смерти во всем мире и в Российской Федерации. По оценкам, в 2016 году от сердечно-сосудистых заболеваний умерло 17,9 миллиона человек, что составляет 31% всех смертей в мире. 85% этих смертей были вызваны сердечным приступом и инсультом [1]. Сердечно-сосудистые заболевания являются ведущей причиной смерти, наиболее частой причиной госпитализаций и инвалидности среди населения Российской Федерации. В то же время около 40% людей в России умирают в активном трудоспособном возрасте (25-64 года).

Целью данной работы является разработка решения для важной прикладной проблемы – дифференциации спектров комбинационного рассеяния света у пациентов с патологиями сердечно-сосудистых заболеваний и без них, выявлению спектральных маркеров изменений тромбоцитов при патологиях и вследствие приема препаратов.

В данной статье описываются результаты применения статистических подходов к обработке массивов спектральных данных для различных групп пациентов: здоровых пациентов, пациентов с патологиями сердечно-сосудистых заболеваний, здоровых пациентов, получающих терапию, и пациентов с патологиями сердечно-сосудистых заболеваний, получающих терапию. Показана применимость алгоритма NIPALS, основанного на методе главных компонент, и алгоритма случайного леса.

2. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ МАССИВОВ СПЕКТРОВ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

2.1. Обработка спектральных данных с помощью метода главных компонент

Для применения метода главных компонент, массив спектральных данных был преобразован (транспонирован) таким образом, что в первой строке таблицы были расположены спектральные сдвиги, а в последующих – интенсивности спектров пациентов, соответствующие этому спектральному сдвигу.

| | 400 | 405 | 410 | 415 | 420 | 425 | 430 | 435 | 440 | 445 |
|----|-------|-------|-------|---------|-------|-------|---------|-------|-------|---------|
| 2 | 25225 | 25246 | 25289 | 25436 | 25527 | 25581 | 25654,5 | 25615 | 25678 | 25759 |
| 3 | 8921 | 8938 | 8961 | 9002,5 | 9020 | 9025 | 9002,5 | 8986 | 8955 | 8971 |
| 4 | 10161 | 10226 | 10257 | 10284,5 | 10321 | 10322 | 10295 | 10214 | 10193 | 10183,5 |
| 5 | 6689 | 6719 | 6697 | 6721,5 | 6732 | 6799 | 6760,5 | 6719 | 6711 | 6733 |
| 6 | 11241 | 11263 | 11318 | 11360 | 11419 | 11379 | 11345 | 11308 | 11267 | 11248 |
| 7 | 6950 | 6948 | 6970 | 6980,5 | 7016 | 7015 | 6995,5 | 6995 | 6970 | 6982 |
| 8 | 7394 | 7425 | 7422 | 7475 | 7477 | 7485 | 7451 | 7434 | 7404 | 7394 |
| 9 | 8579 | 8591 | 8645 | 8672 | 8680 | 8665 | 8639 | 8572 | 8526 | 8546,5 |
| 10 | 8581 | 8604 | 8608 | 8637 | 8659 | 8655 | 8635,5 | 8612 | 8604 | 8578,5 |

Рис. 1. Массив спектральных данных в программе Statistica 13

Далее в программе Statistica 13 проводился анализ данных с помощью алгоритма анализа многопараметрических данных NIPALS (PCA/PLS), который мы использовали для построения PCA счетов и нагрузок, в нем на каждом шагу последовательно вычислялась одна компонента.

Рассмотрим анализ спектральных данных здоровых пациентов без терапии. Мы получили диаграмму рассеяния значений, на которой видно, что большинство наблюдений находится в одном диапазоне, а именно 354 наблюдений из 376.

Для исследования роли переменных использовалось значение спектрального сдвига, для чего была рассмотрена диаграмма рассеяния нагрузок. Диаграмма рассеяния нагрузок иллюстрирует незначительное (± 0.15) рассеяние по компоненте 2, и менее 0.05 по компоненте 1, являющейся наиболее значимой при анализе. Данное поведение наблюдалось также и внутри других групп.

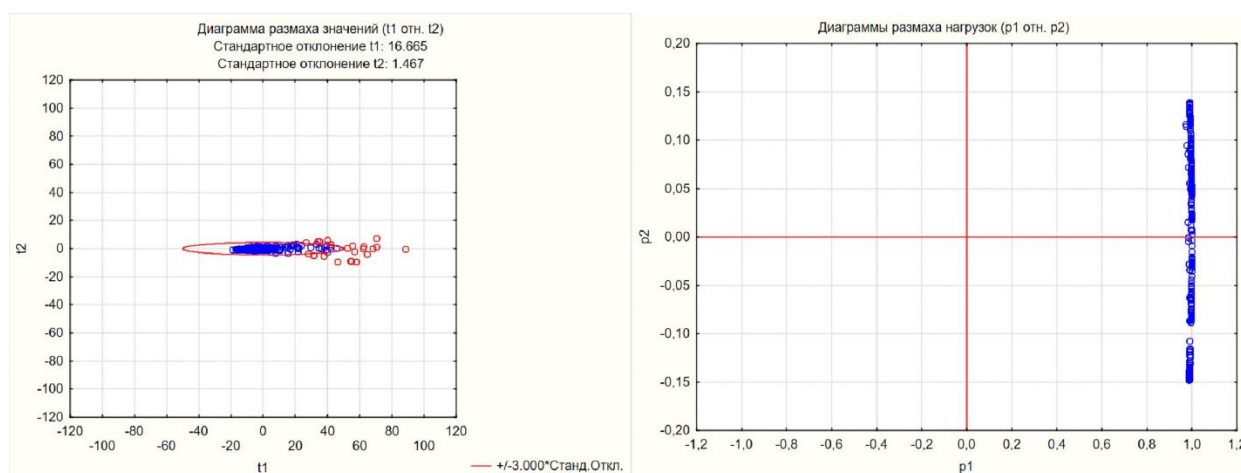


Рис.2. Диаграмма рассеяния значений и диаграмма рассеяния нагрузок для группы здоровых пациентов без терапии

Также был рассмотрен график вклада значений, с помощью которого были выделены наиболее значимые для анализа переменные. На нем для каждого значения спектрального сдвига приведено соответствующее значение отклонения этого сдвига, то есть его вариация при проведении данного анализа.

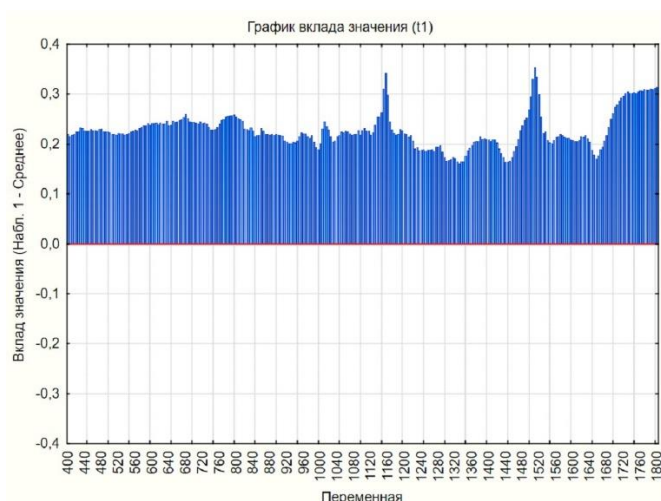


Рис. 3. График вклада значений для группы здоровых пациентов без терапии

Для каждой из групп пациентов были выделены наибольшие вариации значений и их интерпретация, которые описаны в таблице 1. Значения из таблицы 1 являются наиболее непостоянными и по ним можно судить о характерных выбросах данных.

Таблица 1. Интерпретация наибольших вкладов значений для всех групп пациентов.

| Сдвиг | Интерпретация | Вклад значений | | | | |
|-------|---------------|----------------------|---------------------|----------------|-----------------|----------------|
| | | Здоровые без терапии | Здоровые на терапии | После инфаркта | ССЗ без терапии | ССЗ на терапии |
| 1155 | Белок | 0,34141 | - | 0,602797 | 0,93952 | 0,58014 |
| 1520 | Белок | 0,35264 | 0,52005 | - | - | - |
| 1000 | Фенилаланин | - | - | 0,687418 | 0,94636 | 0,60063 |

Более важными являются менее вариативные значения спектральных сдвигов. Эти значения более схожи со всеми наблюдениями на определенном сдвиге в какой-либо выборке. В таблице 2 приведены наименьшие вариации значений и их интерпретация.

Таблица 2. Интерпретация наименьших вкладов значений для всех групп пациентов.

| Сдвиг | Интерпретация | Вклад значений | | | | |
|-------|---------------------------|----------------------|---------------------|----------------|-----------------|----------------|
| | | Здоровые без терапии | Здоровые на терапии | После инфаркта | ССЗ без терапии | ССЗ на терапии |
| 1440 | Насыщенный липидами белок | 0,15956 | 0,07365 | - | - | - |
| 1655 | Амид I | 0,16992 | 0,07957 | - | - | - |

Интерпретация спектральных сдвигов была взята из работы [2]. Результаты данного анализа хорошо коррелируют с работами по описанию изменений спектральных групп белков, например [3].

2.2. Обработка спектральных данных с помощью машинного обучения

Для решения задачи классификации с помощью случайных лесов в таблицу с данными был добавлен столбец группа, в котором указывалось наименование группы пациентов выбранного наблюдения.

Рассмотрим классификацию данных по группам пациентов. Большинство данных было верно выявлено с помощью алгоритма случайный лес, что видно из рисунка 4.



Рис. 4. Матрица классификации для разделения здоровых пациентов без терапии от пациентов ССЗ без терапии

Корректность алгоритма распределения наблюдений по группам пациентов составила 83,4%, что видно в таблице 3.

Таблица 3. Матрица классификации для разделения здоровых пациентов без терапии от пациентов ССЗ без терапии.

| | Предсказ. здоровые без терапии | Предсказ. ССЗ без терапии |
|------------------------------|--------------------------------|---------------------------|
| Наблюд. здоровые без терапии | 37.5% | 10.07% |
| Наблюд. ССЗ без терапии | 6.53% | 45.9% |

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате данной работы была показана перспективность методов математической статистики и машинного обучения для дифференциации спектров комбинационного рассеяния света у пациентов с патологиями сердечно-сосудистых заболеваний и без них.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сердечно-сосудистые заболевания, Электронный ресурс, URL: [https://www.who.int/ru/news-room/fact-sheets/detail/cardiovascular-diseases-\(cvds\)](https://www.who.int/ru/news-room/fact-sheets/detail/cardiovascular-diseases-(cvds))
2. Zyubin A. et al. Surface-enhanced Raman spectroscopy for antiplatelet therapy effectiveness assessment //Laser Physics Letters. – 2020. – Т. 17. – №. 4. – С. 045601.
3. Barth A. Infrared spectroscopy of proteins //Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Bioenergetics. – 2007. – Т. 1767. – №. 9. – С. 1073-1101.

MATHEMATICAL ANALYSIS OF ARRAYS OF RAMAN SPECTRA BY STATISTICAL METHODS USING MACHINE LEARNING ALGORITHMS

Y.A. Bychkova¹, A.Y. Zyubin¹, I.G. Samusev¹

*¹Immanuel Kant Baltic Federal University
(Alexander Nevsky, 14, Kaliningrad, Russia, 236016)
e-mail: 18377@mail.ru*

This work is devoted to the development and application of mathematical methods for classifying and distinguishing low-resolution spectral arrays of Raman data for complex biological compounds on the example of human platelets. To solve this problem, the NIPALS algorithm based on the principal component method and the random forest algorithm were applied.

Keywords: spectroscopy, Raman spectra, cardiovascular diseases, NIPALS algorithm, principal component method, random forest algorithm.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТА РЕЗИСТИВНОГО ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ В ОКСИДНЫХ НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ ТИТАНА

А. С. Ванькаев¹, Е. В. Ключкина², С. А. Лисицын³

¹*МИРЭА - Российский технологический университет*

²*Первый Московский государственный медицинский университет
им. И. М. Сеченова*

³*Общество с ограниченной ответственностью "Международный
центр квантовой оптики и квантовых технологий"*

email: s.vankaev14@gmail.com, katerina-klyukina@mail.ru

В работе представлены основные научные результаты по исследованию оксидных наноразмерных структур (ОНС) титана. Доказано наличие эффекта резистивного переключения, в ОНС, полученных методом локального анодного окисления (ЛАО). Показан технологический маршрут формирования структур на сканирующем зондовом микроскопе (СЗМ). Исследован эффект резистивного переключения ОНС титана методом АСМ-спектроскопии. По результатам работы построены графики вольт-амперных характеристик (ВАХ), подтверждающие его наличие и проявление.

Ключевые слова: нанотехнологии, сканирующая зондовая микроскопия, эффект резистивного переключения, локальное анодное окисление

1. ВВЕДЕНИЕ

Сегодня нельзя представить человека, который бы не использовал компьютеры и гаджеты. Однако современное ПО требует достаточно весомых технических характеристик вычислительных устройств и занимают много места на носителях. Компьютерная память и устройства для записи и хранения информации как раз и являются такими компонентами, которым необходим существенный апгрейд. А последние новости однозначно говорят нам о том, что все это необходимо срочным образом начинать развивать и производить в нашей стране.

Ключевыми недостатками Flash и RRAM памяти, являются ограниченное количество циклов записи информации, высокая энергия для переключения основных составных компонентов, малая плотность для записи информации. Более того, эти элементы полностью энергозависимы. Мы предлагаем свое решение, в основе работе которого лежит принцип

резистивного переключения. Такая технология полностью лишена перечисленных недостатков, более того, она полностью энергонезависима и дополнительно может найти свое применение в различных областях, например в нейроморфных сетях и служить в качестве искусственных синапсов, функционирующих схожим образом с работой человеческого мозга.

В связи с актуальностью мы поставили для себя цель разработать технологический маршрут формирования оксидной наноразмерной структуры титана, обладающей эффектом резистивного переключения, а также исследование свойств и характера его проявления. С нашим руководителем мы поставили проектные задачи, которые необходимы для достижения поставленной цели.

2. ОСНОВНОЙ ТЕКСТ

2.1. Проектные задачи

1. Изучить тематическую научную литературу по эффекту резистивного переключения в ОНС;
2. Найти обоснованный метод по формированию ОНС, обеспечивающий стабильность и воспроизводимость параметров и характеристик формируемых структур и элементов;
3. Определить технологические параметры для реализации метода локального анодного оксидирования (ЛАО);
4. Разработать и реализовать технологический маршрут по формированию матрицы ОНС Ti для последующего её применения в качестве элемента RRAM памяти;

2.2. Ход работы

В самом начале нашей работы мы изучали научную литературу по теме наших исследований. Этот этап необходим для понимания основных фундаментальных принципов эффекта резистивного переключения, материалов, в которых наблюдается этот эффект, методов и методик формирования, а также применяемого оборудования.

Для формирования ОНС нами был выбран метод локального анодного оксидирования (ЛАО) (Рис. 1). Его принцип состоит в окислении тонкого приповерхностного слоя металла под действием зонда. В качестве оборудования мы использовали сканирующий зондовый микроскоп NTMDT NEXТ II, т.к., в одном приборе у нас есть все необходимые методы для формирования ОНС и методики для исследования их электрофизических и поверхностных свойств.

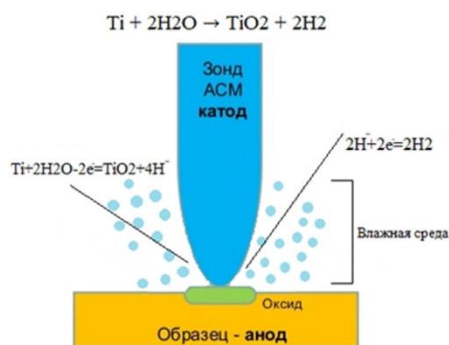


Рис. 1. Принцип работы метода ЛАО

В качестве материала для формирования ОНС мы использовали титан, так как анализ научной литературы показал, что его оксид обладает ярко выраженным эффектом резистивного переключения, при этом характеристики и свойства получаемых структур стабильны.

На следующем этапе работы мы перешли к практической части. В качестве подложки мы использовали многослойную структуру Si/SiO₂/Ti с толщиной Ti 20 нм (Рис. 2). Для начала в режиме атомно-силовой микроскопии мы отсканировали произвольную область площадью 30x30 мкм для выбора оптимального места формирования ОНС с минимальным количеством дефектов и артефактов поверхности (Рис. 3).



Рис. 2. Структурная схема

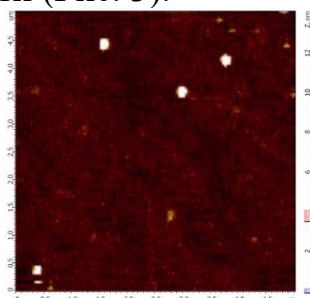


Рис. 3. АСМ-изображение исследуемой области

После чего нам необходимо было определить оптимальные и эффективные параметры для ЛАО. Для этого в программе управления СЗМ мы сформировали шаблон из 20 вертикальных линий (Рис. 4). Каждая линия представляла собой совокупность доступных технологических параметров, таких как подаваемое напряжение, шаг и скорость перемещения зонда, а также время импульса. Влажность составляла около 40% и контролировать при помощи встроенного в СЗМ гигрометра и комнатного увлажнителя воздуха. В результате мы экспериментально подобрали технологические параметры для формирования ОНС, которые коррелируют с научной литературой.

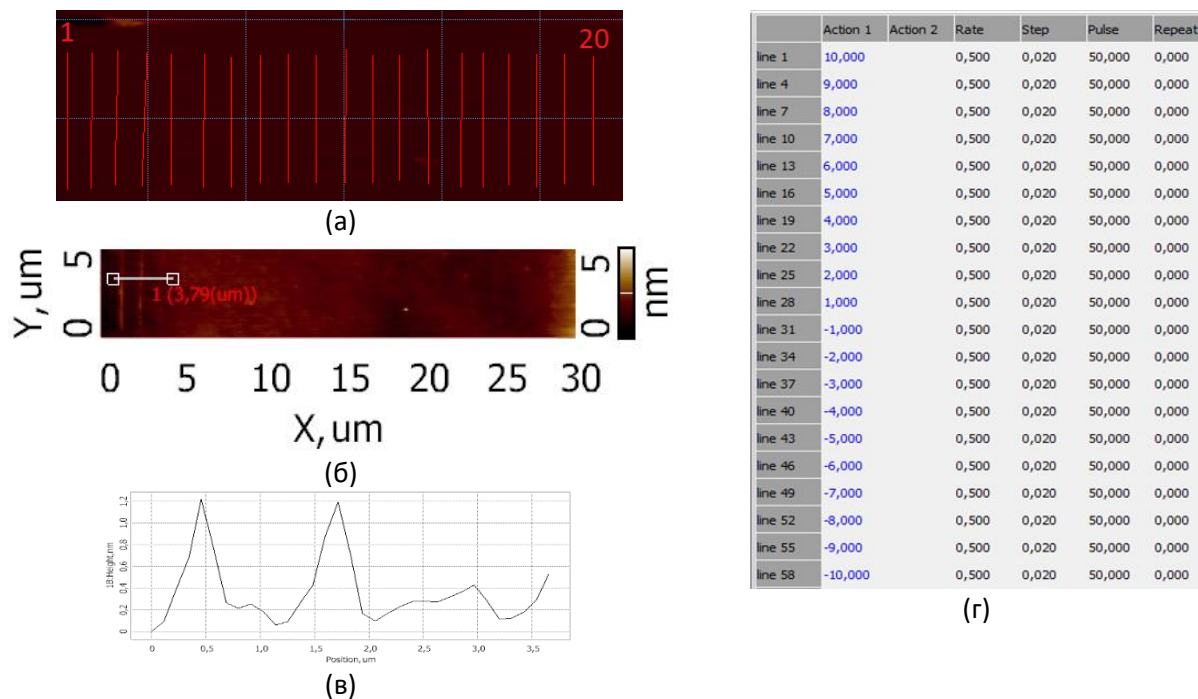


Рис. 4. (а) Шаблон, (б) – АСМ-изображение полученных структур, (в) – Профилограмма вдоль линии, (г) – Параметры для каждой линии

После чего мы перешли к формированию ОНС Ti с разной площадью. Основные технологические параметры составляли: подаваемое напряжение 10 В, скорость сканирования 0.5 мкм/с, время воздействия в точке 200 мс, шаг перемещения 50 нм, влажность 40%. В итоге нами были сформированы несколько массивов ОНС Ti с размерами 2x2, 10x10 и 20x20 мкм для дальнейших исследований (Рис. 5). Нами было замечено, что при увеличении площади ОНС, они все больше отличались по геометрическим параметрам друг от друга. Их толщины уменьшались, а сама структура получалась неоднородной.

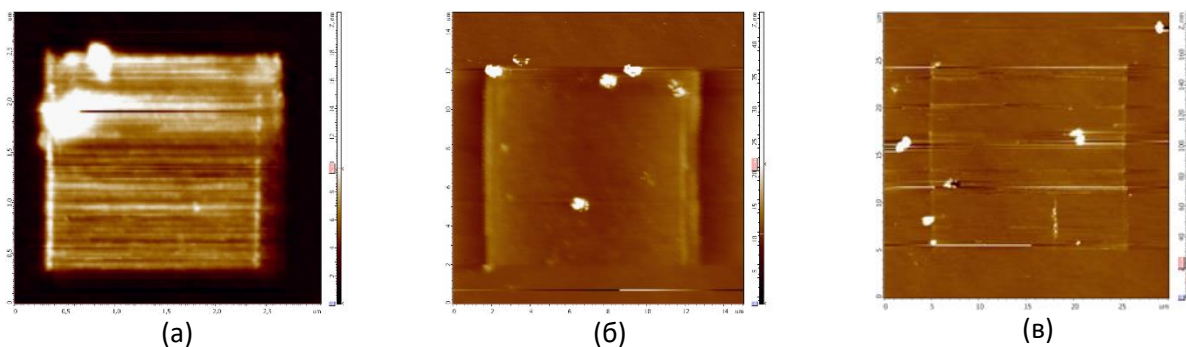


Рис. 5. АСМ-изображение сформированных ОНС с размерами 2x2 (а), 10x10 (б), 20x20 (в)

На следующем этапе нам нужно было доказать, что мы сформировали именно пленку оксида титана. Для этого мы измеряли поверхностный потенциал при помощи метода зонда Кельвина, подавая напряжение 0, -1 и -2 В для каждого из сканирований выбранной единичной структуры. При увеличении отрицательного напряжения изменяется и контраст в сторону уменьшения, что свидетельствует об уменьшении накопления заряда (Рис. 6).

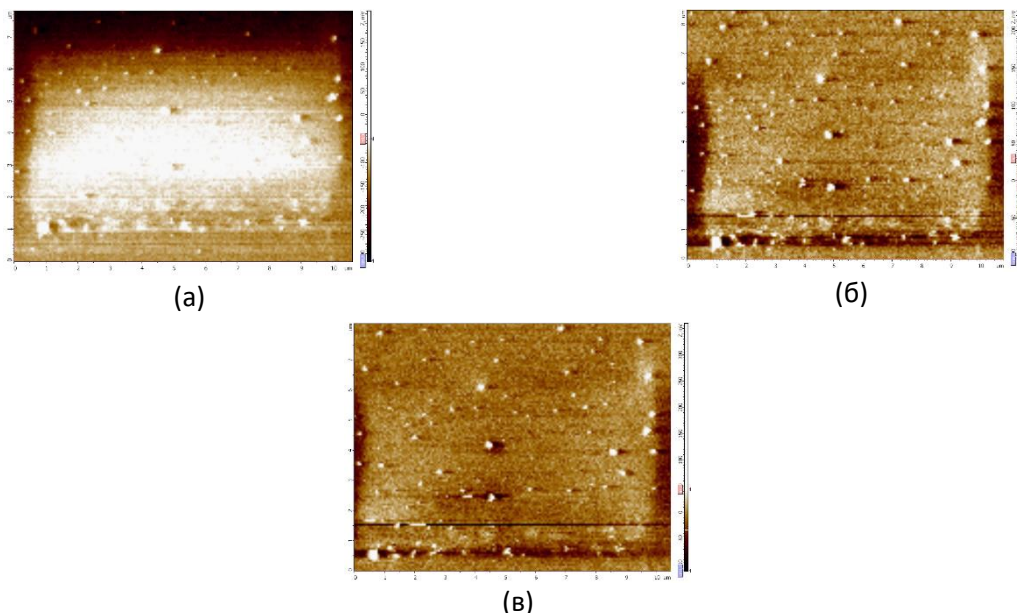


Рис. 6. АСМ-изображение распределения поверхностного потенциала при 0В (а), -1В (б), -2В (в)

На следующем этапе мы исследовали проявление и характер эффекта резистивного переключения в сформированных ОНС. Для этого мы использовали метод АСМ-спектроскопии. В таком методе зонд касается в выбранной точке ОНС и на него подается заданный диапазон напряжений. Нами были выбраны диапазоны от -1 до 1В и от -5 до 5В (Рис. 7).

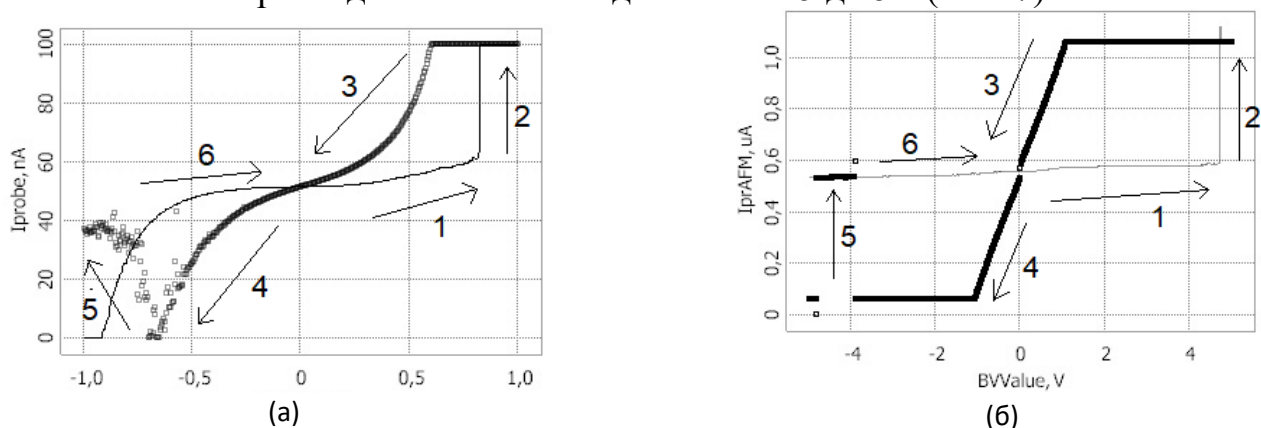


Рис. 7. Графики ВАХ, полученные для ОНС Ti с размерами 2x2 (а), 10x10 (б)

Анализ графиков ВАХ показывает, что структуры ОНС переключается из высокоомного состояния в низкоомное (1 – 3 на графике, Set) при достижении определенного положительном напряжении и обратно в высокоомное состояние (4 - 6 на графике, Reset) при достижении определенного отрицательного напряжения, демонстрируя, таким образом, классическое резистивное переключение.

После чего мы измерили характеристики сформированных ОНС на параметрическом анализаторе Keithley. Полученный график ВАХ также демонстрирует наличие эффекта резистивного переключения (Рис. 8).

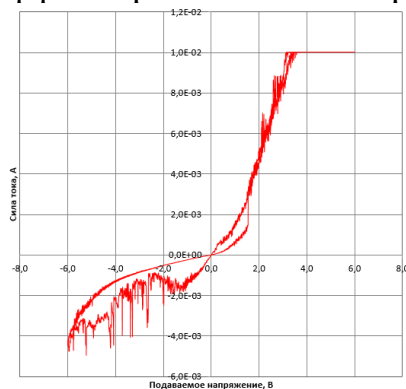


Рис. 8. График ВАХ, полученный на зондовой станции Keithley

Таким образом, все наши задачи на данном этапе исследований выполнены в полном объеме. Мы сформировали ОНС и исследовали их свойства. Сейчас мы работаем над формированием матрицы из 9 ОНС, которые мы соединим по технологии crossbar (Рис. 9). На следующем этапе работы нам нужно будет освоить принципы технологии записи и стирания информации.

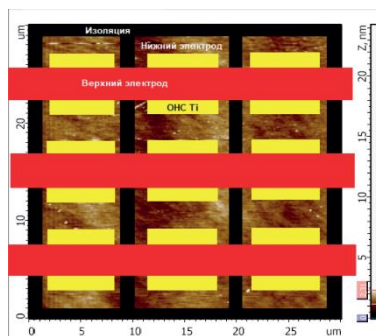


Рис. 9. Структурная схема матрицы

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлены результаты экспериментальных исследований эффекта резистивного переключения на оксидных наноразмерных структурах титана. Построены графики ВАХ, подтверждающие наличие и проявление эффекта резистивного переключения. Определено, что для

структур, меньших по размеру, ток переключения соответственно ниже. Были проведены измерения вольт-амперных характеристик через промежуток времени на другом оборудовании, которые показали воспроизводимость эффекта. Полученные результаты могут быть использованы при разработке технологических маршрутов формирования ОНС, обладающих эффектом резистивного переключения, а также резистивной памяти с использованием зондовых нанотехнологий. Эксперименты и измерения проводились на оборудовании ГБОУ АО ДО «РШТ» и ИПТМ РАН.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. J Joshua Yang 1, Matthew D Pickett, Xuema Li, Douglas A A Ohlberg, Duncan R Stewart, R Stanley Williams. Memristive switching mechanism for metal/oxide/metal nanodevices
2. Strukov D.B., Snider G.S., Stewart D.R., Williams R.S. The missing memristor found // NATURE. –2008. – Vol. 453. – P. 80–83.
3. Szot K., Rogala M., Speier W., Klusek Z. TiO₂ – a prototypical memristive material // Nanotechnology. – 2011. – Vol. 22. – P. 21. В русском переводе.
4. Белавин, А. А. Анализ и оценка рынка устройств на основе мемристоров / А. А. Белавин. — Текст : непосредственный // Молодой ученый. — 2019. — № 19 (257). — С. 105-107
5. В.И. Авилов, О.А. Агеев, А.С. Коломийцев, Б.Г. Коноплев, В.А. Смирнов, О.Г. Цуканова. Формирование и исследование матрицы мемристоров на основе оксида титана методами зондовой нанотехнологии// Известия вузов. ЭЛЕКТРОНИКА № 2(106) 2014.
6. В.С.Эдельман. Сканирующая туннельная микроскопия (обзор). Приборы и техника эксперимента (ПТЭ), 1989, №5, стр. 25-49.
7. Зондовая фотонно-стимулированная нанолитография структур на основе пленки титана / Агеев О.А., Коноплев Б.Г., Поляков В.В. и др. // Микроэлектроника. – 2007.
8. Старцева, А. В. Изучение процесса локального зондового окисления тонких пленок титана / А. В. Старцева, А. И. Максимов. — Текст : непосредственный // Молодой ученый. — 2012. — № 9 (44). — С. 12-17
9. Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)»// Мемристор. Изготовление структуры и исследование ее свойств. Долгопрудный – 2013

INVESTIGATION OF THE RESISTIVE SWITCHING EFFECT IN TITANIUM OXIDE NANOSCALE STRUCTURES

A. S. Vankaev, E. V. Klyukina, S. A. Lisitsyn

*State Autonomous Educational Institution of the Astrakhan region of Additional
Education “Regional School Technopark”*

The paper presents the main scientific results on the study of oxide nanoscale structures (ONS) of titanium. The presence of the resistive switching effect in the ONS obtained by the method of local anodic oxidation (LAO) is proved. The technological route of structure formation on a scanning probe microscope (SPM) is shown. The effect of resistive switching of OH from titanium by AFM spectroscopy is investigated. Based on the results of the work, graphs of volt-ampere characteristics (VAC) are constructed, confirming its presence and manifestation.

Keywords: nanotechnology, scanning probe microscopy, resistive switching effect, local anodic oxidation

ВОЗМОЖНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ ГИПЕРСПЕКТРАЛЬНОЙ ВИЗУАЛИЗАЦИИ ДЛЯ ОЦЕНКИ СТЕПЕНИ ИШЕМИИ КИШЕЧНОЙ СТЕНКИ

И.А. Горюнов¹, В.В. Шуплецов¹, Н.А. Адаменков², А.В. Мамошин^{1,3},
Е.В. Потапова¹, В.В. Дремин¹

¹Орловский государственный университет имени И.С. Тургенева
(302026, г. Орёл, ул. Комсомольская, 95)

²Больница скорой медицинской помощи им. Н.А. Семашко
(302027, г. Орёл, ул. Матвеева, 9)

³Орловская областная клиническая больница
(302087, г. Орёл, б-р Победы, 10)
e-mail: goryunow.il@yandex.ru

В работе рассматривается возможность применения гиперспектрального подхода для оценки степени ишемии стенки кишечника при создании локального нарушения кровообращения на лабораторном животном. В результате экспериментальной части были получены гиперспектральные кубы, представляющие собой пространственное распределение спектральной информации для каждого этапа измерения, и на их основе были построены карты распределения параметра тканевой сатурации, которые могут характеризовать степень ишемии кишечника.

Ключевые слова: гиперспектральная визуализация, ишемия кишечника, оксигенация.

Кишечная ишемия возникает в результате различных нарушений, вызывающих недостаточный приток крови к кишечнику. Тип и прогноз такого повреждения зависит от множества факторов, в том числе и от того, насколько своевременно проведена соответствующая диагностика [1]. На сегодняшний день нет объективного критерия оценки жизнеспособности кишечника. В большинстве случаев цвет и перистальтика петель кишечника помогают хирургу принять решение о определении границ резекции. В этой связи разработка новых методов оценки жизнеспособности тканей во время хирургического вмешательства является перспективным направлением развития современной биомедицинской инженерии и хирургии.

В данном исследовании изучается возможность применения гиперспектральной визуализации для анализа кровотока тканей кишечной стенки лабораторных животных при моделировании локальной ишемии кишечника. Для реализации поставленной задачи была разработана система оптической визуализации, основанная на регистрации диффузного отражения света от биологической ткани с применением гиперспектрального подхода, позволяющая получать пространственное распределение спектральной информации. На рисунке 1 представлена система оптической визуализации. В качестве широкополосного источника излучения использовался разработанный галогенный источник. В качестве детектора, для регистрации обратного диффузно отраженного свет от объекта, использовалась гиперспектральная камера Specim (Spectral Imaging Ltd., Финляндия) со спектральным диапазоном 400-1000 нм.



Рис. 1. Система гиперспектральной визуализации

В соответствии с протоколом исследования производилась срединная лапаротомия у экспериментального животного с последующим выделением петель тонкой кишки из брюшной полости с брыжейкой. Далее осуществлялось наложение лигатуры на аркадные сосуды кишечника 3

капроновыми нитями через каждые 10 см и погружение петель кишечника обратно в брюшную полость. Измерения показателей со стороны петель кишечника с окклюзированными сосудами проходили через 1, 5 и 12 часов после наложения лигатуры. В результате проведения экспериментальных исследований были получены 3 гиперспектральных массива распределения спектральной информации с кишечной стенки для каждого временного интервала. Для нормирования измеренных данных производилась регистрация спектров от эталона диффузного отражения.

Основываясь на различном поглощении света несвязанной и связанной с кислородом формами гемоглобина, был рассчитан параметр тканевой сатурации с использованием двух волнового подхода для ближней инфракрасной области [2-3]:

$$SO_2 = \frac{\mu_{Hb}(\lambda_1) - \mu_{Hb}(\lambda_2) \cdot \frac{R(\lambda_2)}{R(\lambda_1)}}{\mu_{Hb}(\lambda_1) - \mu_{HbO_2}(\lambda_1)}, \quad (1)$$

где $R(\lambda)$ – измеренный коэффициент диффузного отражения на выбранной длине волны;

$\mu_{Hb}(\lambda)$ и $\mu_{HbO_2}(\lambda)$ – коэффициенты поглощения дезоксигенированной и оксигенированной (насыщенной кислородом) крови, соответственно;

λ_1 и λ_2 – длина волны неизобестической и изобестической точек, соответственно.

Расчет сатурации был осуществлен в каждой точке (пикселе) гиперспектральных изображений, на двух длинах волн 750/795 нм, соответствующих поглощению излучения кровью в изобестической и неизобестической точках. Полученные значения сатурации являются относительными и соответствуют приведенной шкале псевдоцветового контраста, представленные на рисунке 2.

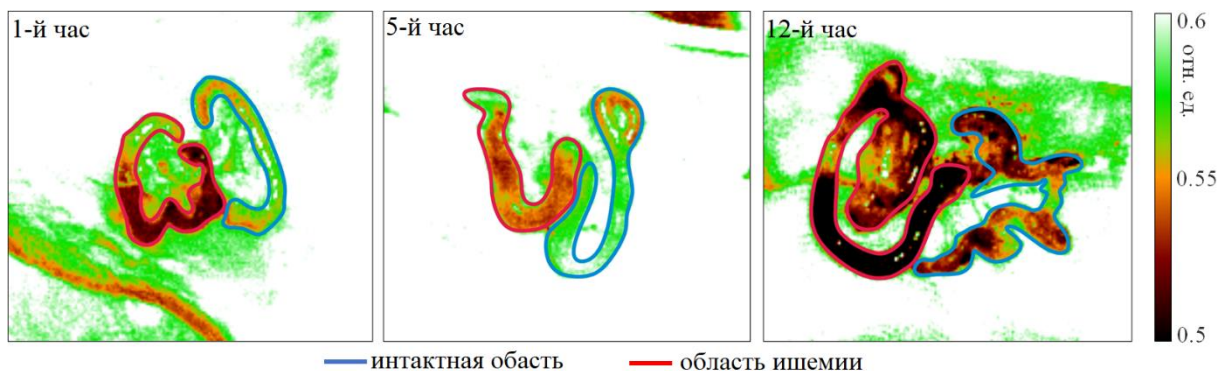


Рис. 2. Карты тканевой сатурации для каждого интервала измерения

На рассчитанных картах сатурации, для всех этапов ишемии, было выявлено визуальное уменьшение контраста в области ишемии кишечной стенки по сравнению с интактными участками, что связано с уменьшением параметра сатурации вследствие недостаточного локального притока крови в областях с лигированными питающими сосудами.

В соответствие с проведённым гистологическим анализом ишемизированных участков ткани, было выделено три степени по классификации Park/Chiu. Обратимая ишемия (Grade 0 – Grade 5) – соответствует результатам измерения после 1-го часа (рисунок 3а). Возможная вероятность обратимой ишемии (Grade 5 – Grade 6) – соответствует результатам измерения после 5-го часа (рисунок 3б). Необратимые ишемические изменения (Grade 7 – Grade 8) – соответствует результатам измерения после 12-го часа (рисунок 3в). Результаты гистологического исследования представлены на рисунке 3.

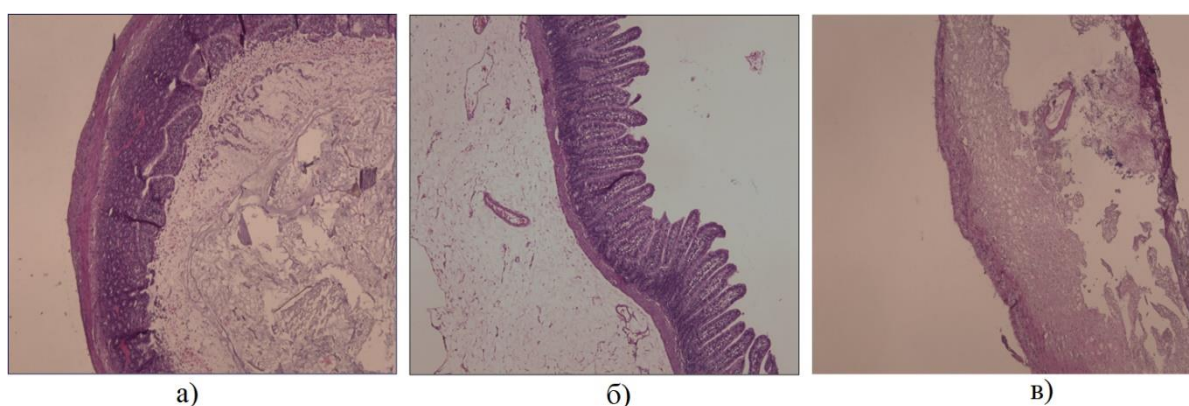


Рис. 3. Гистологический анализ: а) после 1-го часа; б) после 5-го часа; в) после 12-го часа

На рисунке 4а представлены усредненные значения параметра тканевой сатурации, построенные по полученным картам сатурации, для ишемизированных областей кишечника и интактной ткани. Уменьшение значений с каждым временным интервалом свидетельствует о недостаточном притоке крови в области с наложенными на питающие сосуды лигатурами. Также был проведен анализ метгемоглобина, накопление которого является одним из критериев развития некроза ткани, на рисунке 4б представлены усредненные значения параметра оптической плотности на длине волны 630 нм, накопление которого характерно для участков ишемии.

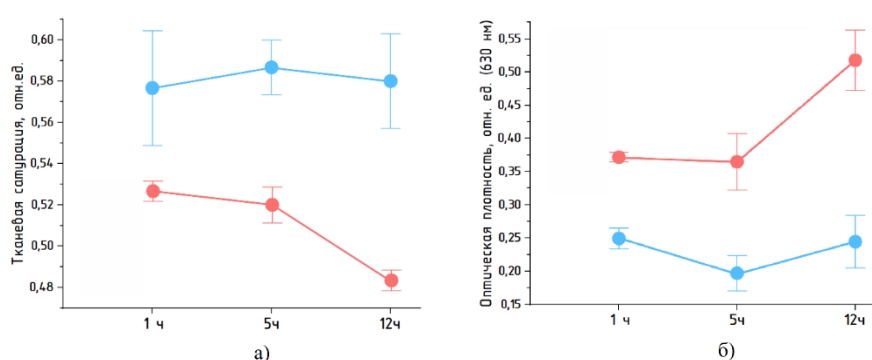


Рис. 4. Усредненные значения различных параметров на всех интервалах измерения: а) параметр тканевой сатурации; б) оптическая плотность на длине волны 630 нм

Исходя из полученных результатов, можно сделать вывод о том, что описанная система и предложенный подход способны диагностировать ишемию кишечника уже после первого часа наложения лигатуры и определить обратимый характер изменений, вызванных нарушением кровоснабжения. Выявленная разница в рассчитанных показателях сатурации для окклюзированных областей по каждому этапу измерения и проведенный анализ метгемоглобина свидетельствует о возможности применения гиперспектральной визуализации для оценки степени ишемии кишечника. Однако различия в выявленной разнице показателей сатурации между временными интервалами наложения лигатуры оказались несущественными, это требует дальнейшего проведения исследований.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда в рамках проекта №21-15-00325.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тимербулатов В.М., Тимербулатов Ш.В., Сагитов Р.Б., Асманов Д.И., Султанбаев А.У. Диагностика ишемических повреждений кишечника при некоторых острых хирургических заболеваниях органов брюшной полости // Креативная хирургия и онкология. – 2017. – №3. – С.12–19.
2. Spott, T., Svaasand, L.O., Anderson, R.E., and Schmedling, P.F., Application of optical diffusion theory to transcutaneous bilirubinometry, Proc. SPIE–Int. Soc. Opt. Eng., 1998, T. 3195, C. 234.
3. Potapova E. V. et al. Evaluation of microcirculatory disturbances in patients with rheumatic diseases by the method of diffuse reflectance spectroscopy // Human Physiology. – 2017. – Т. 43. – №. 2. – С. 222-228.

POSSIBILITIES OF HYPERSPECTRAL IMAGING TO ASSESS THE DEGREE OF ISCHEMIA IN THE INTESTINAL WALL

**I.A. Goryunov¹, V.V. Shupletsov V.V¹, N.A. Adamenkov²,
A.V. Mamoshin^{1,3}, E.V. Potapova¹, V.V. Dremin¹**

*¹Orel State University named after I. S. Turgenev
(302026, Orel, st. Komsomolskaya, 95)*

*²N. A. Semashko Emergency Medical Care Hospital
(302027, Orel, st. Matveeva, 9)*

*³Orel Regional Clinical Hospital
(302087, Orel, blvd., Pobedy, 10)
e-mail: goryunow.il@yandex.ru*

The paper considers the possibility of using hyperspectral approach to assess the degree of intestinal wall ischemia during creation of local circulatory disturbance in a laboratory animal. As a result of the experimental part, hyperspectral cubes representing the spatial distribution of spectral information for each stage of measurement were obtained, and on their basis, maps of tissue saturation parameter distribution were constructed, which can characterize the degree of intestinal ischemia.

Keywords: hyperspectral imaging, intestinal ischemia, oxygenation.

БРЭГГОВСКАЯ ДИФРАКЦИЯ СВЕТА НА ДОМЕННЫХ СТЕНКАХ РЕГУЛЯРНЫХ ДОМЕННЫХ СТРУКТУР В КРИСТАЛЛАХ НИОБАТА И ТАНТАЛАТА ЛИТИЯ

Д.А. Губинская¹, М.А. Федянина¹, Е.Н. Савченков¹

*¹Томский государственный университет систем управления и
радиоэлектроники,
(634050, г.Томск, пр. Ленина, 40)
e-mail: dgubinskaya@bk.ru*

Экспериментально реализована и исследована изотропная и анизотропная дифракция Брэгга различных порядков на доменных стенках регулярных доменных структур в кристаллах 5%MgO:LiNbO₃ и 1%MgO:LiTaO₃.

Ключевые слова: анизотропная дифракция, эффективность дифракции, регулярные доменные структуры, ниобат лития, танталат лития.

1. ВВЕДЕНИЕ

Регулярные доменные структуры (РДС) в сегнетоэлектрических кристаллах ниобата и танталата лития эффективно используются для преобразования спектрального состава и электрооптической модуляции лазерного излучения [1]. Реальные РДС в этих кристаллах отличаются от идеальных: толщина доменных стенок может существенно превышать межатомные расстояния [2]; возможны случайные и систематические ошибки размеров доменов и положения доменных границ, и другие дефекты, связанные с особенностями литографического процесса, существенно ухудшающие эффективность процессов квазисинхронного нелинейного взаимодействия [3]. Как показано в [4] на примере ниобата лития, дифракция света на РДС в линейном режиме, реализуемая на возмущениях оптических свойств доменными стенками, является удобным неразрушающим методом контроля качества таких структур.

В настоящем сообщении представлены результаты реализации и исследования изотропной и анизотропной дифракции Брэгга различных порядков на РДС, сформированных методом переключения поляризации во внешнем пространственно-периодическом поле в кристаллах ниобата и танталата лития в компании Labfer LTD и предназначенных для квазисинхронной генерации второй гармоники, для накачки с длиной волны 1064 нм.

2. ПАРАМЕТРЫ РДС В ОБРАЗЦАХ НИОБАТА И ТАНТАЛАТА ЛИТИЯ

В экспериментах исследовались РДС, сформированные в двух образцах 5%MgO:LiNbO₃ конгруэнтного состава и в стехиометрическом кристалле 1%MgO:LiTaO₃. Первая РДС в образце ниобата лития с размерами 40×2×1 мм³ по осям X, Y и Z, имела пространственный период $\Lambda = 8.79$ мкм; вторая, с соответствующими размерами 9×2.5×1 мм³ – $\Lambda = 9.43$ мкм. РДС в танталате лития имела период $\Lambda = 7.99$ мкм и была создана в образце с размерами 5×2×1 мм³ по тем же кристаллофизическим осям. Методом дифракции Брэгга, подробно описанном в [5], было получено, что доменные стенки РДС с периодами 8.79 и 9.43 мкм в образцах ниобата лития имеют наклон к полярной оси, составляющий 0.31° и 0.36° соответственно, в то время как для РДС в танталате лития они являются ненаклонными.

3. ВЕКТОРНЫЕ ДИАГРАММЫ ДЛЯ ИЗОТРОПНОЙ И АНИЗОТРОПНОЙ ДИФРАКЦИИ БРЭГГА РАЗЛИЧНЫХ ПОРЯДКОВ

Для наблюдения дифракции Брэгга порядка $m = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ на доменных стенках Y-типа РДС в описанных выше образцах волновые векторы зондирующей и дифрагированной волн, k_i^m и k_d^m , должны быть ориентированы в плоскости XY и удовлетворять следующему условию синхронизма:

$$k_d^m = k_i^m + mK, \quad (1)$$

где вектор решетки РДС K направлен вдоль оси X и имеет длину $K = |K| = 2\pi/\Lambda$.

Соответствующая условию (1) векторная диаграмма изотропной дифракции на РДС для необыкновенных волн представлена на рис. 1.

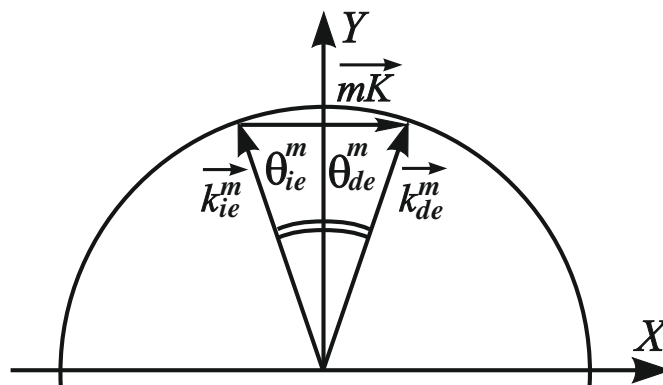


Рис.1 Векторная диаграмма изотропной дифракции порядка m для необыкновенных волн. \vec{k}_{ie}^m и \vec{k}_{de}^m – волновые векторы для падающей и

дифрагированной волн, \vec{K} – вектор решетки РДС, $\theta_{ie}^m = \theta_{de}^m$ – угол Брэгга внутри кристалла для зондирующей и дифрагированной волн

Анизотропная дифракция, соответствующая перераспределению мощности из зондирующего необыкновенного пучка в дифрагированный обыкновенный, характеризуется векторными диаграммами, представленными для РДС в кристаллах танталата и ниобата лития на рис. 2 и 3 соответственно.

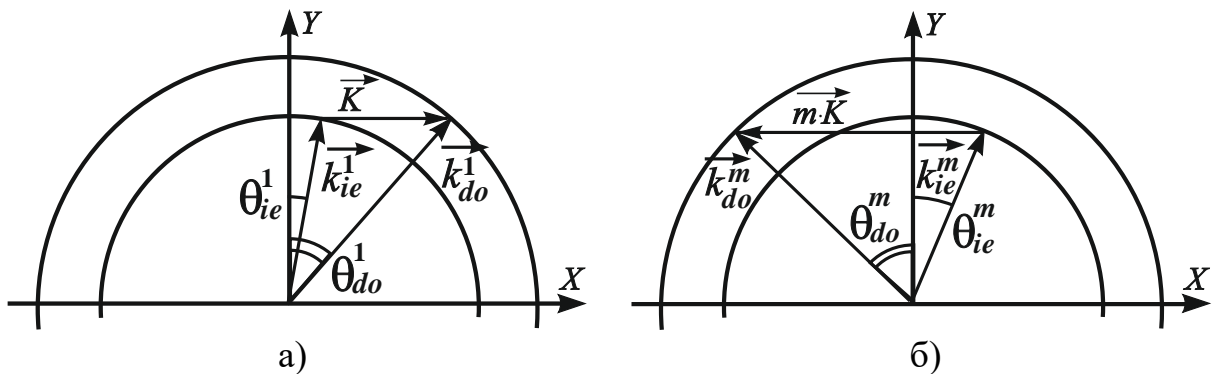


Рис.2 Векторная диаграмма анизотропной дифракции в танталате лития: а) дифракция первого порядка, $m = 1$; б) дифракция высших порядков, $|m| \geq 2$. \vec{k}_{ie}^m и \vec{k}_{do}^m – волновые векторы для зондирующей необыкновенной и дифрагированной обыкновенной волн, \vec{K} – вектор решетки РДС, $\theta_{ie}^m \neq \theta_{do}^m$ – углы между осью Y и соответствующими волновыми векторами внутри кристалла

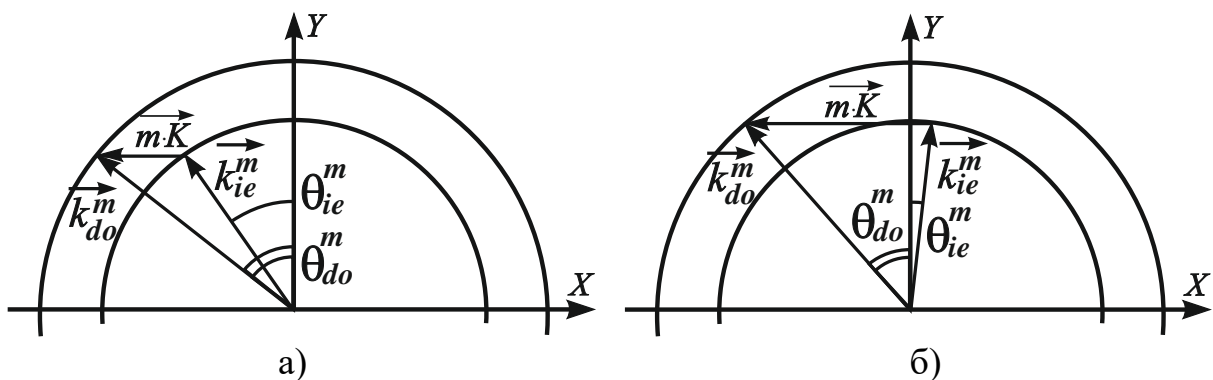


Рис.3 Векторная диаграмма анизотропной дифракции в ниобате лития: а) дифракция младших порядков; б) дифракция старших порядков. Обозначения для волновых векторов и углов $\theta_{ie}^m \neq \theta_{do}^m$ соответствуют рис. 2

Следует отметить, что вследствие малого двулучепреломления $\delta n = n_o - n_e$, в исследуемом кристалле танталата лития на длинах волн 532 и

632,8 нм на РДС с периодом $\Lambda = 7,99$ мкм реализуются два варианта анизотропной дифракции Брэгга, иллюстрируемые рис. 2.

4. МЕТОДИКА И РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА

Экспериментальные измерения эффективности изотропной и анизотропной дифракции Брэгга на исследуемых РДС проводились для света длиной волны $\lambda = 532$ нм и 633 нм на экспериментальных установках с использованием измерителя мощности «THORLABS-100D», схема которых изображена на рис. 4 и рис. 5, соответственно.

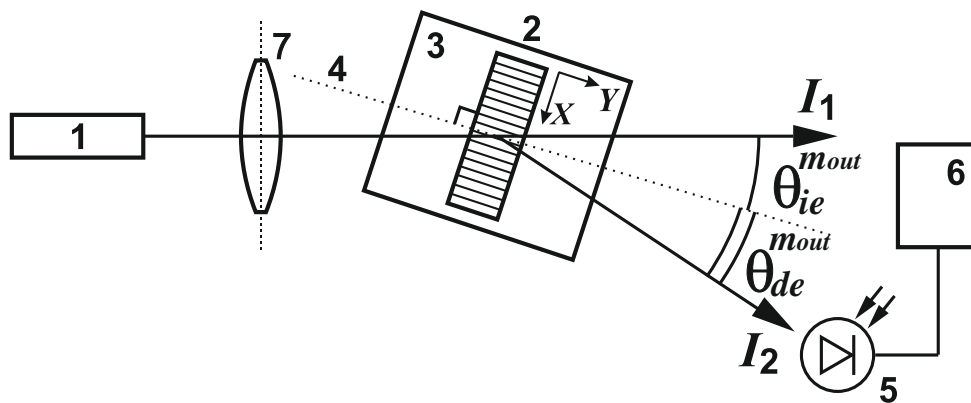


Рис. 4 Схема экспериментальной установки для исследования изотропной дифракции Брэгга: 1 – лазер с $\lambda_r = 632,8$ нм или $\lambda_g = 532$ нм; 2 – кристалл с РДС; 3 – поворотный столик; 4 – нормаль к входной грани, совпадающая с осью кристалла Y; 5 – фотоэлемент измерителя мощности THORLABS-100D; 6 – блок отображения мощности THORLABS-100D; 7 – положительная линза; I_1 – прошедший пучок; I_2 – дифрагированный пучок; $\theta_{ie}^{m_{out}}$ и $\theta_{de}^{m_{out}}$ – углы вне кристалла падающего и дифрагированного необыкновенных пучков относительно оси Y, m – порядок дифракции

Результаты измерения эффективности дифракции Брэгга для исследованных РДС, определяемой в процентах как $\eta_m = I_{2m} / (I_{1m} + I_{2m}) \cdot 100\%$, где I_m – интенсивности пучков при наблюдении m -го дифракционного порядка по схемам, показанным на рис. 4 и 5, представлены в таблице 1. Отметим, что на эффективность определяемой таким образом анизотропной дифракции оказывают влияние различия в коэффициентах пропускания на выходной грани для обыкновенного и необыкновенного лучей.

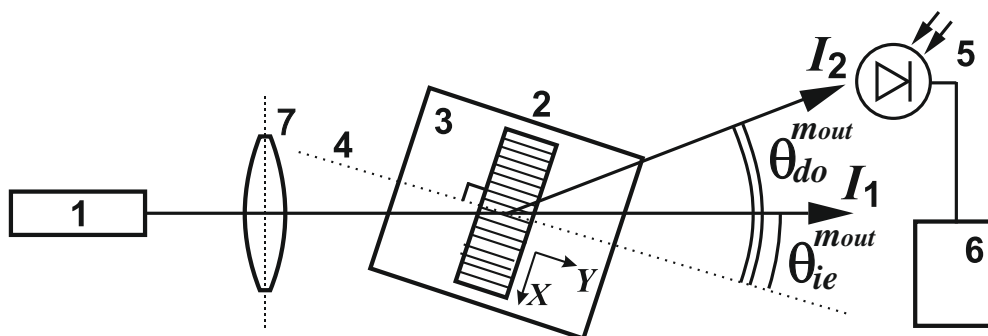


Рис. 5 Схема экспериментальной установки для исследования анизотропной дифракции: 1 – лазер с $\lambda_r = 632,8$ нм или $\lambda_g = 532$ нм; 2 - кристалл с РДС; 3 - поворотный столик; 4 – нормаль к входной грани, совпадающая с осью кристалла Y ; 5 - фотоэлемент измерителя мощности THORLABS-100D и 6 – блок отображения мощности THORLABS-100D; 7 – положительная линза; I_1 - зондирующий необыкновенный пучок; I_2 – дифрагированный обыкновенный пучок; $\theta_{ie}^{m_{out}}$ и $\theta_{do}^{m_{out}}$ – углы вне кристалла падающего необыкновенного и дифрагированного обыкновенного пучков относительно оси Y , m – порядок дифракции.

Таблица 1. Эффективность изотропной и анизотропной дифракции Брэгга на РДС в кристаллах 1%MgO:LiTaO₃ ($\Lambda = 7.99$ мкм), 5%MgO:LiNbO₃ ($\Lambda = 9.43$ мкм) и 5%MgO:LiNbO₃ ($\Lambda = 8.79$ мкм)

| | | | m | | | | | | | | | | | |
|--------------------------------|-------|----------------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| | Дифр | λ , нм | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
| LiTaO ₃ 7.99 мкм | Аниз | 532 | 0,330 | 0,398 | 0,198 | 0,043 | 0,153 | 0,071 | 0,038 | - | - | - | - | - |
| | | 633 | 0,403 | 0,457 | 0,272 | 0,023 | 0,065 | 0,008 | 0,011 | - | - | - | - | - |
| | Изотр | 532 | 1,521 | 3,076 | 2,332 | 0,369 | 1,039 | 0,162 | 0,428 | 0,109 | 0,213 | - | - | - |
| | | 633 | 1,19 | 1,804 | 1,889 | 0,144 | 0,779 | 0,097 | 0,278 | 0,086 | 0,098 | - | - | - |
| LiNbO ₃ 9.43 мкм | Аниз | 532 | - | - | - | - | 0,059 | 0,173 | 0,037 | 0,019 | 0,011 | 0,006 | 0,004 | 0,003 |
| | | 633 | - | - | - | 0,175 | 0,072 | 0,029 | 0,012 | 0,006 | 0,003 | 0,002 | - | - |
| | Изотр | 532 | 3,251 | 5,372 | 4,318 | 1,267 | 0,447 | 0,194 | 0,081 | 0,041 | - | - | - | - |
| | | 633 | 2,627 | 5,906 | 1,503 | 0,436 | 0,160 | 0,096 | 0,045 | 0,023 | 0,012 | - | - | - |
| LiNbO ₃ 8.79 мкм | Аниз | 532 | - | - | - | - | 0,159 | 0,094 | 0,044 | 0,021 | 0,010 | 0,006 | 0,004 | - |
| | | 633 | - | - | - | 0,149 | 0,097 | 0,053 | 0,025 | 0,012 | 0,007 | - | - | - |
| | Изотр | 532 | 8,840 | 3,087 | 3,822 | 2,530 | 1,251 | 0,547 | 0,308 | 0,188 | 0,098 | 0,055 | 0,032 | - |
| | | 633 | 5,533 | 2,409 | 2,389 | 1,564 | 0,762 | 0,411 | 0,242 | 0,129 | 0,070 | 0,035 | - | - |

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ полученных результатов показывает:

1. Знак угла отклонения дифрагированного пучка для порядка $m = 1$ от оси Y в кристалле танталата лития противоположен знаку отклонения для других порядков дифракции, $|m| \geq 2$.

2. Анизотропная дифракция на РДС в кристаллах ниобата лития наблюдается для порядков, начиная с пятого – для света с длиной волны $\lambda = 532$ нм, и с четвертого – для $\lambda = 633$ нм. В то же время, на РДС в кристалле танталата лития анизотропная дифракция наблюдается уже для первого порядка. Различия связаны со значительным двулучепреломлением $\delta n_{oe} = n_o - n_e$ в ниобате лития, по сравнению с существенно меньшим его значением для танталата лития. Полученные результаты качественно согласуются с данными [6], где были измерены эффективности изотропной и анизотропной дифракции на РДС с пространственным периодом $\Lambda = 8,79$ мкм, сформированной в кристалле 5%MgO:LiNbO₃, для лазерного излучения с $\lambda = 655$ нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Госзадания на 2020–2022 годы (задание FEWM-2020-0038/3).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. P. Ferraro, S. Grilli, P. DeNatale, *Ferroelectric Crystals for Photonic Applications* // Berlin-Heidelberg: Springer-Ferlag, 2009, 2014.
2. G. Catalan, J. Seidel, R. Ramesh, J.F. Scott. Domain wall nanoelectronics. *Rev. Mod. Phys.* 84:119-56
3. M.M. Fejer, G.A. Magel, D.H. Jundt, R.L. Byer, 1992. Quasi-Phase-Matched Second harmonic Generation: Tuning and Tolerances. *IEEE J. of Quantum Electronics.* n 28: 2631-2654
4. А.Л. Александровский, О.А. Глико, И.И. Наумова, В.И. Прялкин, Линейная и нелинейная дифракционные решетки в монокристаллах ниобата лития с периодической доменной структурой // *Квантовая электроника*. — 1996. — Том 23. — № 7. — С. 657–659.
5. Савченков, Е.Н. Дифракция света на регулярной доменной структуре с наклонными стенками в MgO: LiNbO₃ / Е.Н. Савченков, С.М. Шандаров, С.В. Смирнов, А.А. Есин, А.Р. Ахматханов, В.Я. Шур // *Письма в ЖЭТФ*. — 2019. — Том 110. — Вып. 3. — С. 165 – 169.
6. S.M. Shandarov, A.E. Mandel, T.M. Akylbaev, M.V. Borodin, E.N. Savchenkov, S.V. Smirnov, A.R. Akhmatkhanov and V.Y. Shur, Linear diffraction of light waves on periodically poled domain structures in lithium niobate crystals: collinear, isotropic, and anisotropic geometries // *J. Phys.: Conf. Series.* 2017. V. 867. P. 012017.

BRAGG DIFFRACTION OF LIGHT ON THE DOMAIN WALLS OF REGULAR DOMAIN STRUCTURES IN LITHIUM NIOBATE AND TANTALATE CRYSTALS

D.A. Gubinskaya¹, M.A. Fedyanina¹, E.N. Savchenkov¹

*Tomsk State University of Control Systems and Radioelectronics,
(Lenin Ave., 40, Tomsk, Russia, 634050)
e-mail: dgubinskaya@bk.ru*

The efficiency of isotropic and anisotropic Bragg diffraction of various orders on a regular domain structure in crystals of 5% MgO:LiNbO₃ and 1%MgO:LiTaO₃ has been experimentally measured.

Keywords: anisotropic diffraction, diffraction efficiency, regular domain structures, lithium niobate, lithium tantalate.

НЕЙРОСЕТЕВАЯ КЛАССИФИКАЦИЯ ДЕРМАТОСКОПИЧЕСКИХ ИЗОБРАЖЕНИЙ

В.А.Дерюгина¹, И.А.Матвеева¹

²*Самарский национальный исследовательский университет*

(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)

e-mail: latoryxx@gmail.com

Статья посвящена классификации дерматоскопических изображений новообразований кожи. Основной целью работы является выделение злокачественной опухоли меланомы среди других заболеваний кожи с помощью нейронных сетей. Для обучения использовался набор дерматоскопических снимков – НАМ10К, разделенных на злокачественные меланомы и немеланомы. Изображения второго набора были предварительно обработаны цветокоррекцией. Результаты обучения нейронной сети показывают, что этот подход может быть использован в медицинской диагностике для выявления злокачественных опухолей меланомы.

Ключевые слова: нейросеть, классификация, меланома, дерматоскопия, медицинская диагностика

1. ВВЕДЕНИЕ

Рак кожи является одним из наиболее часто диагностируемых злокачественных новообразований [1]. А злокачественная меланома (ЗМ) является одним из самых опасных видов рака. Хотя встречается реже, чем другие злокачественные поражения кожи, из-за высокой вероятности метастазирования смертность от меланомы составляет около 74%. Базально-клеточная карцинома составляет 75% немеланомных злокачественных новообразований [2].

Выявление заболевания на ранней стадии крайне важно, так как это позволяет повысить выживаемость [3]. При всех видах новообразований кожи основным диагностическим инструментом является визуальный осмотр дерматологом. Визуальный осмотр не является полностью достоверным, так как различные новообразования на ранних стадиях могут быть очень похожи по своему внешнему виду. Например, злокачественная

меланомы похожа на пигментированный невус, что значительно усложняет диагностику [3]. Поэтому необходимо искать новые объективные методы диагностики новообразований кожи. Одним из перспективных оптических методов диагностики кожных заболеваний является дерматоскопия. Тем не менее, анализ изображений по-прежнему является областью исследований [4]. В данной работе предлагается использовать нейронные сети для анализа дерматоскопических изображений.

В настоящее время применение данных технологий в различных отраслях жизни достаточно распространено. Нейронные сети получили широкое распространение в сфере медицинского диагностирования в области работы с изображениями. Это направление наиболее перспективно в скрининге патологий. Нейросетевой классификатор позволяет модернизировать обычные дерматоскопы, становясь экспертной системой при постановке диагноза для врачей.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Мы использовали два набора данных дерматоскопических изображений. Первый набор данных — это набор изображений HAM10k, который состоит из 1113 изображений меланом и 8902 изображений немеланом. Фактический диагноз был подтвержден гистопатологией или основан на консенсусе дерматологов.

Второй набор данных состоит из 112 изображений злокачественной меланомы и 689 изображений немеланомы (249 пигментных невусов, 177 кератозов, 175 базальноклеточных карцином, 74 папиллом, 14 сквамозноклеточных карцином). Фактический диагноз был подтвержден гистопатологией.

Изображения второго набора данных были получены с помощью прототипа дерматоскопического инструмента. Его оптический дизайн представлен на рис.1. Этот инструмент основан на цветной камере BASLER Ace 1920-25uc. Камера производит изображения 1920×1080 пикселей, представляющие собой мозаику Байера (GB) для поля зрения 25×14 мм на поверхности кожи. RGB-изображения строятся из мозаики с помощью линейной интерполяции [5].

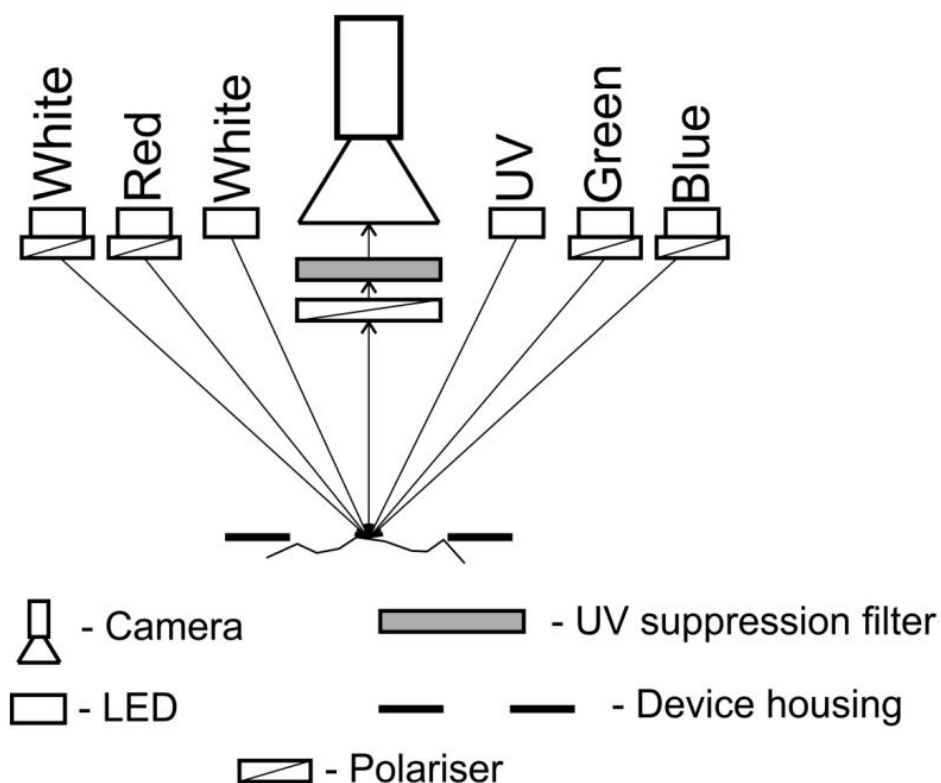


Рис.1. Оптическая схема прототипа дерматоскопического инструмента

Устройство использует несколько светодиодов для освещения участка кожи: 4 белых светодиода (2 из них закрыты поляризатором для визуализации более глубоких слоев кожи); светодиоды УФ диапазона (365 нм) для анализа автофлуоресценции кожи; три типа светодиодов видимого света для визуализации кожи в красном (620 нм), зеленом (530 нм) и синем (470 нм) диапазонах соответственно. Ультрафиолетовый диод выдает до 1 Вт в пределах 1100 телесного угла. Учитывая его размещение на расстоянии 75 мм от окна прибора, УФ-облучение кожи пациента составляет 130 Дж/м² за 1 с времени регистрации, что не превышает максимально допустимого облучения по стандарту ANSI. Все светодиоды видимого света излучают от 40 до 100 Лм, что приводит к облучению менее 1 Дж/м² при времени регистрации 0,1 с. Линейная поляризация используется для фильтрации света, непосредственно отраженного от поверхности кожи, так как это необходимо для визуализации более глубокой структуры эпидермиса и оценки поглощения света на различных длинах волн в видимом диапазоне [5]. Примеры изображений кожи, полученных с помощью описанного выше инструмента, представлены на рис.2(а).

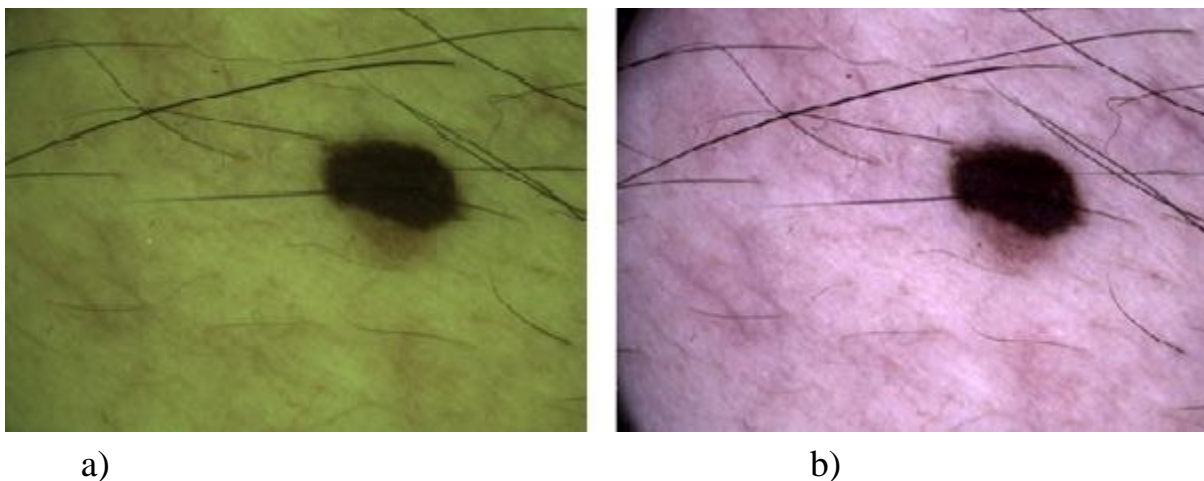


Рис.2. Изображения, сделанные с использованием поляризованного света: а) до цветокоррекции; б) после цветокоррекции

Необработанные изображения, полученные с помощью дерматоскопа, не подходят для использования в классификаторе вместе с первым набором данных, поскольку они имеют иное соотношение яркости, контрастности и баланса белого, чем первый набор данных. Поэтому изображения второго набора данных подвергались цветокоррекции и коррекции яркости. Цветокоррекция проводилась следующим образом:

$$R = 0,85 * R + 0,15 * (1,8 * B)$$

$$G = 0,75 * G$$

$$B = 1,8 * B$$

где R, G, B — обозначения красного, зеленого и синего цветовых каналов соответственно.

Пример предварительно обработанного изображения показан на рис. 2(б).

В данной работе использована архитектура сверточной нейронной сети Inception-V3. Модель Inception-V3 была выпущена в 2015 году, она имеет в общей сложности 42 слоя и более низкий коэффициент ошибок, чем ее предшественники. Inception-V3 более эффективны в вычислительном отношении, как с точки зрения количества параметров, генерируемых сетью, так и с точки зрения экономических затрат (память и другие ресурсы). В качестве языка программирования использовался Python.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Обучение и тестирование нейронной сети проводилось на компьютере, оснащённом процессором Intel(R) Core (TM) i7-10700KF 3,80 ГГц, видеокартой NVIDIA GeForce RTX 3080 и 32 ГБ оперативной памяти. На рисунке 3 показаны метрики обучения для первичной модели.

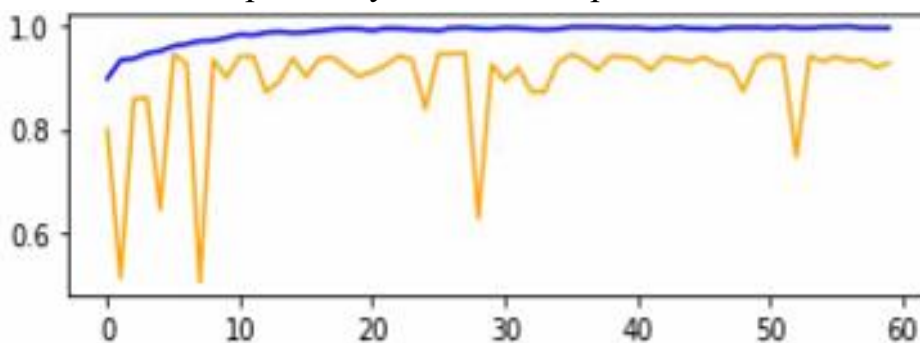


Рис.3. Классификационная точность модели (синий – обучающая выборка, желтый – тестовая выборка)

Как видно из рис. 3, точность классификации изображений набора данных НАМ10К составила более 90%. Продемонстрированная достаточно высокая точность разделения опухолей сопоставима с результатами других методов диагностики [4,5]. Использование алгоритма классификации дерматоскопических изображений на основе нейронных сетей позволит повысить точность определения кожных патологий по сравнению с другими методами классификации. Следующим этапом исследований является обучение и тестирование существующей нейронной сети на втором наборе данных, полученных при помощи прототипа дерматоскопического инструмента, с проведенной цветокоррекцией. Это позволит провести эксперимент, который покажет, действительно ли предварительная цветокоррекция данных необходима и влияет на результаты классификации. Также дальнейшие исследования будут посвящены оптимизации представленного классификатора нейронных сетей.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. World Health Organization. Cancer. URL: <https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/cancer> (request date 30.05.2022).
2. Tests for melanoma skin cancer. URL: <https://www.cancer.org/cancer/melanomaskin-cancer/detection-diagnosis-staging/how-diagnosed.html> (request date 30.05.2022).

3. R.J. Friedman, D.S. Rigel, A.W. Kopf, "Early detection of malignant melanoma: the role of physician examination and self-examination of the skin," *CA Cancer J Clin* 35(3), 1985, pp. 130-151
4. O.O. Myakinin, V.P. Zakharov, I.A. Bratchenko, D.N. Artemyev, E.Y. Neretin, S.V. Kozlov, "Dermoscopy analysis of RGB-images based on comparative features," *Applications of Digital Image Processing XXXVIII* 9599, 2015, pp. 694-700
5. S.G. Konovalov, O.A. Melsitov, O.O. Myakinin, I.A. Bratchenko, A.A. Moryatov, S.V. Kozlov, V.P. Zakharov, "Dermoscopy software tool for in vivo automatic malignant lesions detection," *J. of Biomedical Photonics & Engineering* 4(4), 2018, p. 040302.

NEURAL NETWORK CLASSIFICATION OF DERMATOLOGICAL IMAGES

V.A. Derugina¹, I.A. Matveeva¹

*²Samara National Research University,
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)
e-mail: latoryxx@gmail.com*

The paper concentrates on the classification of dermatoscopic images of skin neoplasms. The main purpose of the paper is to distinguish malignant melanoma tumor among other skin diseases using neural networks. For training, a set HAM10K of dermatoscopic images was used, divided into two classes: malignant melanoma and non-melanoma. Second set images were pre-processed by color correction. The findings suggest that this approach can be used in medical diagnostics to detect malignant melanoma tumors.

Keywords: neural network, classification, melanoma, dermatoscopy, medical diagnostics

ОСТРАЯ ФОКУСИРОВКА ПУЧКОВ СО СМЕШАННОЙ ВЕКТОРНО-КРУГОВОЙ ПОЛЯРИЗАЦИЕЙ

Е.А. Долгова¹

¹*Самарский национальный исследовательский университет имени
академика С.П. Королёва
(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)
e-mail: liza.dolgova2002@mail.ru*

В данной работе рассмотрена острая фокусировка гибридного векторного пучка, сочетающего в себе свойства цилиндрического векторного пучка высокого порядка с пучком с круговой поляризацией. Показано, что в фокусе образуется распределение интенсивности в виде неравномерного кольца — если порядок пучка равен m , то в фокусе интенсивность имеет $2(m + 1)$ локальных максимумов.

Ключевые слова: острая фокусировка, гибридная поляризация, интеграл Ричардса-Вольфа.

1. ВВЕДЕНИЕ

Большое распространение в настоящее время получило изучение гибридных векторных пучков [1-7] – пучков, в которых периодически меняется не только направление поляризации, но и фаза. При этом может меняться как фаза волнового фронта пучка [8,9], так и разница фаз между компонентами вектора напряженности электрического поля в разложении по базису декартовой или цилиндрической системы координат, ось z которой направлена вдоль оси распространения пучка [4].

В работах, посвященных моделированию острой фокусировки света в дальней зоне, обычно используются формулы Ричардса-Вольфа [8], так как они позволяют вычислить распределение отдельных составляющих вектора напряженности электрической компоненты светового поля в координатах выходного зрачка.

В работе численно показано, что векторный пучок m -го порядка, сочетающий в себе свойства цилиндрического векторного пучка высокого порядка с пучком с круговой поляризацией, в фокусе образует распределение интенсивности в виде неравномерного кольца — если

порядок пучка равен m , то в фокусе интенсивность имеет $2(m + 1)$ локальных максимумов.

2. МОДЕЛИРОВАНИЕ

Мы исследуем фокусировку пучка со смешанной круговой-цилиндрической поляризацией m -го порядка с вектором Джонса:

$$\begin{aligned} a(\varphi) &= -i \sin(m\varphi) \\ b(\varphi) &= \cos(m\varphi) \end{aligned} \quad (1)$$

где φ — азимутальный угол, m — порядок пучка. Такое состояние поляризации представляет собой гибрид векторных пучков и пучков с круговой поляризацией. При $m\varphi = \pi/2$ поляризация линейная, а при $m\varphi = \pi/4$ — круговая, другие углы соответствуют эллиптической поляризации. Получить такой пучок можно с помощью четвертьволновой и векторной волновых пластинок [10]. Моделирование осуществлялось с помощью формул Ричардса-Вольфа:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\rho, \psi, z) &= -\frac{if}{\lambda} \int_0^{\theta_0} \int_0^{2\pi} B(\theta, \varphi) T(\theta) \mathbf{P}(\theta, \varphi) \times \\ &\times \exp\{ik[\rho \sin \theta \cos(\varphi - \psi) + z \cos \theta]\} \sin \theta d\theta d\varphi, \end{aligned} \quad (2)$$

где $\mathbf{E}(\rho, \psi, z)$ — напряжённость электрического поля в фокусе, $B(\theta, \varphi)$ — амплитуда электрического поля в выходном зрачке широкоапертурной оптической системы (θ — полярный угол, φ — азимутальный), $T(\theta)$ — функция аподизации линзы, f — фокусное расстояние, $k = 2\pi/\lambda$ — волновое число, λ — длина волны (в моделировании считалась равной 633 нм), θ_0 — максимальный полярный угол, определяемый числовой апертурой линзы ($NA = \sin \theta_0$), $\mathbf{P}(\theta, \varphi)$ — вектор поляризации, для напряжённости электрического поля имеющий вид:

$$\mathbf{P}(\theta, \varphi) = \begin{bmatrix} 1 + \cos^2 \varphi (\cos \theta - 1) \\ \sin \varphi \cos \varphi (\cos \theta - 1) \\ -\sin \theta \cos \varphi \end{bmatrix} a(\theta, \varphi) + \begin{bmatrix} \sin \varphi \cos \varphi (\cos \theta - 1) \\ 1 + \sin^2 \varphi (\cos \theta - 1) \\ -\sin \theta \sin \varphi \end{bmatrix} b(\theta, \varphi), \quad (3)$$

где $a(\theta, \varphi)$ и $b(\theta, \varphi)$ — функции, описывающие состояние поляризации x - и y -компонент напряжённостей фокусируемого пучка (1).

На рисунке 1 показаны распределения полной интенсивности I (а) и её отдельных составляющих $I_x = |E_x|^2$ (б), $I_y = |E_y|^2$ (в), $I_z = |E_z|^2$ (г) в фокальной плоскости при фокусировке плоской волны с гибридной поляризацией с $m=1$ плоской дифракционной линзой с числовой апертурой $NA = \sin(\theta_{\max}) = 0,95$. На рисунках 2, 3, 4 показаны распределения для $m = 2, 3, 4$ соответственно.

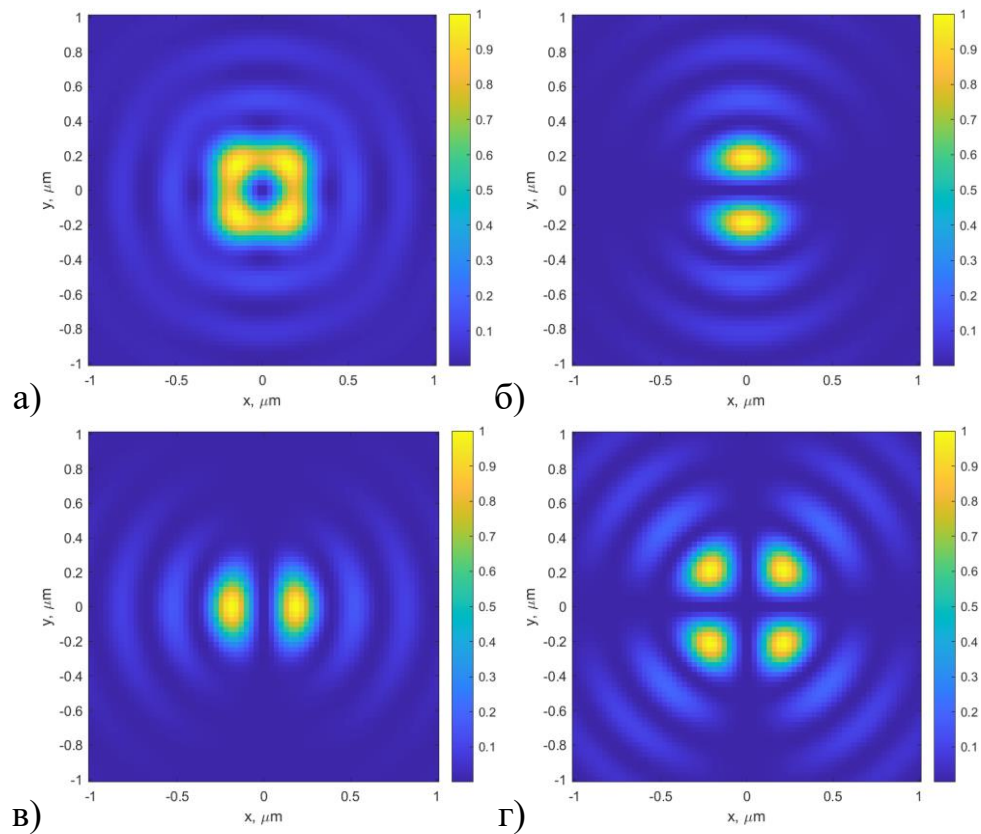


Рис. 1. Распределения а) полной интенсивности I и её отдельных составляющих б) I_x , в) I_y , г) I_z для порядка $m = 1$

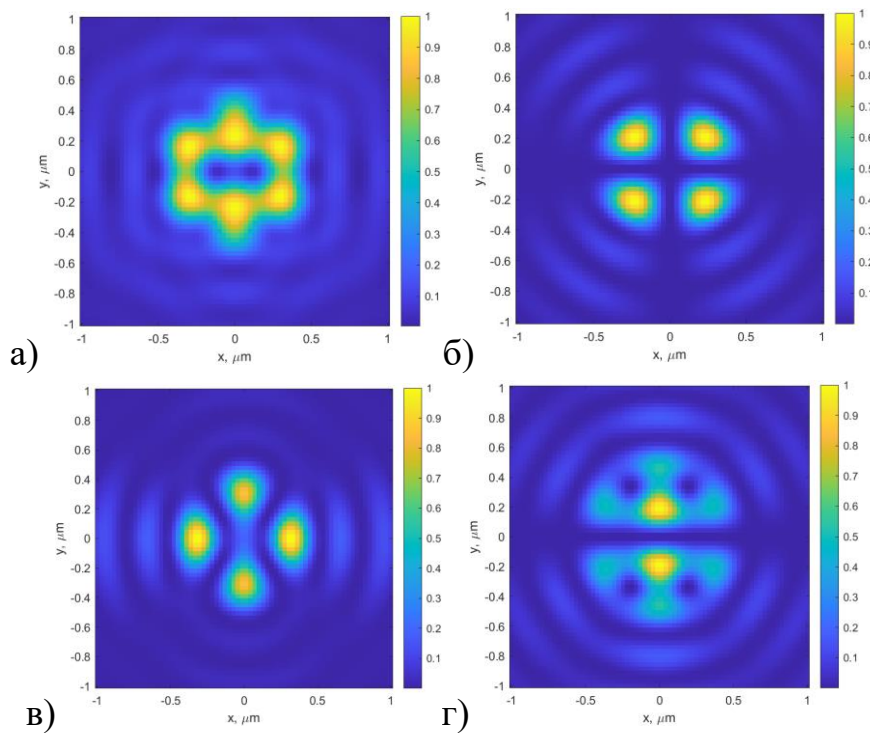


Рис. 2. Распределения а) полной интенсивности I и её отдельных составляющих б) I_x , в) I_y , г) I_z для порядка $t = 2$

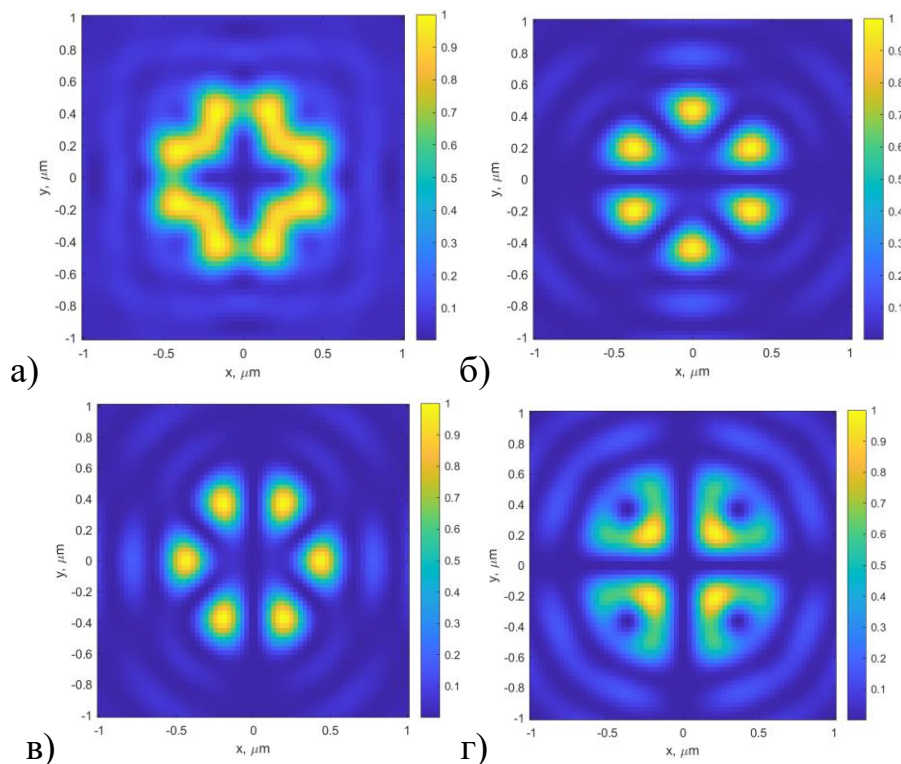


Рис. 3. Распределения а) полной интенсивности I и её отдельных составляющих б) I_x , в) I_y , г) I_z для порядка $t = 3$

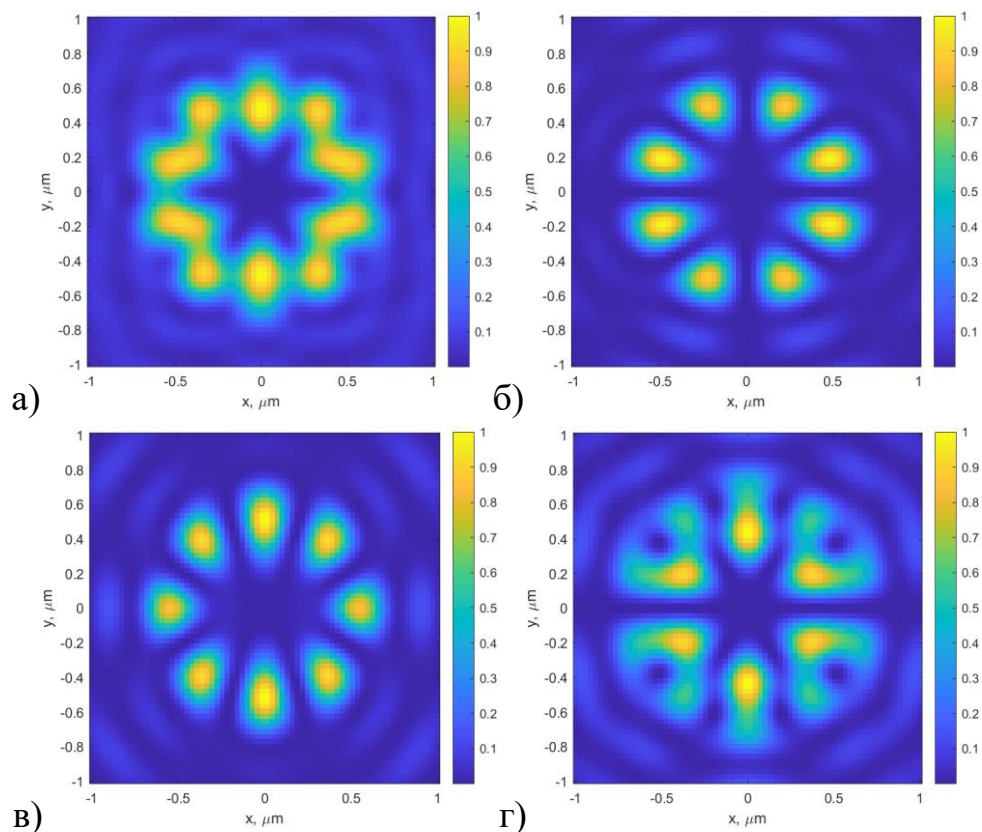


Рис. 4. Распределения а) полной интенсивности I и её отдельных составляющих б) I_x , в) I_y , г) I_z для порядка $m = 4$

Моделирование показало, что в фокусе интенсивность имеет $2(m + 1)$ локальных максимумов, в центре фокального пятна наблюдается нулевая интенсивность. Также видно, что составляющие I_x , I_y имеют $2m$ локальных максимумов, а I_z имеют форму кольца и нулевое значение в центре.

Стоит отметить, что при смене знака порядка m , знак меняется только у функции поляризации для x — компоненты вектора Джонса, а так как она умножается на мнимую единицу, то получается эквивалент смены направления поляризации (замена i на $-i$ или правой на левую поляризацию). Т.е в тех секторах, где поляризация была круговая, она так и осталась круговой, но со сменой направления по всему профилю пучка, и на интенсивности это никак не сказалось.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе с помощью формул Ричардса-Вольфа рассмотрена острая фокусировка гибридного векторного пучка, сочетающего в себе свойства цилиндрического векторного пучка высокого порядка с пучком

с круговой поляризацией. Показано, что в фокусе образуется распределение интенсивности в виде неравномерного кольца — если порядок пучка равен m , то в фокусе интенсивность имеет $2(m + 1)$ локальных максимумов. При этом распределение интенсивности для отрицательных порядков совпадает с распределением интенсивности для положительных порядков.

Также отмечено, что при отрицательных значениях порядка пучка m , распределения интенсивности полностью совпадают с их положительными эквивалентами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. D'Errico, A. Topological features of vector vortex beams perturbed with uniformly polarized light / A. D'Errico, M. Maffei, B. Piccirillo, C. de Lisio, F. Cardano, L. Marrucci // *Scientific Reports*. – 2017. – Vol. 7(1). – P. 40195.
2. Gao, X.-Z. Redistributing the energy flow of tightly focused ellipticity-variant vector optical fields / X.-Z. Gao, Y. Pan, G.-L. Zhang, M.-D. Zhao, Z.-C. Ren, C.-G. Tu, Y.-N. Li, H.-T. Wang // *Photonics Res*. – 2017. – Vol. 5. – P. 640.
3. Wang, X.L. A new type of vector fields with hybrid states of polarization / X.L. Wang, Y.N. Li, J. Chen, C.S. Guo, J.P. Ding, H.T. Wang // *Opt Express*. – 2010. – Vol. 18. – P. 10786-10795.
4. Hu, K. Tight focusing properties of hybridly polarized vector beams / K. Hu, Z. Chen, J. Pu // *J Opt Soc Am A*. – 2012. – Vol. 29. – P. 1099-1104.
5. Lerman, G.M. Generation and tight focusing of hybridly polarized vector beams / G.M. Lerman, L. Stern, U. Levy. – *Opt Express*. – 2010. – Vol. 18. – P. 27650-27657.
6. Hu, H. The tight focusing properties of spatial hybrid polarization vector beam / H. Hu, P. Xiao // *Optik*. – 2013. – Vol. 124. – P. 2406-2410.
7. Khonina, S.N. Vortex beams with high-order cylindrical polarization: features of focal distributions // *Appl Phys B*. – 2019. – Vol. 125. – P. 100.
8. Richards, B. Electromagnetic diffraction in optical systems II. Structure of the image field in an aplanatic system / B. Richards, E. Wolf // *Proceedings of the Royal Society of London*. – 1959. – Vol. 253. – P. 358-379.
9. Debay, P. Das Verhalten von Lichtwellen in der Nähe eines Brennpunktes oder einer Brennlinie / P. Debay // *Annalen der Physik*. – 1909. – Vol. 335, N 14. – P. 755-776.

10. Kotlyar, V.V. Spin-Orbital Conversion of a Strongly Focused Light Wave with High-Order Cylindrical–Circular Polarization / V.V. Kotlyar, S.S. Stafeev, E.S. Kozlova, A.G. Nalimov // Sensors. – 2021. – Vol. 21. – P. 6424.

TIGHT FOCUSING OF BEAMS WITH MIXED VECTOR-CIRCULAR POLARIZATION

E.A. Dolgova¹

*¹Samara National Research University
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)
e-mail: liza.dolgova2002@mail.ru*

This paper considers the sharp focusing of a hybrid vector beam, which combines the properties of a high order cylindrical vector beam with a beam with circular polarization. It is shown that in the focus the intensity distribution is formed in the form of a nonuniform ring - if the beam order is m , then in the focus the intensity has $2(m + 1)$ local maxima.

Keywords: tight focusing, hybrid polarization, Richards–Wolf integral.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНО-УСИЛЕННОГО РАМАНОВСКОГО РАССЕЙНИЯ ПЛАЗМЫ КРОВИ

В.В. Евстифорова, А.А. Шацкая, Л.А. Братченко, Д.Н. Артемьев

Самарский национальный исследовательский университет,

(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)

e-mail: evst5377@gmail.com

Эндометриоз — заболевание, при котором происходит разрастание клеток эндометрия за пределы основного слоя ткани. Отслеживание симптомов недостаточно для диагностики данного заболевания, а успешный диагноз может быть поставлен только с помощью лапароскопии.

Рамановская спектроскопия используется в качестве неинвазивного метода диагностики эндометриоза. Во время заболевания количество молекул (например, белков, антигенов) в крови изменяется. Метод рамановской спектроскопии позволяет отслеживать изменение состава плазмы.

В данной работе были исследованы спектры плазмы крови для классов контроля, полипов и гиперплазии. Был использован метод дискриминантного анализа (PLS-DA) и алгоритмы классификации, что позволило обнаружить спектральные особенности для каждого класса.

Ключевые слова: плазма крови, полип, гиперплазия, поверхностно-усиленная рамановской спектроскопия, метод дискриминантного анализа.

1. ВВЕДЕНИЕ

Рамановская спектроскопия исследует явление неупругого рассеяния света, которое возникает в результате взаимодействия света с веществом. Электроны образца сначала возбуждаются до состояния виртуальной энергии, а затем возвращаются к своему первоначальному энергетическому уровню либо теряя, либо приобретая энергию. Генерируемый сдвиг энергии характерен для конкретных биомолекул, таких как белков, липидов и нуклеиновых кислот, предоставляя информацию для биологического образца. Комбинационное рассеяние по своей природе является слабым, поэтому был применен метод поверхностно-усиленной рамановской

спектроскопии. Поверхностно-усиленная рамановская спектроскопия (SERS) является одним из широко применяемых методов, в котором используются металлические поверхности или наноструктуры (например, наночастицы серебра или золота) для усиления сигнала комбинационного рассеяния в 10^3 - 10^{10} раз. SERS использует усиление электромагнитного поля, вызванное колебаниями поверхностных электронов, называемых поверхностными плазмонами, что позволяет обнаруживать молекулы при низких концентрациях. Основной целью было исследование поверхностно-усиленного рамановского рассеяния плазмы крови для оценки точности диагностики эндометриоза [1].

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Регистрацию и анализ результатов поверхностно-усиленного рамановского рассеяния осуществляли с использованием коллоидных серебряных наночастиц и микроскопической системы. Исследование микрорамановских спектральных характеристик с поверхностным усилением для образцов плазмы. Анализ спектральных характеристик анализируемой коллоидной среды проводили на экспериментальном стенде, состоящем из спектрометрической системы (EnSpectr R785, Spektr-M, Черноголовка, Россия) на основе ПЗС-детектора и микроскопа (ADF U300, ADF, Китай). Спектры возбуждались в ближнем ИК диапазоне с помощью лазерного модуля с центральной длиной волны 785 нм. Объектив LMPlan с увеличением 50x использовался для фокусировки излучения на образце и сбора рассеянного излучения. Диаметр лазерного пятна в фокусе составлял 5 мкм. Спектры регистрировали в спектральном диапазоне 380-1800 см^{-1} со спектральным разрешением 4- 9 см^{-1} . Предел допускаемого относительного среднего квадратического отклонения измерения волновых числе не более 1%. Используемая спектрометрическая система характеризуется отсутствием внешнего охлаждения. Мощность лазера составляла 10 мВт для метода поверхностно-усиленной рамановской спектроскопии. Время экспозиции составило 2 сек. x 10 раз для метода поверхностно-усиленной рамановской спектроскопии. Полученный необработанный спектр для каждого образца представляет собой автоматическую последовательную запись трех спектров. Регистрация спектров осуществляется с помощью программы EnSpectr («Spektr-M»),

Черноголовка, Россия). Непосредственно перед регистрацией спектральных характеристик исследуемого образца сыворотки производилась предварительная запись окружающего фонового сигнала. После этого фоновая составляющая автоматически вычиталась из последующих регистрируемых спектров образца по алгоритму, встроенному в программу EnSpectr.

В качестве материала субстрата для достижения поверхностного усиления рамановского сигнала плазмы использован серебряный субстрат на основе высушенного коллоида серебра. Коллоид серебра получали восстановлением из водного раствора нитрата серебра цитратом натрия при температуре 95 °С в течение 20 минут. Спектр поглощения полученного коллоидного раствора серебра демонстрирует максимум поглощения при 410 нм с полной шириной на полувысоте 40 нм, что, согласно ряду экспериментальных исследований зависимости спектра поглощения от геометрических характеристик наночастиц серебра, соответствует сферическим наночастицам диаметром 30-40 нм. Для формирования более сложных и крупных структур, полученный коллоидный раствор объемом 20 мл выливали на алюминиевую фольгу площадью 75 мм x 25 мм и сушили при комнатной температуре до полного высыхания. В результате высыхания на фольге формируются агломераты серебряных частиц с кристаллами нитрата натрия объемной концентрации 0,02%. Кристаллы нитрата натрия обеспечивают возникновение капиллярного эффекта. Полученный субстрат представляет собой агломераты сферических частиц размером около 200 нм.

Полученные данные, будучи по своей сути многомерными и многопараметрными, анализировали с использованием метода дискриминантного анализа посредством проекции на латентные структуры (PLS-DA). Суть метода состояла в том, что дискриминационные правила для классов были заданы линейными регрессионными уравнениями. Каждому образцу плазмы соответствует априорная информация о принадлежности к определенной группе. Таким образом, данные были проанализированы посредством обучения с учителем. Во избежание переобучения, оценка устойчивости метода анализа экспериментальных данных и выбор оптимальных параметров были реализованы на основе k-кратной кросс-валидации ($k = 7$). Кросс-валидация является широко

используемым методом для оценки качества модели при анализе спектральных данных. Общая процедура заключается в разделении данных на подмножества для обучения и тестирования. Обучение — это процесс подбора модели, а тестирование — это процесс проверки подобранной модели путем измерения ошибки прогноза. Обучающий и тестовый наборы не пересекаются, поэтому данные тестирования для оценки модели не используются при подборе модели. На основе регистрируемых волновых характеристик интенсивности Рамановских спектров составляли матрицу, где каждому образцу присваивали значение 1, 2 или 3, в зависимости от принадлежности классу контроля (1), гиперплазии (2) или полипа (3). Объем исходных выборок составил 21 спектр в группе контроля, 30 спектров в группе гиперплазии и 93 спектра в группе полипа. Во избежание переоценки какой-либо из исследуемых групп моделью необходимо обеспечить анализ равнообъемных выборок. Для этого из общего набора данных случайным образом отбиралось по 21 спектру для каждой анализируемой группы. На основе отобранных данных строилась классификационная модель. Процесс отбора равнообъемных выборок с последующим построением модели таким образом повторялся 5 раз. Итоговая характеристика классификации получена на основе усреднения результатов по 5 построенным моделям. Классификационную задачу также решали с использованием метода проекций на латентные структуры, что позволило в дальнейшем предсказывать появление и принадлежность новых образцов. Также PLS-DA позволил выявить спектральные особенности классов, связанных с наличием соединений и молекул, определяемых в качестве маркеров заболеваний эндометрия. Перед применением метода PLS-DA регистрируемые данные были избавлены от шума методом Савицкого-Голея [2], а от фонового излучения – коррекцией опорной и базовой линий с использованием метода ассиметричных наименьших квадратов (Baseline Correction with Asymmetric Least Squares – baseline ALS [3]. Все методы предобработки и многомерный анализ были реализованы программно в обеспечении R. Определение принадлежности Рамановских пиков к определенным классам веществ выполняли с помощью базы данных Рамановских спектров биологических тканей.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

В данной работе был проведен анализ повторяемости результатов для спектров с вычтенным фоном от образца плазмы крови. Анализируемый образец исследовали 10 раз в разных положениях с одинаковым фокусным расстоянием. В результате был приведен усредненный спектр и среднеквадратичное отклонение для оценки разброса значений. Таким образом, разброс спектральных характеристик исследуемого образца для поверхностно-усиленного рамановского сигнала в полосах 1004 см^{-1} и 1392 см^{-1} составил 10% и 6% соответственно.

В ходе исследования были получены следующие спектральные картины для контрольной группы и групп с полипом и гиперплазией:

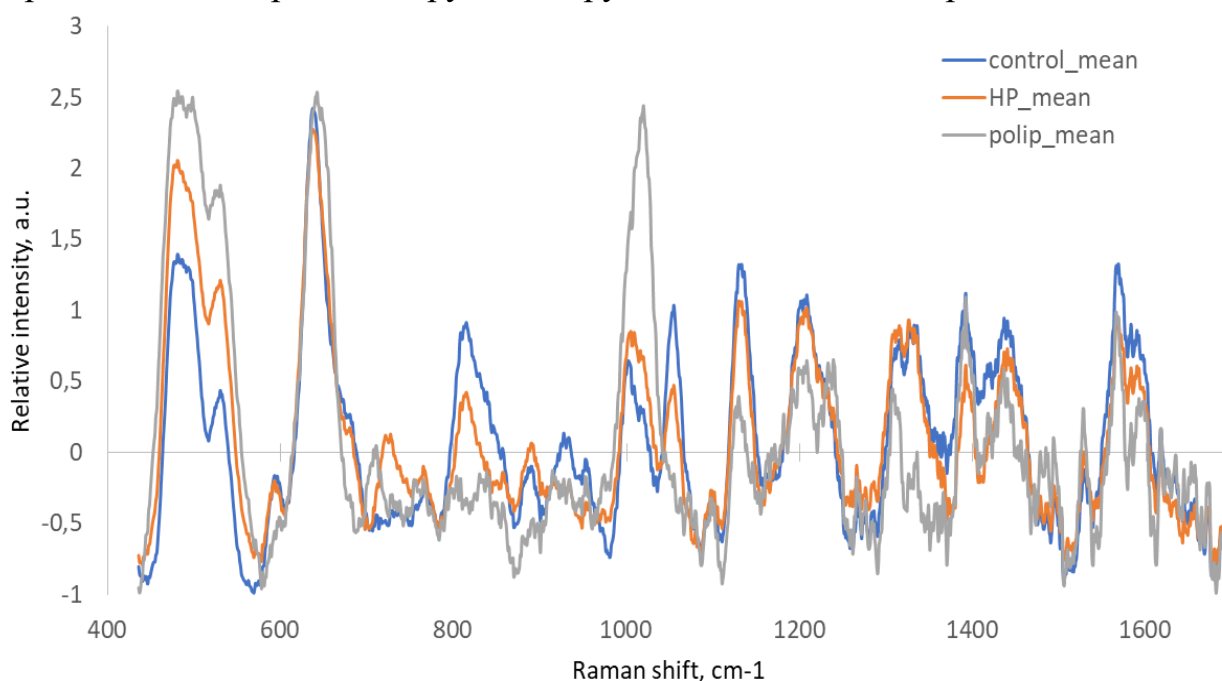


Рис. 2. Усредненные обработанные спектры поверхностно усиленного Рамановского рассеяния плазмы крови от образцов с полипом, гиперплазией в сравнении с контрольной группой

Исследуя регистрируемые усредненные спектры поверхностно усиленного Рамановского рассеяния плазмы крови. Рассмотрим для исследуемых групп полосы с одинаковым положение пиков, таким полосам соответствуют: 484 см^{-1} (гликоген); 596 см^{-1} (фосфатидилинозитол); 640 см^{-1} (C-S растяжение и C-C скручивание в тирозине); 726 см^{-1} (C-S в белке, CH_2 , аденин); 766 см^{-1} (сжатие пиримидинового кольца); 815 см^{-1} (пролин, гидроксипролин, тирозин, растяжение PO_2 в нуклеиновых кислотах); 891 см^{-1} (сахарид); 933

cm^{-1} (пролин, гидроксипролин); 956 cm^{-1} и 1527 cm^{-1} (каротиноид); 1099 cm^{-1} (C-N растяжение); 1208 cm^{-1} , 1265 cm^{-1} и 1276 cm^{-1} (амид III); 1314 cm^{-1} (CH₃ CH₂ скручивание в коллагене); 1477 cm^{-1} (дизоксирибоза); 1617 cm^{-1} (фенилаланин, тирозин). Теперь рассмотрим общие полосы для групп с полипом и гиперплазией: 858 cm^{-1} (тирозин, коллаген); 917 cm^{-1} и 974 cm^{-1} (вибрация рибозы); 1080 cm^{-1} (фосфатные колебания (фосфодиэфирные группы в нуклеиновых кислотах) [4]. Полоса на 1242 cm^{-1} принадлежит группе с полипами, она характерна колебанию амида III, для двух остальных групп полоса отсутствует. Полоса 1418 cm^{-1} - колебание CH₂ [5] в липидах характерна для группы с полипами, для контрольной группы смещена в полосу 1416 cm^{-1} , а для группы с гиперплазией отсутствует. Исследуемые группы можно также обнаружить не только по смещению полос, но и по интенсивности, наиболее показательными стали полосы на 465 cm^{-1} , 536 cm^{-1} , 816 cm^{-1} , 996 cm^{-1} , 1055 cm^{-1} , 1132 cm^{-1} и 1208 cm^{-1} .

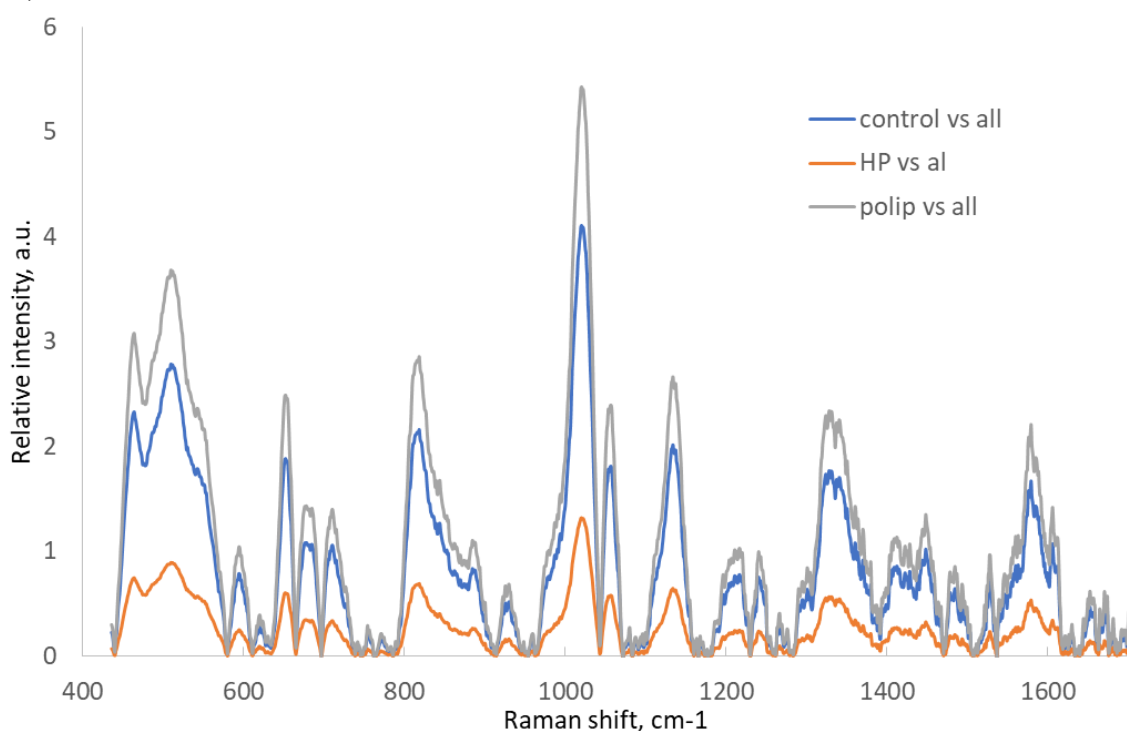


Рис. 3. Распределение важности переменных поверхностно-усиленных рамановских спектров сыворотки в классификации образцов по патолого-ассоциированному признаку при реализации методов анализа экспериментальных данных на основе PLS-DA

Распределение важности переменных поверхностно-усиленных рамановских спектров сыворотки в классификации образцов по патолого-

ассоциированному признаку представляет возможность разделить группы по наиболее значащим полосам. Изменение интенсивности на полосе 1018 см⁻¹ имеет наибольший вес для выделения класса полипов, а изменение интенсивности на полосе 917 см⁻¹ позволяет уже с меньшей достоверностью выделить данный класс.

В результате построения аналитической модели с помощью метода PLS-DA, точность разделения Рамановских спектров полипа относительно контрольной группы и гиперплазии для калибровочного и проверочного набора достигает 83% и 81%, соответственно. Близкие значения говорят о хорошей устойчивости математической модели. При этом чувствительность и специфичность метода для проверочного набора составляют 62% и 91%, соответственно. Также были рассчитаны значения точности выделения контрольной группы относительно гиперплазии и полипа – 64-71% и гиперплазии относительно полипа и контроля 64-67%. При этом точность в первую очередь достигается за счет высоких значений специфичности. Стоит отметить, что это предварительные исследования, которые показывают возможность обнаружения заболеваний и потенциал метода SERS для диагностики конкретных типов заболеваний.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработка неинвазивного метода лечения эндометриоза является сложной задачей и в настоящее время находится в стадии изучения. Лапароскопия - самый безопасный способ диагностики эндометриоза, но это инвазивный метод, требующий хирургического вмешательства. Вместо этого неинвазивный метод был бы более экономичным и удобным для пациента при диагностике эндометриоза. Метод рамановской спектроскопии вместе с PLS-DA и алгоритмами классификации может быть решением в качестве неинвазивного метода диагностики эндометриоза, за счет простого взятия биоматериала и высокой точности выделения контрольной группы.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при поддержке министерства науки и высшего образования Российской Федерации в форме гранта на проведение фундаментальных и прикладных научных исследований по приоритетным

направлениям развития науки, технологий и техники Российской Федерации, для материальной поддержки молодых российских ученых - кандидатов наук и докторов наук в целях реализации Указа Президента Российской Федерации от 09.02.2009 № 146 «О мерах по усилению государственной поддержки молодых российских ученых - кандидатов и докторов наук» (гранты Президента Российской Федерации), соглашение № 075-15-2022-767 от 12 мая 2022 г. (МК-5445.2022.1.2).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ugur Parlatan, Medine Tuna Inanc , Bahar Yuksel Ozgor, Engin Oral , Ercan Bastu, Mehmet Burcin Unlu, Gunay Basar, Raman spectroscopy as a non-invasive diagnostic technique for endometriosis// Scientific Reports 9(1), December 2019
2. Savitzky A., Golay M. Analytical chemistry.36. 1964. P. 1627
3. Baek S-J., Park A., Ahn Y-J./ Choo J. Baseline correction using asymmetrically reweighted penalized least squares smoothing // The Analyst. 140 (1). 2015. P. 250 – 257
4. Movasaghi Z.; Rehman S.; Rehman I. Raman Spectroscopy of Biological Tissues. Applied Spectroscopy Reviews. 2007, 42(5):493-541
5. Paraskevaidi, Maria, Ashton, Katherine M, Stringfellow, Helen F, Wood, Nicholas J, Keating, Patrick J, Rowbottom, Anthony W, Martin-Hirsch, Pierre L and Martin, Francis L, Raman spectroscopic techniques to detect ovarian cancer biomarkers in blood plasma. Talanta, 189. pp. 281-288.

INVESTIGATION OF SURFACE-ENHANCED RAMAN SCATTERING OF BLOOD PLASMA

V.V. Evstiforova, A.A. Shatskaya, L.A. Bratchenko, D.N. Artemyev

Samara National Research University,

(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)

e-mail evst5377@gmail.com

Endometriosis is a disease in which endometrial cells grow beyond the main tissue layer. Tracking symptoms is not enough to diagnose this disease, and a successful diagnosis can only be made using laparoscopy.

Raman spectroscopy is used as a non-invasive method for diagnosing endometriosis. During the disease, the number of molecules (for example, proteins, antigens) in the blood changes. The method of Raman spectroscopy allows you to track changes in the composition of the plasma.

In this study, blood plasma spectra were studied for control classes, polyps and hyperplasia. The discriminant analysis method (PLS-DA) and classification algorithms were used, which made it possible to detect spectral features for each class.

Keywords: blood plasma, polyp, hyperplasia, surface-enhanced Raman spectroscopy, discriminant analysis method.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ ГЕТЕРОСТРУКТУР КАРБИД КРЕМНИЙ НА ПОРИСТОМ КРЕМНИИ

Д.А. Жигаев, Д.А. Шишкина, И.А. Шишкин, В.С. Хоробров

*Самарский национальный исследовательский университет,
(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)
e-mail: stalker@sys.net.ru*

В данной работе показана физико-математическая модель создания карбида кремния с помощью метода высокотемпературной газофазного осаждения. Результаты моделирования были сравнены с экспериментом, где было получено хорошее согласие. Результаты моделирования могут быть использованы для уточнения технологической карты создания покрытий карбида кремния методом HTCVD.

Ключевые слова: математическое моделирование, карбид кремния, HTCVD, COMSOL Multiphysics.

1. ВВЕДЕНИЕ

Несмотря на то, что исследования в сфере интерференционных оптических покрытий ведутся не первый десяток лет, они и по сей день не теряют своей актуальности. Очевидно, что преобразование микроэлектроники в наноэлектронику во многом произошло благодаря развитию оптоэлектронной отрасли. Широко используемые ранее устройства интегральной микроэлектроники сменяются интегральными приборами, в которых вместо электрического сигнала обрабатывается оптический. Наиболее явно эта особенность проявляется при конструировании систем связи, а также в исследованиях по возможным реализациям конструкций фотонных вычислителей. Таким образом, нельзя не отметить важность и актуальность так называемых оптоэлектрических пассивных элементов, которыми и являются оптические покрытия.

Интерференционные покрытия позволяют наделять поверхность, на которую они наносятся, такими свойствами, как высокий коэффициент отражения, повышенные пропускание и контрастность, возможность

изменения поляризации излучения, а также способность спектрально и энергетически разделять и складывать оптические сигналы и хроматически их корректировать. В настоящее время так же начали уделять особое внимание к оптическим покрытиям, которые обладают радиационной стойкостью и временной стабильностью. Одним из таких покрытий является карбид кремния.

Данное покрытие получается разными методами: высокотемпературное осаждение из газовой фазы (HTCVD), магнетронное распыление.

В работе [1] изготавливают карбид кремний методом HTCVD. При детальном рассмотрении метода возникает проблема неравномерного роста плёнки на разных уровнях подложкодержателя. Это приводит к необходимости создания математической модели, описывающей процесс выращивания плёнки карбида кремния.

В данной работе рассматривается математическая модель, созданная в программном пакете COMSOL Multiphysics.

2. МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

Для моделирования процесса высокотемпературного газофазного химического осаждения нами было выбрано программное обеспечение COMSOL Multiphysics 6.0. Данная платформа предоставляет огромный набор пользовательских интерфейсов и охватывает все этапы рабочего процесса моделирования — от определения геометрии, свойств материалов и физики, описывающих те или иные явления, до решения и последующей обработки моделей для получения точных и достоверных результатов.

В ходе данной работы была создана модель реактора на рисунке 1, в котором проходил процесс получения подложек с наращённым на них карбидом кремния.

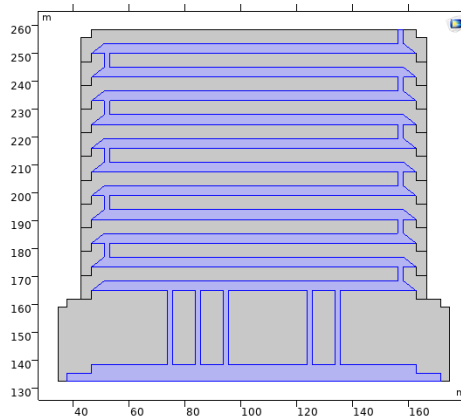


Рис. 1. Геометрия реактора HTCVI процесса реализованная в программе COMSOL Multiphysics

Для расчета полей скорости и давления для потока газа использовалось уравнение Навье-Стокса для сохранения импульса и уравнение неразрывности для сохранения массы в виде:

$$\rho \frac{\partial v}{\partial t} + \rho(v \cdot \nabla)v = \nabla \cdot [-pI + K] + F, \quad (1)$$

где ρ – плотность потока [кг/м³],

p – давление [Па],

v – вектор скорости газового потока [м/с],

∇ – оператор набла,

F – внешняя удельная сила [Н/м³],

I – тензор тождественности,

T – абсолютная температура [К].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Смоделировав данный процесс в COMSOL Multiphysics, было получено изображение распределения мольной доли CH₄ внутри реактора с временным промежутком в 1 час (рисунок 6).

Виден хороший рост концентрации углеводорода на нижних уровнях подложки. Верхние сегменты графитового контейнера практически не претерпевают изменений.

В следствии проведенного эксперимента, были получены следующие снимки поверхности подложки показанные на рисунке 2 (а,б,в,г).

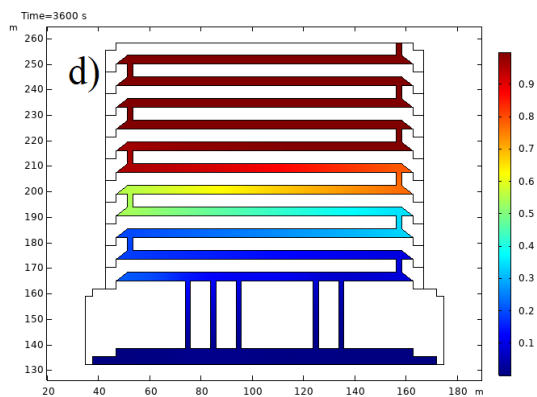


Рис. 6 – Изменение мольных долей CH_4 с течением времени 3600 с

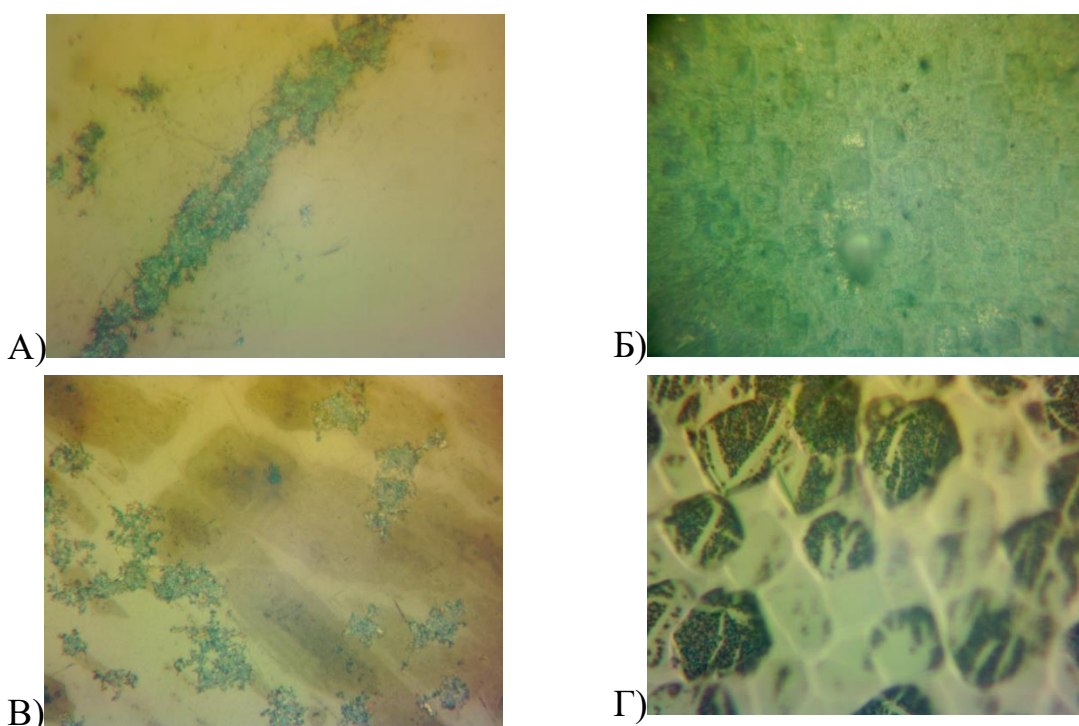


Рис. 2. Результат процесса карбидизации 4 уровня полированной (а) и шлифованной (б) сторон кремниевой подложки и 7 уровня полированной (в) и шлифованной (г) сторон кремниевой подложки.

Сопоставляя результаты, показанные на рисунках (из эксперимента) и (из моделирования) можно сделать вывод о том, что нижележащие уровни подложек графитового контейнера имеют большую концентрацию углеводородов, нежели более высокие, из-за чего сверху наблюдается большее количество дефектов, которые могут негативно сказаться на характеристиках будущих солнечных элементов. Число дефектов так же

растет посредством их транспорта с нижних уровней на верхние из-за более высокой температуры нижней части контейнера.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Рассмотрены физико-математические модели методов нанесения покрытий для солнечных элементов. Данные модели позволяют достаточно точно спрогнозировать распределение покрытия по поверхности подложки.
2. Получена физико-математическая модель нанесения покрытия методом HTCVD.
3. Показано хорошее согласие результатов моделирования с результатами эксперимента

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Латухина Н., Чепурнов В., Писаренко Г. Новые перспективы старых материалов: кремний и карбид кремния // Электроника: наука, технология, бизнес. – 2013. – №. 4. – С. 104-110.
2. Павлова А.П. СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ НАНЕСЕНИЯ ПРОСВЕТЛЯЮЩИХ ПОКРЫТИЙ // Актуальные проблемы радио-и кинотехнологий. – 2021. – С. 112-116.

INVESTIGATION OF PARAMETERS OF PHOTONSENSITIVE STRUCTURES BASED ON SILICON CARBIDE HETEROSTRUCTURES ON POROUS SILICON

D.A. Shigaev, D.A. Shishkina, I.A. Shishkin, V.S. Khorobrov

Samara National Research University,

(34 Moskovskoe Shosse str., Samara, 443086)

e-mail: stalker@sys.net.ru

This paper shows a physical and mathematical model of the creation of silicon carbide using the method of high-temperature gas-phase deposition. The simulation results were compared with the experiment, where good agreement was obtained. The simulation results can be used to refine the technological map for the creation of silicon carbide coatings by the HTCVD method.

Keywords: mathematical modeling, silicon carbide, HTCVD, COMSOL Multiphysics.

ПОЛИДОМЕННАЯ И МОНОДОМЕННАЯ СТРУКТУРЫ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА, ОГРАНИЧЕННОГО В ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЯЧЕЙКАХ ШЕРОХОВАТЫМИ АНИЗОТРОПНЫМИ ПОГРАНИЧНЫМИ ПОВЕРХНОСТЯМИ

А.А. Жукович-Гордеева^{1,2}, А.В. Кузнецов¹, Н.А. Смирнов¹,
Е.П. Пожидаев¹

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук
(119991 ГСП-1 Москва, Ленинский проспект, д.53)

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)»

(125993, г. Москва, Волоколамское шоссе, д. 4)
e-mail: a.zhukovich-gordeeva@lebedev.ru

Измерены шероховатость и анизотропия свободной поверхностной энергии однонаправленно натёртого полимерного слоя (ориентанта), ограничивающего сегнетоэлектрический смектический С* жидкий кристалл (С*ЖК) в жидкокристаллических ячейках. Измерена зависимость анизотропии свободной энергии (АСЭ) ориентанта от шероховатости его поверхности и толщины его слоя. Экспериментально показано, что скачкообразная трансформация полидоменной светорассеивающей структуры С*ЖК в жидкокристаллических ячейках в оптически однородную монодоменную структуру происходит, когда АСЭ ориентанта превышает свободную энергию формирования смектической С* фазы жидкого кристалла.

Ключевые слова: шероховатость полимерного покрытия, анизотропия свободной поверхностной энергии, полиимид, сегнетоэлектрический смектический С* жидкий кристалл, полидоменная и монодоменная структуры.

1. ВВЕДЕНИЕ

Хиральные смектические С* сегнетоэлектрические жидкие кристаллы (С*ЖК) [1] являются в настоящее время жидкокристаллическими средами перспективных устройств отображения [2, 3] и обработки [4] информации.

Интерес к практическому использованию С*ЖК в фотонных устройствах нового поколения связан с тем обстоятельством, что время их жидкокристаллического отклика (от единиц до десятков микросекунд) два-три порядка меньше, чем у нематических жидких кристаллов (НЖК), используемых в дисплейной промышленности в настоящее время.

Для С*ЖК же имманентным свойством является возможность существования разнообразных пространственных неоднородностей: геликоидальной закрутки, обусловленной хиральностью молекул [1], разломов смектических слоёв, называемых шевронными дефектами [5], сегнетоэлектрических доменов [6] и упругих доменов [7]. Оптическим проявлением этих пространственных неоднородностей в общем случае является наблюдаемая в поляризационном микроскопе полидоменная структура, зависящая и от двуосного поверхностного потенциала С*ЖК [8], который может быть причиной своеобразного расщепления каждого из типов доменов в жидкокристаллических ячейках на «правую» и «левую» структуры. Тем не менее, монодоменная структура С*ЖК может быть получена. Это достигается благодаря сочетанию методов материаловедения, позволяющих подавить те или иные пространственные неоднородности в С*ЖК [8-11], и физико-технологических методов обеспечения больших значений величины анизотропии свободной поверхностной энергии ориентантов (более 5 мДж/м²) [12].

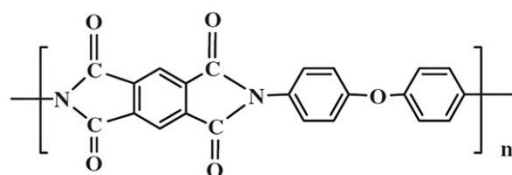
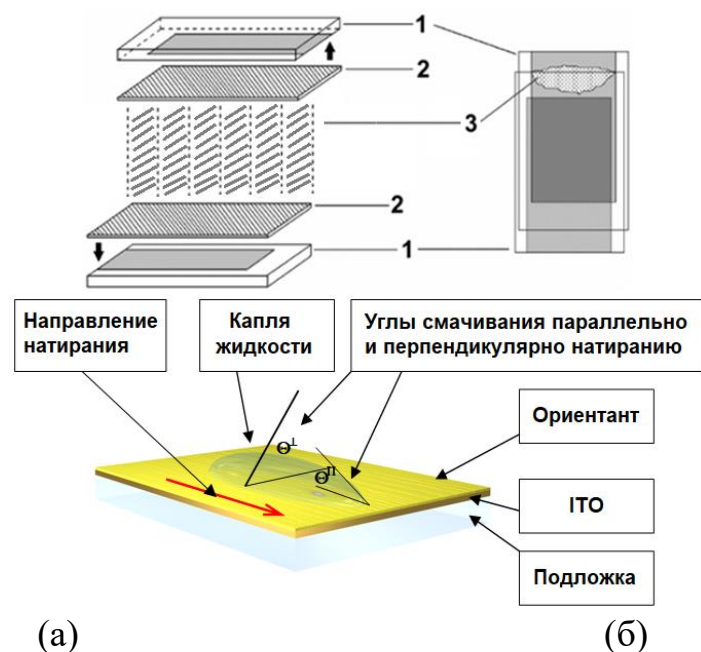
В данной работе впервые исследовано влияние шероховатости полимерного ориентанта на трансформацию полидоменной структуры С*ЖК в монодоменную. Показано, что определяющим параметром этой трансформации является величина анизотропии свободной энергии шероховатого слоя поверхности ориентанта.

2. ОБЪЕКТЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

2.1. Объекты исследования

Объектами исследования являлись жидкокристаллические ячейки (рис. 1(а)), заполненные негеликоидальным С*ЖК [8, 9], в качестве которого выбран разработанный ранее в ФИАН им. П.Н. Лебедева сегнетоэлектрический жидкий кристалл FLC-497, параметры которого детально исследованы [13]. Толщина d слоя С*ЖК FLC-497 во всех ячейках была одинаковой и составляла 6.1 мкм. Для изготовления ячеек использовались стеклянные подложки, покрытые прозрачным

электропроводящим слоем оксида индия-олова (ITO). Шероховатость R_z поверхности ITO была одинаковой для всех поверхностей ITO, около 15 нм. На поверхность ITO наносилось полимерное покрытие на основе полипиромеллитового диангида (ПМДА) и 4,4'-оксианилина (ОДА), см. рис. 1. Нанесение покрытия производилось методом центрифугирования раствора ПМДА-ОДА в диметилформамиде, при скорости вращения вала центрифуги 3000 оборотов в минуту.



(в)

Рис. 1. (а): схема сборки жидкокристаллической электрооптической ячейки: 1 – стеклянная подложка, покрытая слоем ITO, 2 – слой полимерного покрытия (ориентанта), 3 – жидкий кристалл
(б): иллюстрация анизотропии формы капли смачивающей жидкости на натёртой поверхности полимерного ориентанта, (в): структурная формула ПМДА-ОДА

Толщина покрытия варьировалась за счёт изменения концентрации ПМДА-ОДА в диметилформамиде при использовании десяти растворов с

концентрациями (в весовых процентах): 0.1, 0.2, 0.25, 0.5, 0.7, 1.0, 1.3, 1.5, 1.6, 1.7. Имидизация пре-полимерного покрытия на поверхности ИТО проводилась при температуре 290°C в течении одного часа, а перед этим покрытие просушивалась в течение 30-40 минут при температуре 180°C, для удаления растворителя. После имидизации покрытие подвергались натиранию батистом вдоль одного направления; производилось 150 движений натирочной колодки, при постоянном давлении на покрытие. После натирания свободная поверхностная энергия покрытия становится анизотропной, что проявляется в различии углов смачивания Θ^{\parallel} и Θ^{\perp} вдоль и поперёк направления натирания, соответственно (рис. 1(б)). Полимерное покрытие на поверхности ИТО, обладающее анизотропией свободной поверхностной энергии (АСПЭ), традиционно называется ориентантом.

2.2. Методы исследования

Шероховатость поверхностей ИТО и ориентанта измерялась атомно-силовым микроскопом (АСМ) марки Certus Standard V. Обработка и визуализация результатов измерений выполнялись в программной среде Gwyddion. Результаты исследования шероховатости иллюстрируются рисунками 2а) и 2б).

Атомно-силовая микроскопия позволяет также измерить толщину слоя ПМДА-ОДА на поверхности ИТО, что иллюстрируется рисунком 2 с). Для этих измерений полимерное покрытие процарапывается кантилевером АСМ. Положение царапины на рис. 2с) показано сплошной вертикальной линией синего цвета. Можно видеть, что толщина слоя ПМДА-ОДА в приведённом примере составляет около 20 нанометров.

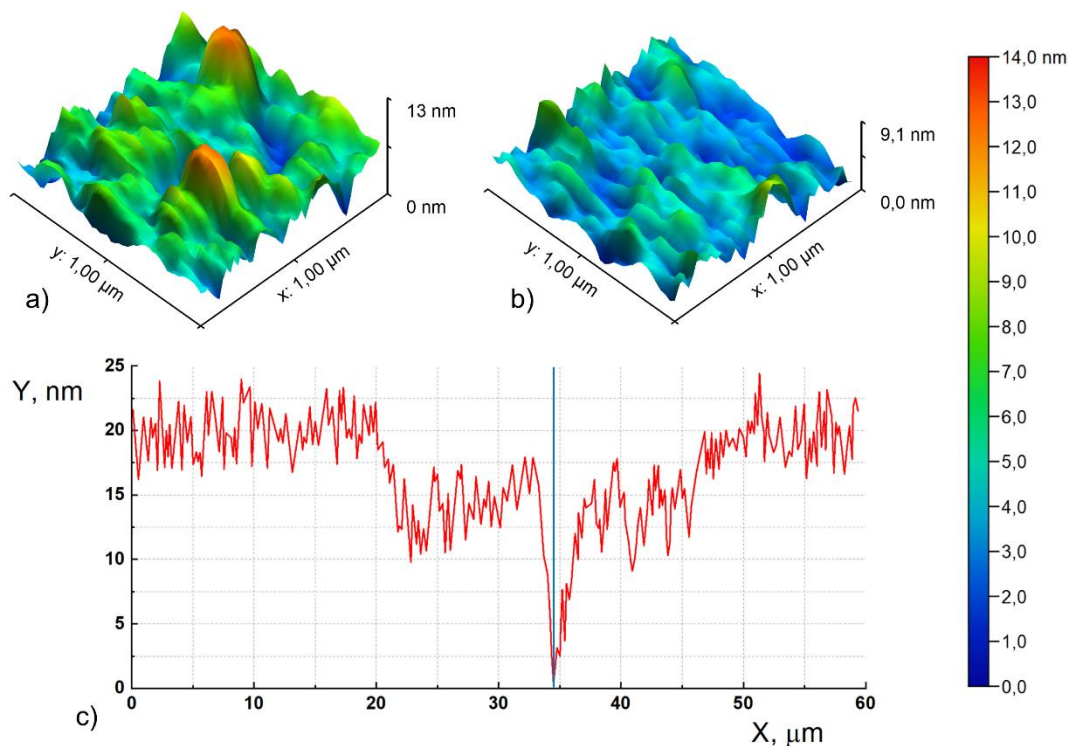


Рис.2. Сканы АСМ на площади поверхности 1 мкм × 1 мкм: а) поверхность ИТО без покрытия полимерным слоем, б) поверхность ИТО, покрытая слоем ПМДА-ОДА методом центрифугирования его раствора (1.0 вес. %) в диметилформамиде. Шероховатость поверхностей оценивается по цветовой шкале, размещённой в правой части рисунка. в) – результат измерения толщины L слоя ПМДА-ОДА на поверхности ИТО методом процарапывания полимерного слоя кантилевером. Слой ПМДА-ОДА нанесён на поверхность ИТО из его однопроцентного растворов в диметилформамиде. По осям X , Y расстояние в микрометрах, по оси Z высота рельефа в нанометрах

Краевые углы смачивания Θ^{\parallel} и Θ^{\perp} исследуемых поверхностей калиброванными тестовыми жидкостями (глицерином и α -бромнафталином) измерялись по классической методике проецирования капли на экран. Для расчётов свободных поверхностных энергий использована система уравнений Оуэнса-Вендта [14], представленная соотношениями (1):

$$\begin{cases} 1 + \cos \Theta^{\parallel} = \frac{2\sqrt{\gamma_{SI}^D * \gamma_{lv}^D}}{\gamma_{lv}} + \frac{2\sqrt{\gamma_{SI}^P * \gamma_{lv}^P}}{\gamma_{lv}}, \\ 1 + \cos \Theta^{\perp} = \frac{2\sqrt{\gamma_{S\perp}^D * \gamma_{lv}^D}}{\gamma_{lv}} + \frac{2\sqrt{\gamma_{S\perp}^P * \gamma_{lv}^P}}{\gamma_{lv}}. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь $\gamma_{SI,\perp}^D, \gamma_{SI,\perp}^P$ это искомые дисперсионные и полярные составляющие свободной поверхностной энергии (СПЭ) полимерной поверхности параллельно и перпендикулярно направлению натирания, соответственно. Известные из классической работы Кинлоха [15] дисперсионная и полярная составляющие СПЭ обеих тестовых жидкостей обозначены, соответственно, как γ_{lv}^D и γ_{lv}^P , а $\gamma_{lv} = \gamma_{lv}^D + \gamma_{lv}^P$.

Отметим, что значения $\gamma_{SI,\perp}^D$ и $\gamma_{SI,\perp}^P$ вычислялись из уравнений (1) отдельно для каждого из значений Θ^{\parallel} и Θ^{\perp} , измеренных при смачивании полимерных поверхностей как глицерином, так и α -бромнафталином. Суммарная СПЭ как вдоль, так и поперёк направления натирания, является суммой полярной и дисперсионной частей [14]:

$$\gamma_{SI,\perp} = \gamma_{SI,\perp}^P + \gamma_{SI,\perp}^D. \quad (2)$$

Расчет величины $\Delta\gamma$ анизотропии свободной поверхностной энергии ориентанта выполнялся по формуле:

$$\Delta\gamma = \gamma_{SI} - \gamma_{S\perp}. \quad (3)$$

Переход от полидоменной к монодоменной структуре слоя С*ЖК при увеличении толщины слоя ориентанта в жидкокристаллической ячейке наблюдался в поляризационном микроскопе POLAM-P211. Для количественной оценки этого процесса на место окуляра микроскопа ставился фотоэлектронный умножитель ФЭУ-62, область спектральной чувствительности которого совпадает с таковой для глаза человека.

Количественная оценка основана на известной зависимости светопропускания T одноосного кристалла, расположенного между скрещенными поляризатором и анализатором, от угла β между плоскостью поляризации падающего света и главной оптической осью кристалла. Эта зависимость для монохроматического света с длиной волны λ , падающего перпендикулярно к главной оптической оси монодоменного кристалла (в

пренебрежении френелевскими отражениями и светорассеянием), имеет вид [16]:

$$T = \sin^2 2\beta * \sin^2 \frac{\Delta\Phi}{2}, \quad (4)$$

где $\Delta\Phi = \frac{2\pi d\Delta n}{\lambda}$ это фазовый сдвиг между обыкновенным и необыкновенным лучами, а Δn показатель двулучепреломления. Очевидно, что в рассматриваемом идеальном случае минимальное светопропускание $T_{min}^{\beta=0} = 0$ наблюдается при $\beta = 0$, а максимальное $T_{max}^{\beta=45^\circ}$ при $\beta = 45^\circ$, если $\Delta\Phi \neq 0$. Отметим, что в наших экспериментах всегда соблюдалось условие $\Delta\Phi = 3\pi$ для $\lambda = 632.8$ нм, что на данной длине волны обеспечивало выполнение условия $T_{max}^{\beta=45^\circ} = 1$.

В случае идеального монодоменного кристалла величина отношения

$$CR = T_{max}^{\beta=45^\circ} / T_{min}^{\beta=0} \quad (5)$$

должна стремиться к бесконечности, что не наблюдается в эксперименте вследствие деполяризации излучения из-за светорассеяния на дислокациях и локальных дефектах структуры. Для реального монодоменного сегнетоэлектрического жидкого кристалла с дислокациями и случайными дефектами структуры $CR = 10^2 - 10^3$ [12, 13]. Для полидоменного кристалла $CR = 1$, так как в различных доменах наблюдаются любые значения угла β от 0 до 2π .

В качестве количественного критерия перехода от полидоменной к монодоменной структуре в данной работе принимается изменение величины CR от $CR = 1$ до $CR > 10^2$. Условие $\beta = 0$ во всех экспериментах означает, что направление натирания полимерного покрытия находится в плоскости поляризации падающего света.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В эксперименте варьировались только толщина ориентанта L , при увеличении которой от нуля до 34 нм шероховатость Rz его поверхности уменьшалась от 14.7 нм до 8.2 нм, а анизотропия свободной поверхностной энергии $\Delta\gamma$ при неизменной процедуре натирания поверхности увеличивалась от нуля до 3.3 мДж/м², как показано на рисунке 3. Эти изменения приводили к трансформации полидоменной структуры С*ЖК в ЖК-ячейке к монодоменной, что иллюстрируется фотографиями текстур

слоя С*ЖК, полученными с помощью поляризационного микроскопа, и приведенными на рисунке 4.

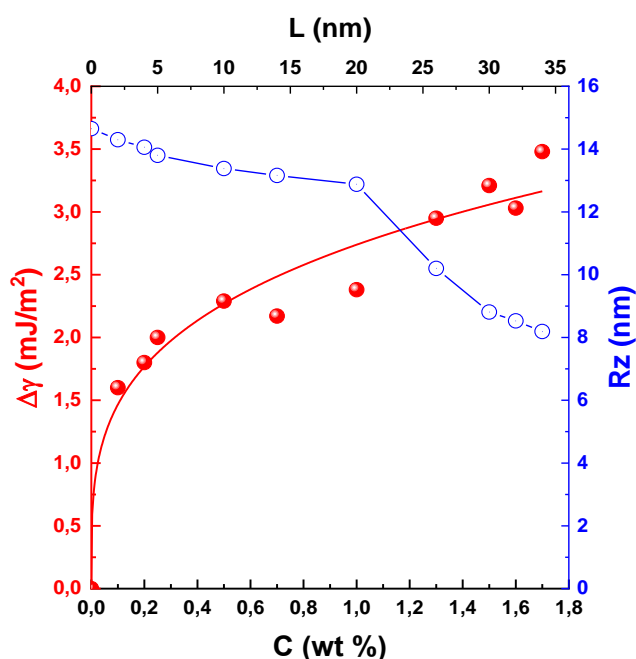


Рис.3. Зависимости величины Rz шероховатости поверхности ориентанта (синие кружки) и анизотропии свободной поверхностной энергии $\Delta\gamma$ ориентанта (красные шарики) от толщины L слоя ПМДА-ОДА, которая задавалась концентрацией C ПМДА-ОДА в диметилформамиде

Для выбора энергетического параметра трансформации полидоменной структуры в монодоменную стоит обратить внимание на то обстоятельство, что при любой толщине ориентанта его поверхность остаётся шероховатой (см. рисунки 2а) и 2б)), причём величина Rz во всех случаях гораздо больше типичных значений длины молекул С*ЖК (около 3 нм) и их диаметра (около 0.5 нм) [11]. Это значит, что взаимодействие молекул жидкого кристалла с пограничной анизотропной поверхностью ориентанта происходит не в некой воображаемой идеальной плоскости раздела, как принято считать в физике жидких кристаллов (см., например, [6, 8]), а по всей глубине и во всём объёме шероховатого слоя.

Можно предположить, что величина анизотропии свободной энергии шероховатого слоя, которую в первом приближении, на уровне размерной оценки можно охарактеризовать параметром $\Delta\gamma/Rz$, определяет условия

трансформации полидоменной структуры в монодоменную. Для экспериментальной оценки допустимости такого предположения результаты измерений рассмотренных выше параметров структуры слоя С*ЖК в ЖК-ячейках представлены на рисунке 4 в виде зависимости $CR(\Delta\gamma/Rz)$, которая иллюстрирует пороговый характер трансформации полидоменной структуры в монодоменную. Очевидно, трансформация происходит в диапазоне изменений величины $\Delta\gamma/Rz$ от $1.3 \cdot 10^5$ Дж/м³ до $1.8 \cdot 10^5$ Дж/м³, где величина CR резко возрастает от единицы до 170 (рис. 4), а величина Rz при этом изменяется менее, чем на 20%, от 13 нм до 11 нм (рис. 3).

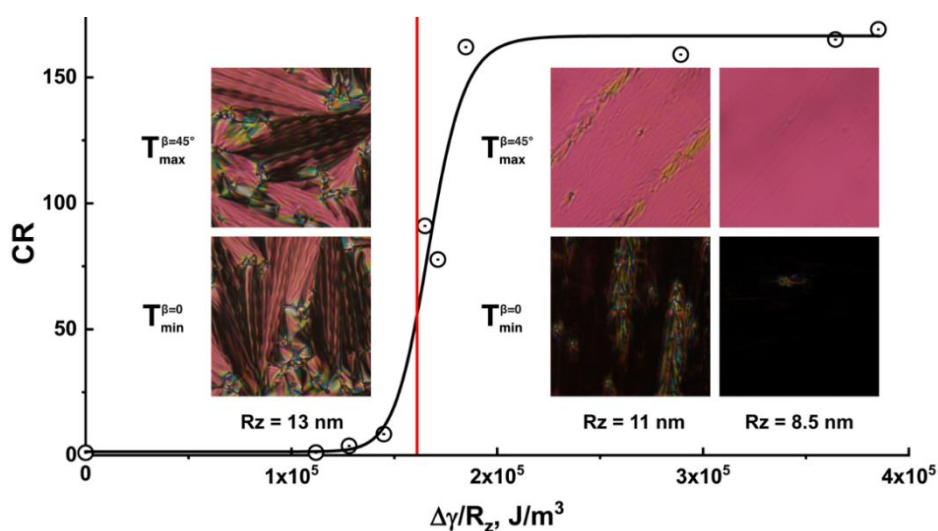


Рис.4. Зависимость контрастного отношения CR жидкокристаллических ячеек, заполненных С*ЖК FLC-497, толщина слоя которого для всех ячеек составляла $6.1 \mu\text{m}$, от параметра $\Delta\gamma/Rz$ шероховатого слоя полимерного ориентанта ПМДА-ОДА, имидизованного при температуре 290°C . Все измерения выполнены при температуре 23°C . На вставках фотографии текстур слоёв С*ЖК при различных значениях Rz ориентанта, размер изображений $300 \times 300 \mu\text{m}$. Вертикальная красная линия соответствует свободной энергии сегнетоэлектрической фазы С* жидкого кристалла FLC-497

Вблизи порога трансформации величина $\Delta\gamma/Rz$ соизмерима с объёмной плотностью F свободной энергии С*ЖК, записываемой в виде разложения Ландау, которое, согласно [17], для С*ЖК в простейшем случае имеет вид:

$$F = \frac{1}{2} a'_0 (T_c - T) \theta^2 + \frac{1}{4} b \theta^4, \quad (6)$$

где a'_0 и b это константы, зависящие только от молекулярного строения, θ – угол наклона молекул жидкого кристалла в смектических слоях, T_c – температура фазового перехода из параэлектрической в сегнетоэлектрическую фазу, T – температура, на которой производятся измерения. Для оценки величины F для С*ЖК FLC-497 константы $a'_0 = 2.9 \cdot 10^4$ Дж/м³К, а также $b = 3.9 \cdot 10^6$ Дж/м³ взяты из работы [18], величины $T_c = 56^\circ\text{C}$ и $\theta = 30^\circ$ при 23°C измерены экспериментально по методикам, обоснованным в [18]. В результате по формуле (6) получена оценка $F \approx 1.8 \cdot 10^5$ Дж/м³, показанная вертикальной красной линией на рисунке 4.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, трансформация полидоменной структуры в монодоменную происходит, когда объемная плотность свободной энергии шероховатого слоя ориентанта превышает свободную энергию сегнетоэлектрической смектической ЖК фазы С*.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. R. B. Meyer, L. Liebert, L. Strzelecki, P. Keller, “Ferroelectric liquid crystals”, *Journal de Physique Letters*, Edp sciences, **36**, 69 (1975). <https://doi.org/10.1051/jphyslet:0197500360306900>
2. E. Pozhidaev, V. Chigrinov, A. Murauski, V. Molkin, D. Tao, H.-S. Kwok, “V-shaped electrooptical mode based on deformed-helix ferroelectric liquid crystal with subwavelength pitch”, *Journal of the SID*, **20**, 273 (2012). <https://doi.org/10.1889/JSID20.5.273>
3. Y.-S. Zhang, C.-Y. Liu, A. V. Emelyanenko, J.-H. Liu, "Synthesis of predesigned ferroelectric liquid crystals and their applications in field-sequential color displays", *Adv. Funct. Mater.* **28**, 1706994 (2018). <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/adfm.201706994>
4. S. P. Kotova, E. P. Pozhidaev, S. A. Samagin, V. V. Kesaev, V. A. Barbashov, S. I. Torgova, "Ferroelectric liquid crystal with sub-wavelength helix pitch as an electro-optical medium for high-speed phase spatial light modulators", *Opt. Laser. Technol.* **135**, 106711 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.optlastec.2020.106711>
5. T. P. Rieker, N. A. Clark, G. S. Smith, D. S. Parmar, E. B. Sirota, and C. R. Safinya, "Chevron" Local Layer Structure in Surface-Stabilized Ferroelectric Smectic-C* Cells", *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2658 (1987), <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.59.2658>

6. E. P. Pozhidaev, V. G. Chigrinov, "Bistable and multistable states in ferroelectric liquid crystals", *Crystallogr. Rep.* **51**, 1030–1040 (2006). <https://doi.org/10.1134/S1063774506060149>
7. V. P. Vorflusev, Yu. P. Panarin, S. A. Pikin, V. G. Chigrinov, "Domain structures in ferroelectric liquid crystals", *Liquid Crystals*, **14**, 1055 (1993), <https://doi.org/10.1080/02678299308027813>
8. A. Kaznacheev, E. Pozhidaev, V. Rudyk, A. V. Emelyanenko, A. Khokhlov, "Biaxial potential of surface-stabilized ferroelectric liquid crystals", *Phys. Rev. E* **97**, 042703 (2018), <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.97.042703>
9. L. A. Beresnev, V. A. Baikalov, L. M. Blinov, E. P. Pozhidaev, G. V. Purvanetskias, "First non-helicoidal ferroelectric liquid crystal", *JETP Lett.* **33**, 536 (1981).
10. A. Mochizuki, M. Hirose, M. Nakatsuka, "Zigzag defect free alignment and good bistability of surface stabilized Sc* cells", *Ferroelectrics*, **113**, 353 (1991), <https://doi.org/10.1080/00150199108014073>
11. E. P. Pozhidaev, S. I. Torgova, V. A. Barbashov, M. V. Minchenko, S. N. Silyanov, P. V. Dorovatovskii, B. I. Ostrovskii, A. Strigazzi, "Ferroelectric C* phase induced in a nematic liquid crystal matrix by a chiral non-mesogenic dopant", *Applied Physics Letters* **106**, 062904, (2015), <http://dx.doi.org/10.1063/1.4908152>
12. E. Pozhidaev, V. Chigrinov, D. Huang, A. Zhukov, J. Ho, H. S. Kwok, Photoalignment of Ferroelectric Liquid Crystals by Azodye Layers, *Jpn. J. Appl. Phys.* **43**, 5440 (2004), <https://hdl.handle.net/1783.1/21953>
13. E. Pozhidaev, V. Chigrinov, X. Li, "Photoaligned Ferroelectric Liquid Crystal Passive Matrix Display with Memorized Gray Scale", *Jpn. J. Appl. Phys.* **45**, 875 (2006), <https://hdl.handle.net/1783.1/12151>
14. D. K. Owens, R. C. Wendt, "Estimation of the surface free energy of polymers", *J. Appl. Polym. Sci.* **13**, 1741 (1969). <https://doi.org/10.1002/app.1969.070130815>
15. A. J. Kinloch, "Adhesion and Adhesives: Science and Technology", Publisher: Chapman and Hall, ISBN: 0-412-27440-X (1987). <http://www.springer.com/us/book/9780412274404>
16. M. Born, E. Wolf, Principles of Optics, Cambridge: Cambridge, University Press, 1999, <https://doi.org/10.1017/CBO9781139644181>
17. E. P. Pozhidaev, L. M. Blinov, L. A. Beresnev, V. V. Belyaev, "The dielectric anomaly near the transition from the smectic A* to smectic C* phase and visco-elastic properties of ferroelectric liquid crystals", *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* **124** (1), 359 (1985), <https://doi.org/10.1080/00268948508079488>
18. Е. П. Пожидаев, "Физические свойства смектической С* фазы жидких кристаллов и принципы создания жидкокристаллических сегнетоэлектриков с заданными электрооптическими свойствами",

диссертация на соискание учёной степени доктора физико-математических наук, Москва (2006), <https://www.dissercat.com/content/fizicheskie-svoistva-smekticheskoi-s-fazy-zhidkikh-kristallov-i-printsipy-sozdaniya-zhidkokr>

**THE EFFECT OF THE ROUGHNESS OF THE POLYMER
COATING ON THE ANISOTROPY OF THE FREE SURFACE ENERGY
AND THE OPTICAL QUALITY OF THE NON-HELICOIDAL LIQUID
CRYSTALS**

**A.A. Zhukovich-Gordeeva^{1,2}, A.V. Kuznetsov¹, E.P. Pozhidaev¹, N.A.
Smirnov¹**

*¹P. N. Lebedev Physical Institute of RAS,
(53 Leninskiy Prospekt, Moscow, Russia, 119991)*

*²Moscow Aviation Institute (National Research University),
(4 Volokolamskoe shosse, Moscow, Russia, 125993)*

e-mail: a.zhukovich-gordeeva@lebedev.ru

The roughness of the polymer coating and the anisotropy of the free surface energy depending on the concentration of the polymer in solution are investigated. The influence of roughness and anisotropy of surface energy on the contrast ratio of a cell with a non-helicoidal smectic C* liquid crystal is studied.

Keywords: roughness of polymer coating, anisotropy of free surface energy, polyimide, non-helicoidal smectic C* liquid crystal, contrast ratio.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЙЯНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ ЭМАЛИ ЗУБОВ ПРИ ПАРОДОНТИТЕ ДО И ПОСЛЕ ЛЕЧЕНИЯ

А.Ю. Ионов¹, О.О. Фролов¹, П.Е. Тимченко¹, И.В. Бажутова²,
Е.В. Тимченко¹

¹Самарский национальный исследовательский университет,
(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)

²Самарский государственный медицинский университет
(443099, г. Самара, ул. Чапаевская, 89)
e-mail: laser-optics.timchenko@mail.ru

В данной работе представлены результаты исследований эмали зубов при пародонтите до и после кюретажа. В качестве метода оценки влияния кюретажа на эмаль зубов был использован метод спектроскопии комбинационного рассеяния. Был проведен анализ спектров КР эмали зубов до и после кюретажа. Выявлены спектральные изменения эмали зубов. Установлено, что после проведения кюретажа в эмали зубов происходят спектральные изменения, связанные с изменением минерального состава и образованием органического матрикса.

Ключевые слова: Рамановская спектроскопия, эмаль зубов, кюретаж, пародонтит.

1. ВВЕДЕНИЕ

Пародонтит – это заболевание зубочелюстной системы, характеризующееся развитием острого или хронического воспалительного процесса, деструкцией тканей пародонта и атрофией костной ткани альвеол. Пародонтит, как правило, прогрессирует очень медленно. В тяжелых случаях – прежде всего без лечения – он может приводить к потере зубов. Несвоевременное лечение может привести к тяжелым формам пародонтита, а в последствии и к потере зубов [1,2]. Одним из методов лечения данного заболевания является закрытый кюретаж. Кюретаж является одним из первых хирургических методов лечения воспалительно-дистрофического процесса пародонта. Заключается в выскабливании пародонтального кармана с целью удаления грануляций и поддесневого зубного камня.

Выскабливание производят с помощью специального набора инструментов[3].

В настоящее время в литературе, нет однозначной информации о том, какое влияние оказывает операция кюретажа на структуру тканей зубов.

Существует множество методов оценки состояния зубов при пародонтите, такие как, ортопантомография, рентгенография, КТ и другие [4]. Тем не менее, данные методы не позволяют оценить состав и изменения структуры зубов после операции кюретажа, чтобы дополнительно можно было бы назначить лечение и восстановительную терапию для получения наилучшего результата.

Данную задачу можно решить с помощью метода спектроскопии комбинационного рассеяния, который получил широкое распространение в медицине [5,6]. Данный метод позволяет проводить оценку относительного состава биообъектов.

В работе [5] используется метод спектроскопии комбинационного рассеяния для анализа структуры зуба и применение данного метода в стоматологии.

В ранее опубликованной нашей работе [6] приведены результаты спектральных исследований тканей зубов при пародонтите. Введены критерии ранней диагностики данного заболевания

Целью работы являлось применение метода спектроскопии комбинационного рассеяния для оценки эмали зубов при пародонтите до и послеоперации кюретажа

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

В качестве объектов исследований были использованы зубы, удаленные в связи с хроническим пародонтитом. Диагноз пародонтит ставился клинически и при анализе компьютерной конусно-лучевой томографии (КТ) (код заболевания по МКБ-10 (1997 г.) - K05.3). Выделены 2 группы образцов: 1 группа – удаленные зубы пациентов до операции кюретажа; 2 группа – удаленные зубы тех же пациентов после проведения операции кюретажа.

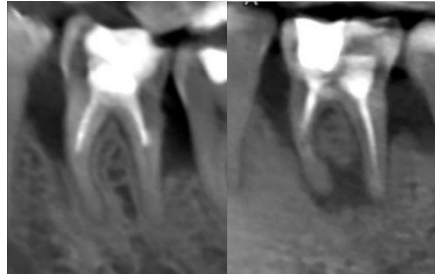


Рис. 1. Объекты исследований

Метод спектроскопии КР был реализован с помощью экспериментального стенда, состоящего из рамановского пробника RPB-785, совмещенного с лазерным модулем LuxxMasterLML-785.0RB-04 (мощность до 500 мВт, длина волны $784,70 \pm 0,05$ нм) и высокоразрешающего цифрового спектрометра Shamrocksr-303i, обеспечивающего спектральное разрешение 0,15 нм, со встроенной охлаждаемой камерой DV420A-OE [7].

Детальный анализ спектров КР осуществлялся в программной среде MagicPlotPro, а также с помощью метода дискриминантного анализа (LDA) в программе IBMSPSSStatistics[8].

2.1. Результаты исследований

На рисунке 2 приведены усредненные спектры КР образцов зубов при пародонтите до и после кюретажа.

Из рисунка видно, что после проведения операции кюретажа, в эмали зубов происходят спектральные изменения, связанные с изменением

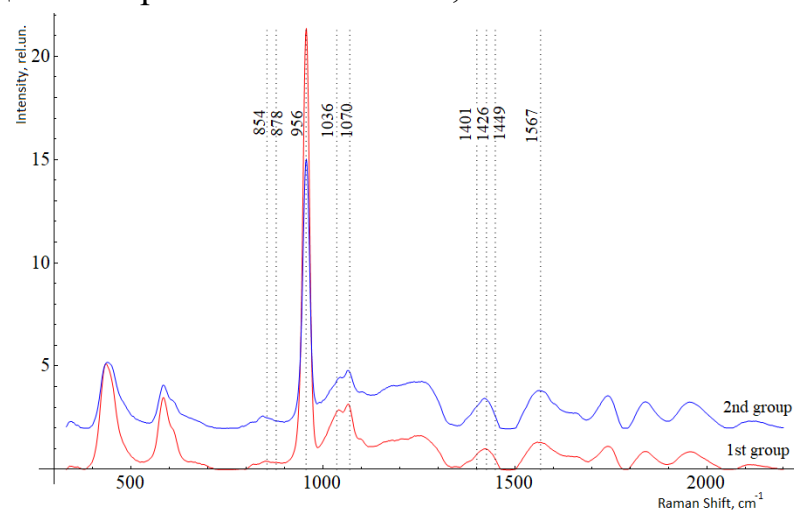


Рис. 2. Сравнение спектра эмали зубов: 1 – до кюретажа, 2 – после кюретажа

относительной интенсивности линий 956 cm^{-1} (ν_{1P-O} symmetric stretch (PO_4^{3-}) и 1070 cm^{-1} (C-O inplane stretch (CO_2^{3-})). Данные линии связаны с изменением минерального состава. Также наблюдаются изменения интенсивности линий на 1449 cm^{-1} (Lipids and proteins), 1036 cm^{-1} (phenylalanine (collagen assignment)), 854 cm^{-1} (Hydroxyproline $\nu(\text{C-C})$ stretch), связанные с образованием органического матрикса.

Спектральные изменения, связанные с изменением минеральных компонент после проведения операции кюретажа связаны с тем, что в процессе кюретажа удаляется зубной камень соответственно, что приводит к уменьшению минерализации эмали.

Спектральные изменения, связанные с изменением органического состава, видимо обусловлены восстановлением коллагена после данной операции.

Для повышения информативности полученных спектров КР был произведен нелинейный регрессионный анализ спектров, состоящий в их разложении на спектральные линии. На рисунке 3 представлен результат разложения спектрального контура на сумму распределений линий Гаусса.

Среднее значение коэффициента детерминации результирующего спектра от исходного в области 800-1780 cm^{-1} составило $R^2 = 0,999$, относительная погрешность определения интенсивности спектральных линий а не превышает 5%, усредненное стандартное отклонение координаты линии x_0 составляет 0,1 cm^{-1} , усредненное стандартное отклонение ширины линии (HWHM) Гаусса dx составило 1,8 cm^{-1} .

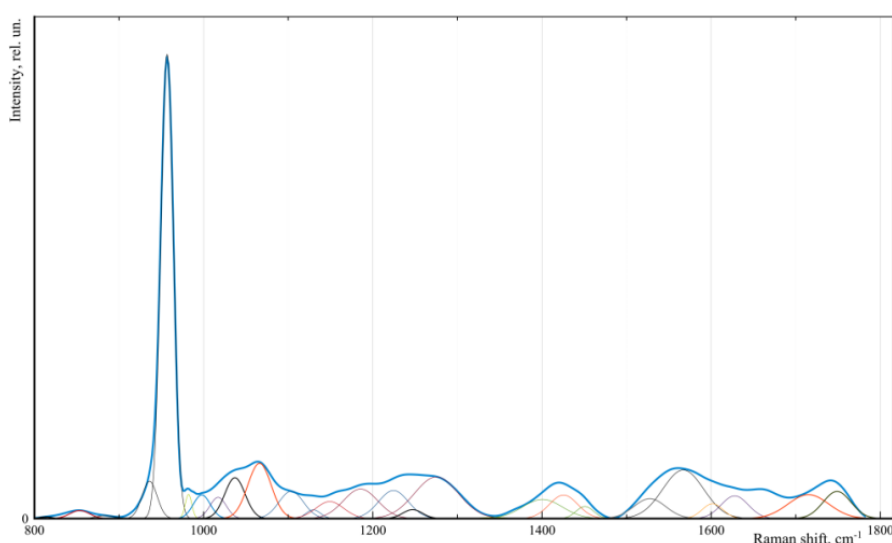


Рис. 3. Разложение спектрального контура для образцов эмали

Для относительной количественной оценки компонентного состава гидроксипатита использовались абсолютные значения интенсивностей линий КР нормированных спектров.

Для дальнейшего анализа полученных после разделения спектральных линий исследуемых объектов был выбран метод линейного дискриминантного анализа в программной среде IBM SPSSStatistics.

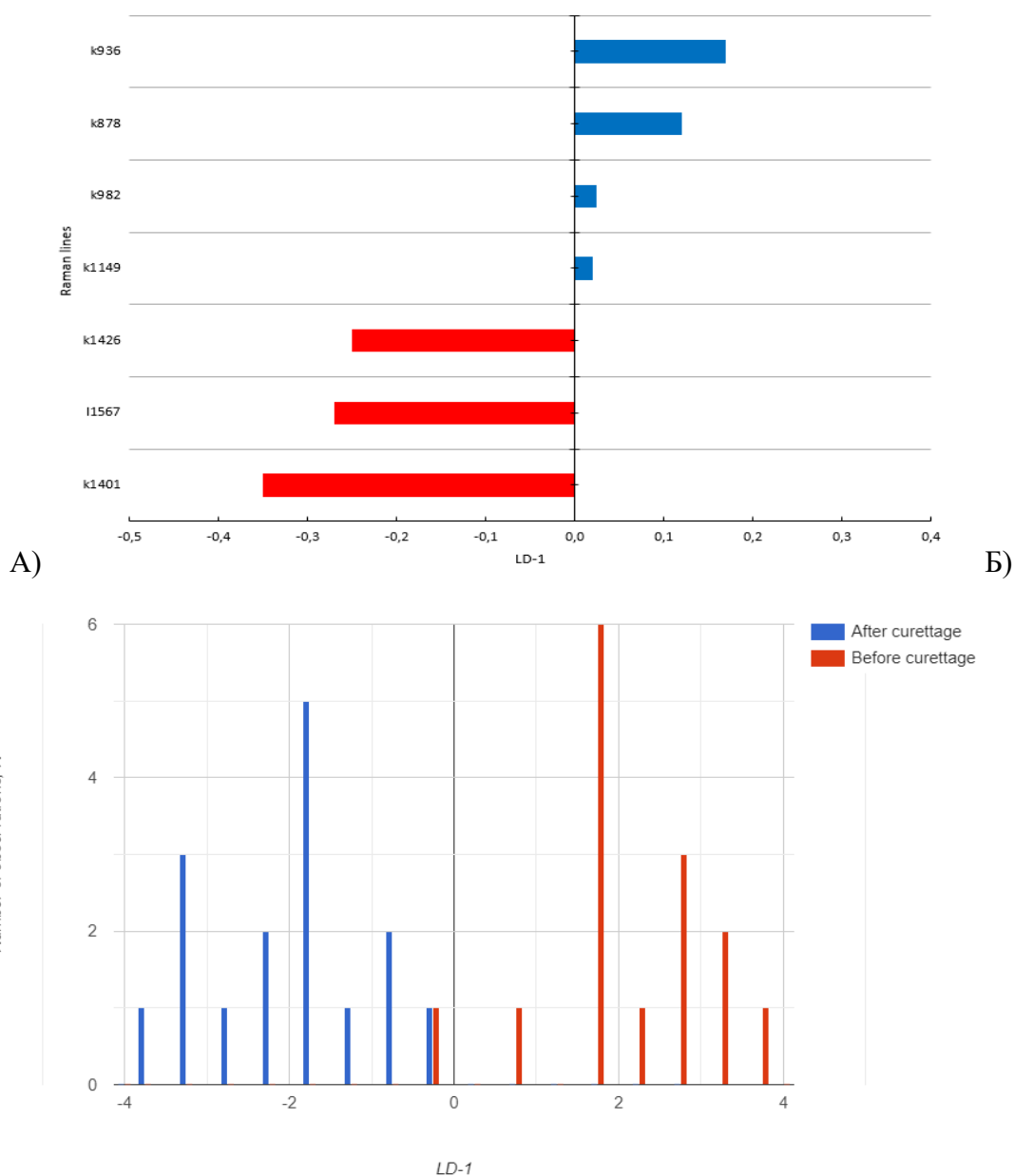


Рис. 4. А) График значений линейной дискриминантной функции, Б) Значения коэффициентов факторной структуры

На рисунке 4 (А) представлены результаты LDA сравнения двух групп образцов. Проанализированы 30 спектров эмали. Дискриминантная функция LD-1 описывает дисперсию на 100 %. Положительные значения LD-1 характерны для спектров КР, полученных из эмали до кюретажа. Области групп не имеют пересечений.

На рисунке 4 (Б) показаны значения релевантных коэффициентов матрицы факторной структуры, имеющие физический смысл корреляции между переменными в модели и дискриминирующей функцией. Чем выше по модулю значение LD-1 для переменной, тем в большей степени она определяет разницу в дискриминационной модели между группами образцов.

Дискриминационная адекватность метода характеризуется значением $AUC = 1$, что свидетельствует об отличном качестве диагностического инструмента. Стандартная ошибка SE составила 0%. Оптимальная точка отсечения для представленного алгоритма, определенная согласно условию баланса между чувствительностью и специфичностью, соответствовала 0,824. Показатели чувствительности и специфичности диагностической модели в данной точке отсечения составили 100 %.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В результате исследований проведен хемометрический анализ спектров комбинационного рассеяния эмали зубов до и после кюретажа. Были выявлены спектральные изменения эмали зубов. Установлено, что после проведения операции открытого кюретажа, в эмали зубов происходят спектральные изменения, связанные с изменением относительной интенсивности линий 957 см^{-1} (ν_1 P–O symmetric stretch (PO_4^{3-})) и 1070 см^{-1} (C–O in plane stretch ($\text{CO}_2^{3\nu_1}$)). Данные линии связаны с изменением минерального состава. Также наблюдаются изменения интенсивности линий на 1449 см^{-1} (Lipids and proteins), 1036 см^{-1} (phenylalanine (collagen assignment)), 854 см^{-1} (Hydroxyproline (C–C) stretch), связанные с образованием органического матрикса.

Данные спектральные изменения показывают восстановление тканей эмали зубов после данной операции.

Метод спектроскопии комбинационного рассеяния может быть в дальнейшем применен для оценки тканей зубов после кюретажа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. О.О. Янушевич, Э.М. Кузьмина, Ю.М. Максимовский, А.Ю. Малый, Л.А. Дмитриева, З.Э. Ревазова, В.А. Почтаренко, А.И. Эктова, В.Д. Вагнер, А.И. Грудянов, Л.Е. Смирнова, Клинические рекомендации (Протоколы лечения) при диагнозе пародонтит. // Москва, 2014, 124 с.
2. Герберт Ф. Вольф, Эдит М. Ратейцхак, Клаус Ратейцхак, Пародонтология // МЕДпресс-информ 2008, 548 с.
3. В.В. Богатов, С.Н. Лебедев, Ю.В. Лебедева, Хирургические методы лечения заболеваний пародонта // 2018, 28 с.
4. В.Д. Молоков, З.В. Доржиева, Е.М. Казанкова, Методическое пособие для самостоятельной подготовки студентов стоматологического факультета по теме «Рентгеносемиотика болезней пародонта» // 2005.
5. Ramakrishnaiah, R. and Rehman, G.U. and Basavarajappa, S. and Al Khuraif, A.A. and Durgesh, B.H. and Khan, A.S. and Rehman, Applications of Raman Spectroscopy in Dentistry: Analysis of Tooth Structure // Applied Spectroscopy Reviews, 2015, p. 332-350.
6. Elena Timchenko, Pavel Timchenko , Larisa Volova, Oleg Frolov, Maksim Zibin , Irina Bazhutova Raman spectroscopy of changes in the tissues of teeth with periodontitis // Diagnostics 2020 – 10 - 876 doi:10.3390.
7. E.V. Timchenko , P.E. Timchenko , O.O. Frolov , E.F. Yagofarova , K.B. Chernyy-Tkach , M.A. Zybin , G.G. Dolgushov, Optical Methods for Periodontitis Early Rapid Diagnosis // Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech), IEEE 2019, 978-1-7281-4439-9/19 - C.298-300 DOI: 10.1109/EExPolytech.2019.8906802
8. P.E. Timchenko, E.V. Timchenko, L.T. Volova, O.O. Frolov, Spectral Analysis of Organic Components of Demineralized Bone Biografts // Optics and Spectroscopy (English translation of OptikaiSpektroskopiya) 2019. — Vol. 126. Issue 6. — P. 769-775

APPLICATION OF RAMAN SPECTROSCOPY TO ASSESS TOOTH ENAMEL IN PERIODONTITIS BEFORE AND AFTER TREATMENT

A.Y. Ionov¹, O.O. Frolov¹, P.E. Timchenko¹, I.V. Bazhutova²,
E.V. Timchenko¹

¹*Samara National Research University,
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)*

²*Samara state medical university
(Chapayevskaya, 89, Samara, Russia, 443099)
e-mail: laser-optics.timchenko@mail.ru*

This paper presents the results of studies of tooth enamel in periodontitis before and after curettage. Raman spectroscopy was used as a method to assess the effect of curettage on tooth enamel. Analysis of CR spectra of tooth enamel before and after curettage was carried out. Spectral changes in tooth enamel were revealed. It was found that after curettage in the enamel of teeth there are spectral changes associated with changes in the mineral composition and the formation of the organic matrix.

Keywords: Raman spectroscopy, dental enamel, curettage, periodontitis.

РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ НЕПРЕРЫВНЫХ КИСЛОРОДНО-ИОДНЫХ ЛАЗЕРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ УПРОЩЕННЫХ МОДЕЛЕЙ ГЕНЕРАЦИИ

А.Д. Капитонов¹, А.В. Меженин¹

¹Самарский национальный исследовательский университет,
(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)
e-mail: alex13k92@mail.ru

На основе двухуровневой модели генерации с учетом кинетических и оптических потерь проведен расчет энергетической эффективности непрерывных кислородно-иодных лазеров с накачкой двух типов. Эффективные режимы генерации определены двумя методами – картирования и оценки, разработанными с использованием безразмерных критериев подобия (относительное время пребывания активной среды в резонаторе и эффективность резонатора) и размерных параметров (время пребывания потока в резонаторе и коэффициент пропускания).

Ключевые слова: кислородно-иодный лазер, непрерывный режим генерации, энергетическая эффективность, критерий подобия.

1. ВВЕДЕНИЕ

Непрерывный кислородно-иодный лазер (КИЛ) является самым мощным источником когерентного излучения в настоящее время. По типу накачки существующие непрерывные КИЛ делятся на лазеры с химической накачкой (ХКИЛ) [1] и с накачкой электрическим разрядом (ЭКИЛ) [2].

Основным выходным параметром непрерывных КИЛ является энергетическая эффективность η , определяемая отношением выходной мощности W_{out} к максимально достижимой мощности W_p или отношением числа излученных в единицу времени лазерных фотонов к числу молекул энергоносителя, израсходованных за это же время:

$$\eta = \frac{W_{out}}{W_p} = (Y_i - \Delta Y_{relax} - Y_d)\eta_{extr}, \quad (1)$$

где $Y_i - \Delta Y_{relax} - Y_d = \eta_{extm}$ – эффективность извлечения энергии из активной среды, Y_i , Y_d – доля синглетного кислорода на входе и выходе резонатора, Y_{relax} – доля потерь синглетного кислорода в процессах

релаксации, η_{extr} – эффективность резонатора. В определении (1) достижимая мощность есть $W_p = h\nu G_{O_2}$, здесь $h\nu$ – энергия фотона, излученного на переходе $I(^2P_{1/2}, F = 3) \rightarrow I(^2P_{3/2}, F' = 4)$, G_{O_2} – расход кислорода (т. к. энергоносителем в непрерывных КИЛ является синглетный кислород $O_2(^1\Delta)$).

На сегодняшний день существуют численные модели, позволяющие успешно решать задачи прогнозирования энергетических характеристик в трехмерной газодинамической постановке с учетом кинетики активной среды и распределения поля в резонаторе. Однако условия работы непрерывных КИЛ в случае обеспечения малости релаксационных и паразитных оптических потерь позволяют эффективно использовать в расчетах одномерную аналитическую двухуровневую модель генерации. В этой модели в качестве независимых переменных могут фигурировать как размерные параметры, так и безразмерные критерии подобия.

Целью настоящей работы является определение эффективных режимов генерации непрерывных КИЛ на основе двухуровневой модели, в которой учтены кинетические и оптические потери, с использованием критериев подобия и размерных параметров.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Построение аналитических моделей для расчета выходных характеристик непрерывных КИЛ, как правило, проводится на основе следующих общих допущений: одномерная газодинамическая модель также хорошо предсказывает выходную мощность, как и трехмерная; лазер работает по двухуровневой схеме накачки, и генерация происходит только на сильнейшем переходе между подуровнями сверхтонкого расщепления атома йода; контур усиления при многомодовой генерации насыщается однородно.

В непрерывном КИЛ активная среда формируется в узле смешения при перемешивании газовых потоков, идущих от генератора синглетного кислорода и генератора паров йода. Полагаем, что этот процесс происходит мгновенно. Допускаем, что имеет место частичная диссоциация молекул йода, которая завершается до входа в резонатор. Сформированная однородная активная среда содержит молекулы кислорода, атомы и молекулы йода, частицы несущего буферного газа и тушащие компоненты. Газодинамические параметры потока (скорость, давление и температура) в

резонаторе принимаются постоянными. Внутррезонаторную интенсивность считаем постоянной во всем объеме, занятом излучением. При построении математической модели рассматриваем только процессы, происходящие в резонаторе.

Принимаем, что кинетика активной среды определяется реакцией накачки и наиболее быстрыми релаксационными процессами, в которых происходит тушение возбужденного состояния атома йода. Реакции и значения кинетических констант скоростей процессов приведены в [3].

Для расчета энергетической эффективности непрерывных КИЛ по формуле (1) доля синглетного кислорода на выходе резонатора вычисляется с использованием системы расчетных уравнений – дифференциального с начальным условием и алгебраического:

$$\begin{cases} \frac{dY}{d\gamma} = -\frac{3(1-Y_{TH})}{2} \frac{[C+\Lambda(1-Y_{TH})]Y-CY_{TH}}{(1-3Y_{TH})Y+2Y_{TH}+(1-Y_{TH})(3C/2+\Lambda)}, & Y|_{\gamma=0} = Y_i, \\ Y_d = Y_i - \frac{3(1-Y_{TH})\mu C\gamma_d}{2(1-\eta_{extr})} - \frac{(1-Y_{TH})(1-\eta_{extr}+2\mu)\Lambda\gamma_d}{2(1-\eta_{extr})}. \end{cases} \quad (2)$$

Эта система аналогична уравнениям, полученным в работе [3]. Однако вместо критерия подобия Π , выражающего превышение усиления над потерями и определяемого в [3] по формуле (12), здесь фигурирует эффективность резонатора η_{extr} , а $\Pi_{max} = \mu^{-1}$. В уравнения системы (2) входят следующие параметры: Y , Y_{TH} – текущая и пороговая доля синглетного кислорода; γ – отношение текущего времени пребывания потока в резонаторе к времени извлечения энергии синглетного кислорода при бесконечно большой интенсивности внутррезонаторного излучения; γ_d – критерий подобия, выражающий безразмерное время, за которое доля синглетного кислорода доступная для извлечения в активной среде уменьшается в e раз при бесконечно большой интенсивности поля в резонаторе; C – нормированная внутррезонаторная интенсивность; Λ – отношение скоростей релаксации и возбуждения для электронно-возбужденных атомов йода (темп кинетических потерь); μ – отношение паразитных оптических потерь к максимальному усилению за двойной проход (уровень оптических потерь).

Решение уравнений системы (2) при заданных значениях Y_i , Y_{TH} , Λ и μ позволяет с учетом определения (1) вычислить энергетическую

эффективность непрерывного КИЛ, принимая во внимание, что доля потерь синглетного кислорода в процессах релаксации согласно [4] есть

$$\Delta Y_{relax} = (1 - Y_{TH})(1 - \eta_{extr} + 2\mu)\Lambda\gamma_d / (2 - 2\eta_{extr}). \quad (3)$$

Поскольку функция η зависит от двух критериев подобия γ_d и η_{extr} , можно, изменяя их значения с определенным шагом, получить двумерную матрицу соответствующих значений энергетической эффективности. Это позволяет представить все возможные режимы работы лазера на одном графике в виде двумерной цветовой карты. В этом состоит суть метода картирования режимов генерации, впервые предложенного в [3].

Оценку выходных характеристик непрерывных КИЛ по упомянутым выше четырем параметрам можно выполнить и более простым способом. Совместное решение уравнений системы (2) позволяет получить неявную зависимость доли синглетного кислорода на выходе резонатора в виде функции двух критериев подобия $Y_d = f(\gamma_d, \eta_{extr})$ аналогичную последней нумерованной формуле во втором разделе в работе [4]. Откуда следуют формулы для расчета η_{extm} в приближении сильного поля ($C \rightarrow \infty$) с учетом кинетических потерь $\Lambda \neq 0$ и в случае протяженного в направлении потока резонатора ($\gamma_d \rightarrow \infty$), что возможно при $\Lambda = 0$:

$$\eta_{extm}^{C \rightarrow \infty} = (Y_i - Y_{TH})(1 - e^{-\gamma_d}) - (1 - Y_{TH})\Lambda\gamma_d / 2. \quad (4)$$

$$\left(\frac{1 - \eta_{extr}}{\mu} - 1 + 3Y_{TH} \right) \frac{\eta}{\eta_{extr}} - 3Y_{TH}(1 - Y_{TH}) \ln \frac{Y_i - Y_{TH}}{Y_i - Y_{TH} - \eta / \eta_{extr}} = 0. \quad (5)$$

Эти зависимости характеризуются наличием экстремумов, достигаемых при значениях критериев подобия

$$\gamma_d^{opt} = \ln \frac{2(Y_i - Y_{TH})}{\Lambda(1 - Y_{TH})}, \quad (6)$$

$$\eta_{extr}^{opt} = 1 - (1 - 3Y_{TH})\mu - \frac{3Y_{TH}(1 - Y_{TH})\mu}{Y_i - Y_{TH} - \frac{3Y_{TH}(1 - Y_{TH})\mu}{1 + 3Y_{TH}\mu - \mu}} \ln \frac{(Y_i - Y_{TH})(1 + 3Y_{TH}\mu - \mu)}{3Y_{TH}(1 - Y_{TH})\mu}. \quad (7)$$

Тогда можно приближенно считать, что энергетическая эффективность имеет максимум при $\gamma_d = \gamma_d^{opt}$ и $\eta_{extr} = \eta_{extr}^{opt}$. Значение же η в точке максимума по-прежнему рассчитываем в соответствии с (1) как

$$\eta = [Y_i - Y_{TH} - \Lambda(1 - Y_{TH})(1 + \gamma_d^{opt}) / 2] \eta_{extr}^{opt}. \quad (8)$$

Таким образом, определяя наиболее эффективный режим работы значениями критериев подобия γ_d^{opt} и η_{extr}^{opt} , согласно (8) получаем верхнюю оценку величины η для КИЛ. В этом состоит суть метода оценки энергетической эффективности непрерывных КИЛ, впервые предложенного в несколько ином виде в [5]. Безусловным достоинством метода оценки по сравнению с методом картирования является простота его применения.

Изменяя с определенным шагом значения времени пребывания потока в резонаторе t_d и суммарного коэффициента пропускания зеркал t_r и выполняя последующий пересчет этих величин в значения критериев подобия γ_d и η_{extr} с учетом их определений, приведенных в [3–5], можно реализовать метод картирования на основе уравнений системы (2) с использованием размерных параметров. Метод оценки, наоборот, после использования соотношений (6)–(8) требует пересчета γ_d и η_{extr} в значения t_d и t_r .

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Апробация методов, предложенных в предыдущем разделе, проводится на основе параметров совершенных с точки зрения обеспечения малых потерь ХКИЛ [1] и ЭКИЛ [2], приведенных в таблице 1. В работе [2] использовались два устойчивых резонатора, установленные друг за другом последовательно по потоку. Здесь рассматривается только первый из них.

Актуальность представления η как функции критериев подобия обоснована в [3]. Критерий γ_d устанавливает, оптимально ли подобрано время пребывания газовой смеси в резонаторе при заданном темпе кинетических потерь Λ . Эффективность резонатора η_{extr} при заданном уровне оптических потерь μ определяет, правильно ли подобран баланс между энергией, выводимой из резонатора, и энергией, остающейся в активной среде.

На рисунках 1 и 2 приведены двумерные зависимости энергетической эффективности ХКИЛ [1] и ЭКИЛ [2]: в первом случае (рисунок 1) – в виде функции безразмерных критериев подобия γ_d и η_{extr} , а во втором случае (рисунок 2) – в виде функции размерных параметров: времени пребывания потока в резонаторе t_d и коэффициента пропускания зеркал t_r .

Начало области эффективных режимов генерации, обозначенной красным цветом на графиках, на рисунке 1 соответствует $\gamma_d \approx 4$ при оптимальной эффективности резонатора $\eta_{extr} \approx 0,9$. Ширина этой области определяется значениями Λ и μ . Прогнозируемое значение η отличается от достигнутого в экспериментах не более, чем на 1% для лазеров обоих типов.

Таблица 1. Исходные данные, используемые для расчетов.

| 1. | Y_i | 2. | Y_{TH} | 3. | Λ | 4. | μ | 5. | Работа |
|-----|-------|-----|----------|-----|-----------|-----|-------|-----|--------|
| 6. | 0,56 | 7. | 0,18 | 8. | 0,003 | 9. | 0,016 | 10. | [1] |
| 11. | 0,13 | 12. | 0,03 | 13. | 0,003 | 14. | 0,008 | 15. | [2] |

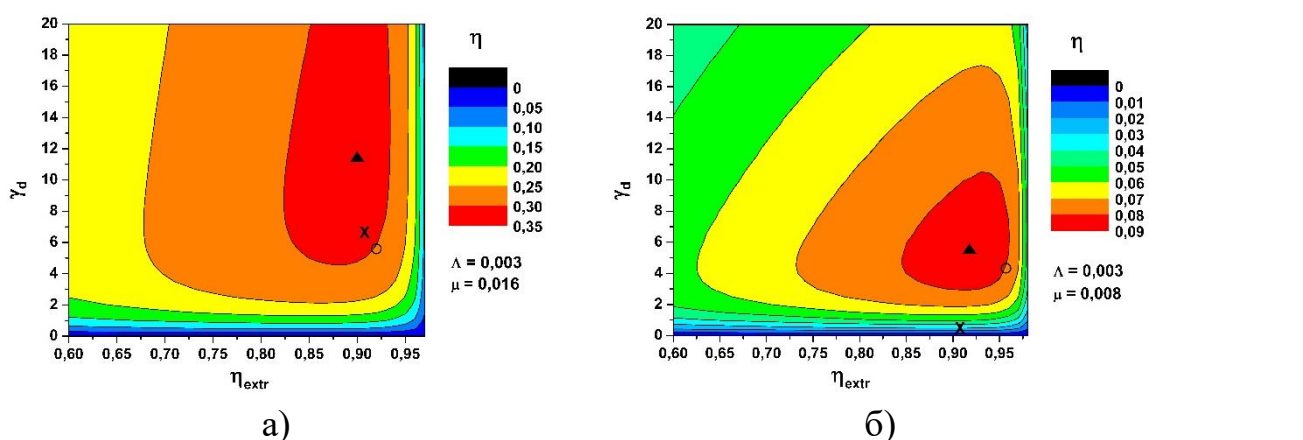


Рис. 1. Зависимости энергетической эффективности непрерывных КИЛ с различными типами накачки как функции критериев подобия γ_d и η_{extr} : а – ХКИЛ [1], б – ЭКИЛ [2]

(▲ – наиболее эффективный режим генерации по методу картирования;
 ○ – значение, полученное методом оценки;
 × – экспериментально достигнутое значение)

Оптимальное время пребывания активной среды в резонаторе составляет десятые доли миллисекунд как для околозвукового ХКИЛ [1], так и для сверхзвукового ЭКИЛ [2] (рисунок 2). При этом коэффициент пропускания, соответствующий расчетному максимуму энергетической эффективности согласно методу картирования, находится в диапазоне от 1 до 1,5%.

Значения критериев подобия γ_d и η_{extr} , полученные методом оценки, близки к оптимальным, найденным согласно методу картирования. Результаты расчетов свидетельствуют, что при экстремально низких кинетических и оптических потерях энергетическую эффективность КИЛ

можно незначительно повысить, работая с более коротким резонатором (либо на более высоких скоростях потока) и при более высоком пропускании зеркал.

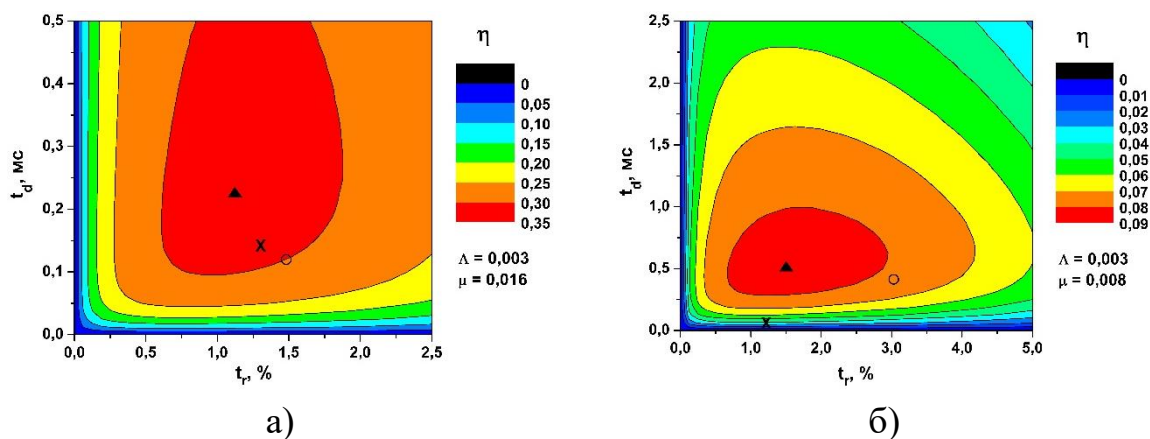


Рис. 2. Зависимости энергетической эффективности непрерывных КИЛ с различными типами накачки как функции размерных параметров t_d и t_r :

а – ХКИЛ [1], б – ЭКИЛ [2]

(▲ – наиболее эффективный режим генерации по методу картирования;

○ – значение, полученное методом оценки;

× – экспериментально достигнутое значение)

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе двухуровневой модели генерации, учитывающей наиболее значимые кинетические и оптические потери, разработаны методы картирования режимов работы непрерывных КИЛ с различными типами накачки и оценки их предельных выходных характеристик. Прогнозирование энергетической эффективности в рамках обоих методов осуществляется на основе функциональных зависимостей величины η от двух безразмерных критериев подобия: γ_d , выражающего отношение времени пребывания газа в резонаторе к характерному времени извлечения энергии синглетного кислорода, и эффективности резонатора η_{extr} ; либо от двух размерных параметров: времени пребывания потока в резонаторе t_d и суммарного коэффициента пропускания зеркал t_r . Сравнительный анализ результатов расчетов и экспериментов доказывает применимость этих методов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. I.O. Antonov, V.N. Azyazov, A.V. Mezhenin, G.N. Popkov, N.I. Ufimtsev, Chemical oxygen-iodine laser with CO₂ buffer gas. // Appl. Phys. Lett., 2006, v. 89, № 5, p. 051115.
2. D.L. Carroll, B.S. Woodard, G.F. Benavides, J.W. Zimmerman, A.D. Palla, J.T. Verdeyen, W.C. Solomon, Super-linear enhancement of the electric oxygen-iodine laser. // Proceedings of SPIE, 2013, v. 8677, p. 867702.
3. A.V. Mezhenin, E.I. Kharisova, Output characteristics comparison for cw OIL with different pumping types. // Proceedings of SPIE, 2019, p. 11042.
4. A.V. Mezhenin, V.N. Azyazov, Analysis of cw oxygen-iodine laser performance using similarity criteria. // IEEE J. Quantum Electron., 2013, v. 49, № 9, p. 739-746.
5. А.В. Меженин, Э.И. Харисова, Прогнозирование энергетических характеристик непрерывного кислородно-иодного лазера с разными типами накачки. // Известия Самарского научного центра Российской академии наук, 2019, т. 21, № 4, с. 54-62.

CW OXYGEN-IODINE LASERS POWER EFFICIENCY CALCULATION USING SIMPLIFIED GENERATION MODELS

A.D. Kapitonov¹, A.V. Mezhenin¹

*¹Samara National Research University,
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)
e-mail: alex13k92@mail.ru*

Based on a two-level generation model taking into account kinetic and optical losses, the power efficiency calculation for cw oxygen-iodine lasers pumped by two types has been conducted. Effective generation modes have been determined by two methods – mapping and estimation, developed using dimensionless similarity criteria (relative active medium residence time in the cavity and the extraction efficiency of the resonator) and dimensional parameters (flow residence time in the cavity and mirror transmittance).

Keywords: oxygen-iodine laser, cw generation, power efficiency, similarity criterion.

ГЕНЕРИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННЫХ ОПТИЧЕСКИЙ ВИХРЕЙ С ПОМОЩЬЮ СЛОИСТЫХ МЕТАЛЛОДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СТРУКТУР

А.И. Кашапов^{1,2}, Е.А. Безус^{1,2}, Д.А. Быков^{1,2}, Л.Л. Досколович^{1,2}

¹*Институт систем обработки изображений РАН — филиал федерального государственного учреждения «Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук»
(443001, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 151)*

²*Самарский национальный исследовательский университет имени академика С. П. Королёва
(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)
e-mail: ar.kashapov@outlook.com*

Рассмотрены оптические свойства трёхслойной структуры «металл-диэлектрик-металл» (МДМ-структуры), состоящей из двух металлических слоёв, разделенных диэлектрическим слоем. Показано, что такая МДМ-структура в отражении может формировать пространственно-временной оптический импульс, содержащий оптический вихрь. Полученные результаты могут найти применение при создании систем аналоговых оптических вычислений и оптической обработки информации.

Ключевые слова: резонансная структура, металлодиэлектрическая система слоев, оптическое дифференцирование.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы наблюдается большой интерес к разработке компактных структур нанофотоники для дифференцирования оптических сигналов, а также для реализации более сложных дифференциальных операторов. Указанные дифференцирующие структуры являются перспективными в задачах обработки информации в режиме реального времени [1, 2].

Преобразование оптического сигнала, происходящее при его отражении или прохождении через дифракционную структуру, может быть описано как преобразование сигнала линейной системой, у которой передаточная функция (ПФ) задается коэффициентом отражения или

пропускания структуры, рассматриваемым как функция угловой и/или пространственной частоты [2]. В частности, выполнение операции оптического дифференцирования во времени соответствует в Фурье-пространстве умножению спектра падающего импульса на $-i\omega$, где ω – угловая частота. Аналогичным образом, в случае пространственного дифференцирования пространственный спектр падающего пучка умножается на $ik_{x,0}$, где $k_{x,0}$ – пространственная частота (тангенциальная компонента волнового вектора падающей волны). Таким образом, ПФ идеального дифференциатора имеет нуль на центральной частоте (угловой или пространственной). В этой связи необходимым условием для оптического дифференцирования является наличие нуля в спектре отражения или пропускания дифракционной структуры.

В настоящее время пространственно-временные оптические импульсы, содержащие оптический вихрь, являются предметом интенсивных исследований [3-6]. При этом формирование таких импульсов с помощью простых и компактных структур нанофотоники представляет большой интерес [7].

В недавней работе авторов настоящей статьи было показано, что простая трёхслойная структура металл-диэлектрик-металл (МДМ-структура) позволяет в отражении реализовать вычисление первой производной по пространственной переменной или во времени [8]. При этом было строго показано, что в спектре МДМ-структуры всегда можно получить нуль отражения за счет выбора толщин металлических и диэлектрического слоев. Отметим, что, в отличие от дифференциаторов в [9, 10], МДМ-структура не требует призмы для ввода излучения и поэтому является существенно более компактной.

Результатом настоящей работы является теоретическое и численное исследование возможности применения МДМ-структуры для формирования пространственно-временных оптических импульсов, содержащих оптический вихрь.

2. ГЕОМЕТРИЯ СТРУКТУРЫ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Исследуемая структура (Рис. 1) состоит из верхнего металлического слоя (толщина $h_{m,1}$, показатель преломления n_m), диэлектрического слоя

(толщина h_d , показатель преломления n_d) и нижнего металлического слоя (толщина $h_{m,2}$, показатель преломления n_m). Показатели преломления сред над и под структурой равны n_{sup} и n_{sub} соответственно.

Для случая, когда на структуру падает плоская волна с единичной амплитудой и некоторой фиксированной поляризацией (ТЕ или ТМ) под углом θ_0 , в работе [8] с использованием модели многолучевой интерференции было получено выражение для коэффициента отражения в виде

$$R = \frac{r_1 - e^{2ik_{z,0}h_d} \rho(r_1 r_2 - t^2)}{1 - r_2 \rho e^{2ik_{z,0}h_d}}, \quad (1)$$

где r_1 , r_2 – комплексные коэффициенты отражения верхнего металлического слоя для плоских волн, падающих на слой сверху из области над структурой и снизу со стороны диэлектрического слоя, t – коэффициент пропускания верхнего металлического слоя, ρ – коэффициент отражения нижнего металлического слоя, $k_{z,0} = \sqrt{k_0^2 n_d^2 - k_{x,0}^2}$ – z -компонента волнового вектора отраженной от нижнего слоя плоской волны в диэлектрическом слое.

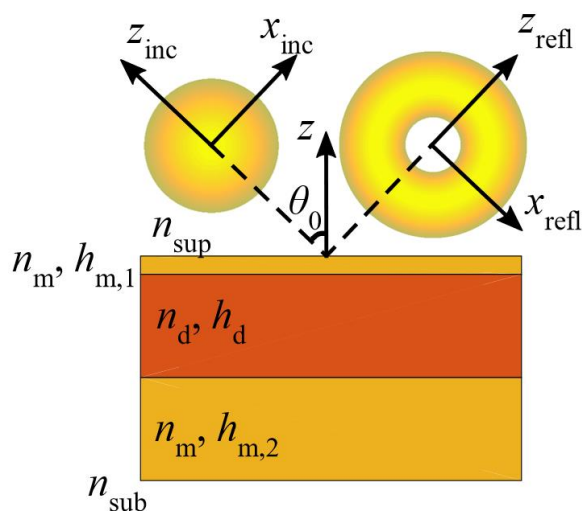


Рис. 1. Геометрия МДМ-структуры и схематичное изображение формирования пространственно-временного оптического импульса, содержащего оптический вихрь

В работе [8] также было получено, что в спектре отражения МДМ-структуры всегда можно получить нулевое отражение за счет выбора толщины металлического слоя $h_{m,1}$ и толщины диэлектрического слоя h_d .

3. ФОРМИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКОГО ВИХРЯ ДИФРАКЦИОННОЙ СТРУКТУРОЙ

Рассмотрим сначала пространственно-временное преобразование двумерного импульса, происходящее при отражении от дифракционной структуры. Будем считать, что оптический импульс имеет центральную частоту $\omega = \omega_0$ и падает на структуру под углом θ_0 . Аналогично [7], предположим, что оптический импульс, падающий на дифракционную структуру, имеет гауссову огибающую (в пространственно-временных координатах (x, t))

$$E_{inc}(x_{inc}, t) = \exp(-x_{inc}^2 / \sigma_x^2 - t^2 / \sigma_t^2). \quad (2)$$

В этом случае спектр огибающей также имеет вид гауссовой функции [9]:

$$G(k_{x,inc}, \omega_{inc}) = \frac{\sigma_x \sigma_t}{4\pi} \exp\left(-\frac{\sigma_x^2 k_{x,inc}^2}{4} - \frac{\sigma_t^2 \omega_{inc}^2}{4}\right). \quad (3)$$

При отражении импульса от структуры амплитуды $G(k_{x,inc}, \omega_{inc})$ плоских волн, составляющих падающий импульс, умножаются на коэффициент отражения $R(k_x, \omega_{inc} + \omega_0)$, где k_x – x -компонента волнового вектора падающей волны, имеющей в системе координат (x_{inc}, z_{inc}) величину $k_{x,inc}$:

$$k_x = k_{x,inc} \cos \theta_0 + k_{z,inc} \sin \theta_0 = k_{x,inc} \cos \theta_0 + \sin \theta_0 \sqrt{\left(\frac{\omega_{inc} + \omega_0}{v}\right)^2 - k_{x,inc}^2}. \quad (4)$$

Таким образом, преобразование пространственно-временной огибающей $E_{inc}(x_{inc}, t) \rightarrow E_{refl}(x_{refl}, t)$, происходящее при отражении импульса от структуры, соответствует преобразованию сигнала $E_{inc}(x_{inc}, t)$ линейной системой с передаточной функцией (ПФ) [9]

$$\begin{aligned}
H_{st}(k_{x,inc}, \omega_{inc}) &= R(k_x, \omega_{inc} + \omega_0) = \\
&= R(k_{x,inc} \cos \theta_0 + \sin \theta_0 \sqrt{\left(\frac{\omega_{inc} + \omega_0}{v}\right)^2 - k_{x,inc}^2}, \omega_{inc} + \omega_0).
\end{aligned} \tag{5}$$

Если в качестве дифракционной структуры используется МДМ-структура, имеющая нуль отражения при $\omega = \omega_0$ и $k_x = k_{x,0}$, то ПФ (5) может быть записана в виде

$$H_{st}(k_{x,inc}, \omega_{inc}) = c_{x,1} k_{x,inc} + c_{t,1} \omega_{inc} + O[k_{x,inc}^2 + \omega_{inc}^2]. \tag{6}$$

Главные линейные члены разложения в (6) пропорциональны ПФ идеальных дифференциаторов по пространственной переменной ($H_{id,s}(k_{x,inc}) = ik_{x,inc}$) и во времени ($H_{id,t}(\omega_{inc}) = -i\omega_{inc}$). Соответственно, структура с ПФ (6) реализует следующую операцию пространственно-временного дифференцирования 1-го порядка:

$$\begin{aligned}
E_{refl}(x_{inc}, t) &= -ic_{x,1} \frac{\partial E_{inc}(x_{inc}, t)}{\partial x_{inc}} + ic_{t,1} \frac{\partial E_{inc}(x_{inc}, t)}{\partial t} = \\
&= 2i \exp\left(-\frac{x_{refl}^2}{\sigma_x^2} - \frac{t^2}{\sigma_t^2}\right) \left(\frac{c_{x,1}}{\sigma_x^2} x - \frac{c_{t,1}}{\sigma_t^2} t\right).
\end{aligned} \tag{7}$$

Из (7) легко видеть, что если $\psi = \arg(c_{x,1}/c_{t,1}) = \pm \pi/2$ и $|c_{t,1}\sigma_x|/|c_{x,1}\sigma_t| = 1$, то в нормированных координатах $\tilde{x} = x_{refl}/\sigma_x$, $\tilde{t} = t/\sigma_t$ пространственно-временной профиль огибающей отраженного импульса содержит оптический вихрь:

$$E_{refl}(\tilde{x}, \tilde{t}) = 2i \frac{c_{x,1}}{\sigma_x} \exp(-\tilde{x}^2 - \tilde{t}^2) (\tilde{x} \pm i\tilde{t}). \tag{8}$$

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В настоящем разделе рассмотрим пример структуры, обеспечивающей нуль в спектре отражения для падающего ТЕ-поляризованного импульса с центральной длиной волны $\lambda = 630$ нм ($\omega_0 = 2.9899 \times 10^{15}$ с⁻¹) под углом $\theta_0 = 65^\circ$ и формирующей в отражении «пространственно-временной» оптический вихрь. Стоит отметить, что структура была рассчитана таким образом, чтобы выполнялось соотношение между коэффициентами

разложения ПФ (6): $\arg(c_{x,1}/c_{t,1}) = -\pi/2$. В качестве материалов металлических и диэлектрического слоёв исследуемой МДМ-структуры были использованы золото (Au) и фосфид галлия (GaP) соответственно, а в качестве материалов подложки и области над структурой – диоксид кремния (SiO₂) и воздух (свободное пространство). Толщины слоёв исследуемой МДМ-структуры, перечисленные сверху вниз, составляют [5.3, 30.0, 30.0] нм.

На рис. 2 показаны численно рассчитанные амплитуда (рис. 2а) и фаза (рис. 2б) огибающей отраженного пространственно-временного оптического импульса с Гауссовой огибающей (2), где $\sigma_x = 7$ мкм и $\sigma_t = 270$ фс. Нормированное среднеквадратическое отклонение амплитуд рассчитанной огибающей (рис. 2а)) и модельной огибающей (7) составляет всего 0.9%. Таким образом, рассчитанная МДМ-структура с высокой точностью реализует операцию пространственно-временного дифференцирования (7), а также обеспечивает формирование «пространственно-временного» оптического вихря.

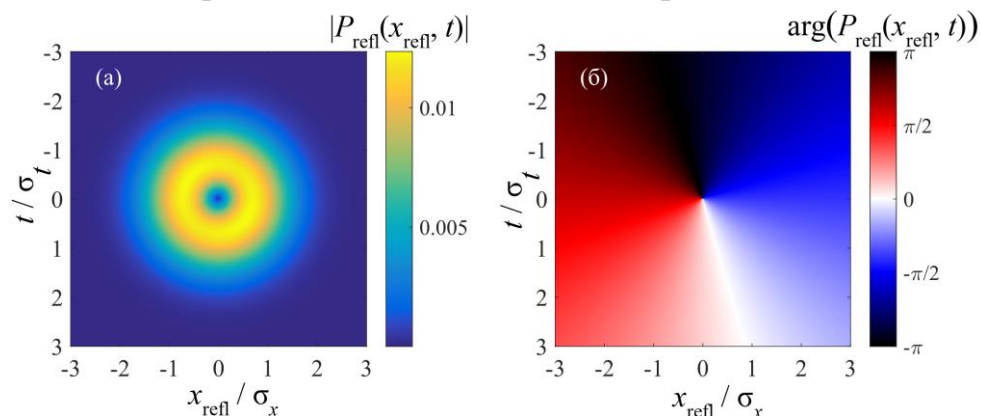


Рис. 2. Амплитуда (а) и фаза (б) пространственно-временной огибающей импульса, сформированного при отражении гауссового импульса ($\sigma_x = 7$ мкм и $\sigma_t = 270$ фс) от МДМ-структуры

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрены условия формирования «пространственно-временного» оптического вихря дифракционными структурами. В рамках численного моделирования показано, что операция пространственно-временного дифференцирования первого порядка реализуется с высоким качеством (при среднеквадратичной ошибке менее 1%). При этом показано,

что простая трехслойная МДМ-структура позволяет формировать «пространственно-временные» оптические вихри.

Полученные результаты могут найти применение при создании систем аналоговых оптических вычислений и оптической обработки информации.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 19-19-00514) в части исследования МДМ-структур и Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (государственное задание ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН) в части реализации моделирующего программного обеспечения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. A. Silva, F. Monticone, G. Castaldi, V. Galdi, A. Alù, N. Engheta, Performing Mathematical Operations with Metamaterials. // *Science*, 2014, v. 343, p. 161–163.
2. Y. Zhou, H. Zheng, I.I. Kravchenko, J. Valentine, Flat optics for image differentiation. // *Nat. Phot.*, 2020, v. 14, p. 316–323.
3. A. Chong, C. Wan, J. Chen and Q. Zhan, Generation of spatiotemporal optical vortices with controllable transverse orbital angular momentum. // *Nat. Phot.*, 2020, v. 14, p. 350–354.
4. K.Y. Bliokh, Spatiotemporal Vortex Pulses: Angular Momenta and Spin-Orbit Interaction. // *Phys. Rev. Lett.*, 2021, v. 126, Art. No. 243601.
5. S.W. Hancock, S. Zahedpour, A. Goffin, and H.M. Milchberg, Free-space propagation of spatiotemporal optical vortices. // *Optica*, 2019, v. 6, p. 1547–1553.
6. N. Jhajj, I. Larkin, E.W. Rosenthal, S. Zahedpour, J.K. Wahlstrand, and H.M. Milchberg, Spatiotemporal Optical Vortices. // *Phys. Rev. X*, 2016, v. 6, Art. No. 031037.
7. J. Huang, J. Zhang, T. Zhu, Z. Ruan, Spatiotemporal Differentiators Generating Optical Vortices with Transverse Orbital Angular Momentum and Detecting Sharp Change of Pulse Envelope. // *Laser Phot. Rev.*, 2022, Art. No. 2100357.
8. A.I. Kashapov, L.L. Doskolovich, E.A. Bezus, D.A. Bykov, V.A. Soifer, Spatial differentiation of optical beams using a resonant metal-dielectric-metal structure. // *J. Opt.*, 2021, v. 23, Art. No. 023501.

9. N.V. Golovastikov, L.L. Doskolovich, E.A. Bezus, D.A. Bykov, V.A. Soifer, An optical differentiator based on a three-layer structure with a W-shaped refractive index profile. // J. Exp. Th. Phys., 2018, v. 127, p. 202–209.
10. J Zhang, Q. Ying, and Z. Ruan, Time response of plasmonic spatial differentiators. // Opt. Lett., 2019, v. 44, p. 4511-4514.

GENERATION OF SPATIOTEMPORAL OPTICAL VORTICES USING METALL-DIELECTRIC-METALL STRUCTURES

A.I. Kashapov^{1,2}, E.A Bezus^{1,2}, D.A Bykov^{1,2}, L.L Doskolovich^{1,2}

*¹Image Processing Systems Institute — Branch of the Federal Scientific Research Centre “Crystallography and Photonics”
of Russian Academy of Sciences*

(151 Molodogvardeyskaya Street, Samara 443001, Russia)

²Samara National Research University,

(34 Moskovskoye shosse, Samara 443086, Russia)

e-mail: ar.kashapov@outlook.com

The optical properties of a three-layer metal-dielectric-metal structure (MDM-structure) consisting of two metal layers separated by a dielectric layer are considered. It is shown that such an MDM-structure in reflection can form a spatiotemporal optical vortex. The obtained results may find application in the creation of analog optical computing and optical information processing systems.

Keywords: resonant structure, metal-dielectric multilayers, optical differentiation.

РЕШЕНИЕ ЭКСТРЕМАЛЬНЫХ ЗАДАЧ С ПОМОЩЬЮ КВАНТОВОГО КОМПЬЮТЕРА

А.И. Ковалёв¹

¹*Самарский национальный исследовательский университет,*

(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)

email: anatolykovalev22041870@gmail.com

В настоящей статье предложены решения оптимальных алгоритмов на квантовом компьютере. Кратко описаны логические принципы работы бита и кубита.

Ключевые слова; Квантовые компьютеры, оптимальные алгоритмы спутанность, квантовая оптика.

1. ВВЕДЕНИЕ.

Квантовые компьютеры в последнее время всё больше привлекают внимание физиков. Активно развивается как изучение процессов, лежащих в основе работы квантовых компьютеров, так и рассматривается вопрос о создании программного обеспечения для них. Однако несмотря на старания и внимание учёных к этой проблеме больших успехов удалось добиться в области передачи и кодирования информации с помощью квантовой спутанности [1], нежели в создании конкретных алгоритмов для решения, например, экстремальных задач. Подробнее о достижениях в области вычислений на квантовых компьютерах можно ознакомиться в статье [2]. Вычислительная техника имеет большой спрос в планировании хозяйства для принятия оптимальных решений. Этот класс задач породил новые дисциплины - линейное и нелинейное программирование, которые изучают вопрос о нахождении оптимумов в линейных и нелинейных системах. С появлением квантовых компьютеров появилась возможность делать вычислительные устройства, передающие информацию на квантовом уровне. Но вместе с тем появились и новые сложности. При спутанности кубитов информации сложно вычленить отдельные элементы памяти. Что приводит к тому, что на данный момент не существует квантового компьютера, способного считать элементарные арифметические операции, как сложение или умножение [3]. Эти обстоятельства наводят на мысль;

Выделить класс задач, для которых решение на квантовом компьютере будет иметь больше практической пользы, чем на компьютерах с логическими элементами. Примером такой задачи будет выступать транспортная задача.

2. СРАВНЕНИЕ АЛГОРИТМОВ ВЫЧИСЛЕНИЯ НА ЭВМ И КВАНТОВЫХ КОМПЬЮТЕРАХ

Принцип работы современных компьютеров основан на машине Тьюринга и её более простом аналоге - машине Поста. Машина Тьюринга это абстрактная математическая модель, которая состоит из двух деталей; бесконечной ленты, некоторые ячейки которой заполнены символами, лежащими во множестве символов алфавита и активной части машины - автомата, который способен выполнять за такт только одно действие из трёх возможных; 1) Записать на видимой клетке новый символ, 2) сдвинуться влево, вправо, остаться на месте, 3) Переходить в некоторое состояние q . Работа машины Тьюринга тактами нужна для того, чтобы составляя программу можно было упорядочить действия, и пошагово восстановить и проследить цепочку преобразований в ходе выполнения алгоритма. Однако машине Тьюринга для того, чтобы начать выполнять какие-либо действия необходимо чтобы на автомат подали программу с алгоритмом действий. Обычно её записывают, как таблицу, представленную на рис. 1. В таблице по столбцам указаны элементы алфавита [4]. В строках записаны состояния, в которых может находиться автомат. Как только в видимой клетке появляется символ S_j в зависимости от текущего состояния q_i автомат переходит в конфигурацию, находящейся в соответствующей ячейке таблицы. Для машины Поста чаще всего программа представляет из себя последовательность действий, преобразующих входное слово. Поэтому принцип работы машины Поста больше похож на процесс вычисления на ЭВМ.

| | | | | | | | |
|-------|-------|-------|-----|---------------------|-----|-------|-----------|
| | S_1 | S_2 | ... | S_i | ... | S_n | Λ |
| q_1 | | | | | | | |
| ... | | | | | | | |
| q_i | | | | $S', [L, R, N], q'$ | | | |
| ... | | | | | | | |
| q_m | | | | | | | |

Рис. 1. Таблица, иллюстрирующая общий вид программы, исполняемой машиной Тьюринга.

Любой алгоритм, исполняемый на ЭВМ с логическими элементами можно представить как работу машины Тьюринга с заданной программой [5].

Единой математической модели, описывающей построение программ и их исполнение на квантовом компьютере пока не существует. Если принцип работы бита основан на том факте, что бит может находиться строго в одном из двух энергетически измеримых состояниях, то кубит помимо них имеет суперпозиционное состояние [6];

$$|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \text{ где } |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (1)$$

При считывании кубитов должен быть получен конкретный результат, но пока информация с системы кубитов не считана, они одновременно хранят все возможные состояния, в которых могут находиться [1]. Если требуется сложить два числа. И при этом для записи числа выделяется 3 кубита, которые могут находиться в основном состоянии $|0\rangle$ и возбуждённом $|1\rangle$. Пусть первый кубит находится в основном состоянии, а все остальные находятся в суперпозиции. Тогда волновая функция будет иметь следующий вид;

$$|\Psi\rangle = \alpha_0|000\rangle + \alpha_1|001\rangle + \alpha_2|010\rangle + \alpha_3|011\rangle \quad (2)$$

где для $\alpha_i, i = 0...3$ справедлива нормировка $\sum_{i=0}^3 |\alpha_i|^2 = 1$. Т.е. получены возможные варианты двоичной записи следующих чисел;

$$\theta_1 = \{0, 1, 2, 3\}. \text{ Теперь, если первый кубит приведён в возбуждённое состояние, то } |\Psi\rangle = \alpha_0|100\rangle + \alpha_1|101\rangle + \alpha_2|110\rangle + \alpha_3|111\rangle \quad (3)$$

т.е. теперь волновая функция описывает двоичные записи следующих чисел; $\theta_2 = \{4, 5, 6, 7\}$. И в результате этой процедуры получены два множества, являющихся изоморфизмами для отображения; $\varphi \rightarrow \varphi + 4$. Т.е. таким образом в квантовом компьютере складываются два числа. Но в практических задачах зачастую не нужны возможные варианты ответа, а необходим конкретный ответ. Как же вывести конкретный ответ на поставленную задачу? Произвести на ЭВМ обратное действие и таким образом выбрать из множества верный ответ. Поэтому квантовые компьютеры имеют большой спрос в тех областях науки, где проверить возможные варианты проще, чем решать задачу напрямую.

Пусть в начальный момент на квантового регистре из 3 кубитов была конфигурация, изображённая на рис. 2 первый кубит находится в основном состоянии, два остальных в суперпозиции. устройстве хранится $\theta_1 = \{0, 1, 2, 3\}$.

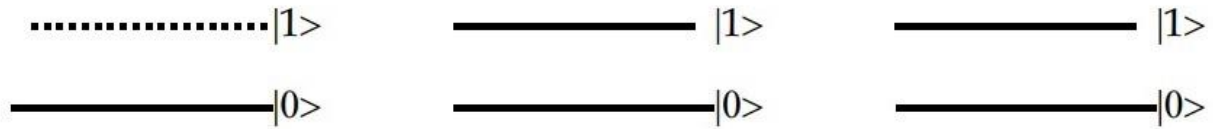


Рис. 2. Регистр с первым кубитом в основном состоянии и вторым, третьим в суперпозиции

Потом перестаём действовать на первый кубит, и теперь он находится в суперпозиции, устройство теперь действует на последний кубит так, что он находится в основном состоянии (рис. 3).

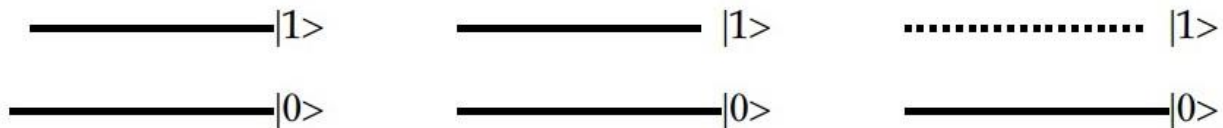


Рис. 3. Регистр с третьим кубитом в основном состоянии и первым, вторым в суперпозиции

В данном состоянии память компьютера одновременно хранит двоичный код для чисел; 0, 2, 4, 6. Т.е. получен изоморфизм множества θ_1 для отображения $\varphi \rightarrow 2\varphi$.

3. РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ НА ОПТИМУМ ДЛЯ КВАНТОВЫХ КОМПЬЮТЕРОВ.

Одна из задач, где нужно получить не столько конкретный ответ, а некоторое множество возможных вариантов - транспортная задача. Как уже было упомянуто; не существует единой математической интерпретации вычислений, выполняемых на квантовом компьютере, и последующее описание решения задачи лишь предположение о возможной реализации алгоритма. Постановка задачи; Есть некоторое множество $\Omega_1 = \{\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n\}$ - множество поставщиков некоторого продукта, причем ω_i производит его в μ_i количестве условных единиц. Также есть некоторое множество потребителей $\Omega_2 = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_m\}$. При этом затраты на

перевозку условной единицы продукта из ω_i в σ_j являются элементом матрицы \mathbf{A} (a_{ij}), вместе с тем цена за условную единицу товара, купленного j -ым потребителем определяется соответствующим элементом (b_j) вектора \mathbf{B} . Поставщикам от потребителей поступают заявки на объём товара в некотором диапазоне $d_{ij}^{min} \leq d_{ij} \leq d_{ij}^{max}$. Необходимо отыскать такое распределение продукта, при котором суммарная прибыль поставщиков является максимальной - это есть целевая функция транспортной задачи.

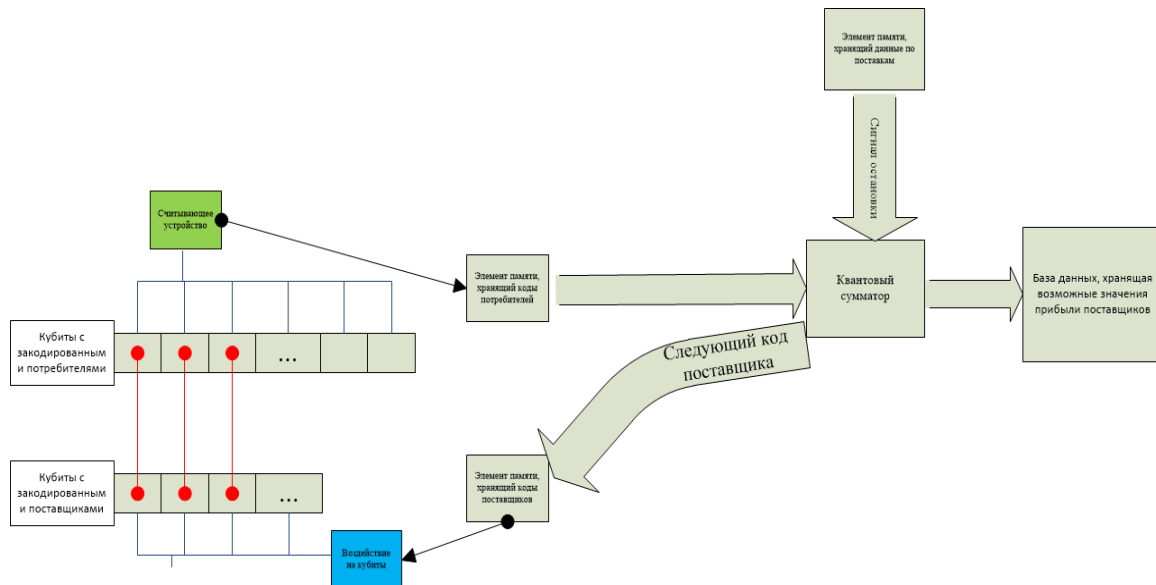


Рис. 4. Блок-схема алгоритма решения транспортной задачи на квантовом компьютере.

Стоит упомянуть, что это не единственная формулировка транспортной задачи. Пусть каждому поставщику дан некий двоичный код, а для записи двоичного кода потребителя используются другие кубиты, которые находятся в спутанном состоянии с кубитами, на которых записаны поставщики (Рис. 4). Запишем волновую функцию таких спутанных кубитов.

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle_1 |1\rangle_2 - |1\rangle_1 |0\rangle_2) \quad (4)$$

Такого рода спутанные состояния можно получить, например, при двухфотонных переходах атома из возбуждённого в основное состояние, а

их поляризацию будем считать суперпозицией вертикальной и горизонтальной составляющей, тогда (4) переписывается в следующем виде;

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\leftrightarrow\rangle_1 |\updownarrow\rangle_2 - |\updownarrow\rangle_1 |\leftrightarrow\rangle_2) \quad (5)$$

Прибором для воздействия на фотоны будет являться светоделитель [1]. При запутывании кубитов попытаемся подобрать такие коды, что при считывании поставщиков, получалось некоторое подмножество потребителей, которые отправляли заявки на поставку сырья. В связи с особенностями кодирования квантовой информации это, конечно, не всегда возможно. Но об обходе этого ограничения будет указано ниже. Для количества произведённого сырья μ_i выделяем память на некотором стороннем устройстве. Воздействуя на кубиты, в которых закодированы поставщики, получаем код конкретного поставщика, одновременно с этим, считываем кубиты, в которых кодировали множество Ω_2 , теперь, если при считывании кубитов, получен код потребителя, который отправлял заявку данному поставщику, то отправляем об этом сигнал на квантовый сумматор (Рис. 4). На нём мы будем проводить вычисления для подсчёта выгоды поставщика, как

$$A_i = \sum_{j=0}^m d_{ij}(b_j - a_{ij}) \quad (6)$$

Как только в результате расчётов минимально возможное значение объёма поставок превысит μ_i , на хранилище данных с кодами поставщиков подаётся сигнал о переходе на следующего поставщика. При этом, считывающее устройство квантового сумматора записывает полученные результаты в базу данных (рис. 4). После окончания работы устройства в базе данных хранится некоторый диапазон возможных значений максимальной выручки для каждого поставщика. И на ЭВМ ведётся проверка возможных значений, которые получил квантовый компьютер. Так как каждый потребитель отправил заявки поставщикам в некотором диапазоне независимо от объёмов поставок остальных поставщиков, то максимальная прибыль всех поставщиков будет суммой максимальных прибылей каждого поставщика. Что значительно упростит решение поставленной задачи при проверке возможных значений на ЭВМ. Безусловно, алгоритм исполнения данной программы можно решить используя алгоритмы с надёжным шагом [8]; Каждому i -ому поставщику

для получения максимальной выгоды придётся продать как можно больше продукта j -ому потребителю, для которого величина $b_j - a_{ij}$ максимальна. И этот факт значительно бы снизил как время исполнения алгоритма, так нагрузку на память. Но для каждого метода оптимизации нам бы пришлось по-разному переделывать не только алгоритм, но записывать разные данные в память. Также, устройство возможно усовершенствовать, если, вместо сигналов, подаваемых на различные устройства хранения памяти использовать спутанные состояния между более чем 2-мя фотонами, которые можно получить в нелинейных кристаллах при спонтанно параметрическом рассеянии, или в нелинейных волноводах [7].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ.

Таким образом, в данной работе рассмотрены физические процессы в квантовых вычислениях и предложена теоретическая модель квантового компьютера, вычисляющего возможные диапазоны значений целевой функции в транспортной задаче.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Е.В. Ильичёв, Я.С. Гринберг. «Квантовая информатика и квантовые биты на основе сверхпроводниковых Джозефсоновских структур» Новосибирск: НГТУ, 2013 г.
2. Lindsay Bassman Oftelie, Katherine Klymko, Diyi Liu, Norm M. Tubman, Wibe A. de Jong, Computing Free Energies with Fluctuation Relations on Quantum Computers// Physical review letters, 2022 v. 129, 130603 p.
3. Mikhail I. Dyakonov, Will we ever have a quantum computer? // SPRINGER BRIEFS IN PHYSICS, 2020, p. 49
4. В.Н. Пильщикова, В.Г. Абрамов, А.А. Вылиток, И.В. Горячая, Машины Тьюринга и алгоритмы Маркова. Решение задач (учебно-методическое пособие)// - М. : МГУ, 2006. - 47 с.
5. В.А. Успенский, Машина Поста - М. : Наука - (Популярные лекции по математике) 1979, 96 с.
6. М.Х. Шульман «ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ ОПТИКИ» 2015 г.

7. А. А. Калачев, И. З. Латыпов, В. В. Самарцев, А. В. Шкаликов, Источник поляризационно-перепутанных состояний. // Материалы седьмой международной научной школы «Наука и инновации — 2012», ISSN «SI–2012». с. 55 - 60
8. И.В. Романовский, Алгоритмы решения экстремальных задач - М.: Наука, 1977, 352 с.

SOLVING EXTREME PROBLEMS USING A QUANTUM COMPUTER

A.I. Kovalev¹

¹Samara National Research University,

(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)

e-mail: anatolykovalev22041870@gmail.com

This article proposes solutions for optimal algorithms on a quantum computer. The logical principles of the operation of a bit and a qubit are briefly described.

Keywords: quantum computers, optimal algorithms, entanglement, quantum optics.

ПОВЕРХНОСТЬ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ И МОЛЕКУЛЯРНО КИНЕТИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ МЕТИНОВОГО РАДИКАЛА С МОЛЕКУЛОЙ АЦЕТОНИТРИЛА В УСЛОВИЯХ ХОЛОДНОГО КОСМОСА

Л.И. Крикунова^{1,2}, Д.П. Порфирьев^{1,2}, В.Н. Азязов^{1,2}

¹Самарский национальный исследовательский университет
им. С.П. Королёва,

(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)

²Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева РАН
(443011, г. Самара, ул. Ново-Садовая, 221)

e-mail: lubov_markova@inbox.ru

В данной работе рассмотрена реакция метинового радикала (СН) с молекулой ацетонитрила (СН₃CN). В результате взаимодействия реагентов могут образовываться как линейные, так и циклические продукты. Для всех структур найдены геометрии, частоты колебаний и значения относительной энергии на при помощи теории функционала плотности с использованием подхода ωB97xd/cc-pvtz. В рамках теории РРKM рассчитаны относительные выходы и константы скорости реакции.

Ключевые слова: ацетонитрил, метиновый радикал, теория функционала плотности, поверхность потенциальной энергии.

1. ВВЕДЕНИЕ

Повсеместно обнаруженные в космосе молекулы нитрилов способны к реакциям с образованием сложных органических соединений и в ряде случаев ведут к получению азотистых оснований – строительных блоков в цепочках ДНК [1]. Целью данной работы является поиск оптимальных путей течения реакции ацетонитрила СН₃CN с высокореакционным радикалом СН [2,3,4]. Внедрение гетероатомов приводит к так называемой активации связей углерод-углерод и углерод-водород, делая молекулу более реакционноспособной. Таким образом азотсодержащие соединения являются подходящими кандидатами для исследования в вопросе изучения химической эволюции.

2. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ И МЕТОДИКА РАСЧЕТОВ

С использованием гибридного метода теории функционала плотности ω B97xd/cc-pVTZ [5,6,7] Оптимизированы геометрии реагентов, интермедиатов, переходных состояний, и продуктов реакции, а также найдены колебательные частоты. Расчет кинетических констант и коэффициентов ветвления продуктов произведен в рамках теории Райса-Рампергера-Касселя-Маркуса (РРKM) в пределе нулевого давления [8,9]. Точность значений относительных энергий на поверхности потенциальной энергии (ППЭ) составляет 1 ккал/моль [10,11].

3. ПОВЕРХНОСТЬ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ $\text{CH}_3\text{CN}+\text{CH}$

В силу высокой реакционной способности начальные аддукты реакции образуются безбарьерно. В результате присоединения метинового радикала к атому азота молекулы ацетонитрила образуется первичный интермедиат w_1 с энергией -48,9 ккал/моль. Внедрение метинового радикала в C-N связь молекулы ведет к замыканию в трехчленный гетероцикл, с образованием первичного интермедиата w_3 с энергией -61,4 ккал/моль. Присоединение к атому углерода, ведет к перераспределению атомов водорода, и образованию первичного интермедиата w_4 с самой низкой энергией на ППЭ -96,3 ккал/моль.

Для интермедиата w_1 возможны три пути развития реакции. Самым не выгодным с точки зрения энтальпии является замыкание в цикл с образованием интермедиата w_{24} (-24,3 ккал/моль) через барьер b_3 с энергией (23,1 ккал/моль). В свою очередь от интермедиата w_{24} через b_{27} (23,4 ккал/моль) происходит отрыв атома водорода, с сопутствующим продуктом w_{26} с суммарной энергией 20,2 ккал/моль. Так же через барьер b_{60} (1,1 ккал/моль) происходит отрыв метила от w_{24} , образуется циклический продукт w_8 с общей энергией -5,1 ккал/моль. Через барьер b_{56} (-8,5 ккал/моль) w_{24} превращается в интермедиат w_{11} (-71,0 ккал/моль). Дальнейшая цепочка превращений от интермедиата w_{11} содержит большое количество шагов с относительно высокими барьерами: $w_{11} \rightarrow b_{57}$ (-20 ккал/моль) $\rightarrow w_{18}$ (-60,2 ккал/моль) $\rightarrow b_{48}$ (-11,6 ккал/моль) $\rightarrow w_{28}+\text{H}$ (-16,7 ккал/моль). Кроме того, интермедиат w_{18} через барьер b_{59} (22,0 ккал/моль) с отрывом атома водорода группы CH_2 ведет к образованию w_{45} с

суммарной энергией (21,2 ккал/моль). Для интермедиата w1 реакция может протекать с преодолением барьеров b8 (-10,4 ккал/моль) и b9 (-79,3 ккал/моль). Переход атома водорода группы CH₃ к группе CN интермедиата w1 через барьер b8 ведет к образованию интермедиата w33 (-79,3 ккал/моль). Одна из наиболее интересных цепочек превращений: w33 → b35 (-26,3 ккал/моль) → w21 (-62,9 ккал/моль) → b33 (-47,6 ккал/моль) → w42 (-75,5 ккал/моль) → b50 (-35,6 ккал/моль) ведет к получению структуры w34 с суммарной энергией -42,9 ккал/моль через отрыв атома водорода в четырехчленном гетероцикле w42. Последний путь для w1 лежит через барьер b9 (-14,0 ккал/моль), происходит перескок водорода группы CH₃ на свободный атом углерода с образованием w35 (-73,8 ккал/моль). Перескок атома водорода группы CH₂ на свободный атом углерода в интермедиате w33 через барьер b25 (-21,6 ккал/моль) так же ведет к получению w35.

Для интермедиата w35 возможно получение молекулы синильной кислоты HCN с сопутствующим радикалом CH-CH₂ (-57,2 ккал/моль) через разрыв CN связи b55 (-55,7 ккал/моль), что представляет наибольший интерес для астрохимии. Другой путь w35 → b30 (-38,7 ккал/моль) → w41 (-76,1 ккал/моль) → b42 (4,3 ккал/моль) с отрывом атома водорода от гетероцикла w41 даёт продукт w36 с суммарной энергией 3 ккал/моль. Последний путь для w35 лежит через b34 (-16,2 ккал/моль) к интермедиату w40 (-50,9 ккал/моль), откуда возможны пути: w40 → b32 (-19,9 ккал/моль) → w9 (-39,4 ккал/моль) → b29 (35,3 ккал/моль) → w34 (-42,9 ккал/моль), w40 → b51 (-13,9 ккал/моль) → w14 (-71,0 ккал/моль) → b52 (39,9 ккал/моль) → w22 (40,9 ккал/моль), w40 → b46 (-48,4 ккал/моль) → w23 (-53,4 ккал/моль) → b63 (-26,3 ккал/моль) → w14 (-71,0 ккал/моль). Эти пути возможны с преодолением высоких барьеров, что практически невозможно в условиях холодного космоса.

Для интермедиата w3, который соединен барьером b1 (-8,9 ккал/моль) с w1, открывается больше энергетически выгодных возможностей. Так в один шаг через барьер b14 (-9,6 ккал/моль) происходит отрыв радикала C-CH₃ и получение молекулы синильной кислоты, с полной энергией для w37 -9,9 ккал/моль. Так же возможно одношаговое получение продукта w28 (-16,7 ккал/моль) через барьер b16 (-13,6 ккал/моль) с отрывом атома водорода. Наиболее длинная цепочка превращений для w3 связана с разрывом цикла CCN и получением интермедиата w6 (-61,6 ккал/моль)

через барьер b11 (-8,9 ккал/моль). w6 соединен барьером b20 (-50 ккал/моль) с интермедиатом w35, возможности которого рассмотрены выше. Другие пути для w6 не представляют интереса для условий, в которых рассматривается реакция.

Для интермедиата w4 открываются два пути. Через переходный комплекс b17 (-45,4 ккал/моль) замыкается цикл с образованием w21, и через барьер b38 (-42,0 ккал/моль) образуется w42 (-75,5 ккал/моль). Возможности для w21 и w42 были рассмотрены выше. ППЭ, включающая все найденные пути представлена на рисунке 1.

4. КОНСТАНТЫ СКОРОСТИ И ВЫХОДЫ ПРОДУКТОВ РЕАКЦИИ

Расчет коэффициентов ветвления продуктов реакции и констант скоростей шагов в рамках теории РРKM производился в программном пакете Unimol. В качестве стартовых структур выбирались по-отдельности интермедиаты w1, w3 и w4, что определяется условиями поставленной задачи: при однократных столкновениях, типичных для астрохимии, безбарьерная рекомбинация метинового радикала с молекулой ацетонитрила приводит к конкретному аддукту, эволюция которого и анализируется.

1E ,
Kcal/mol

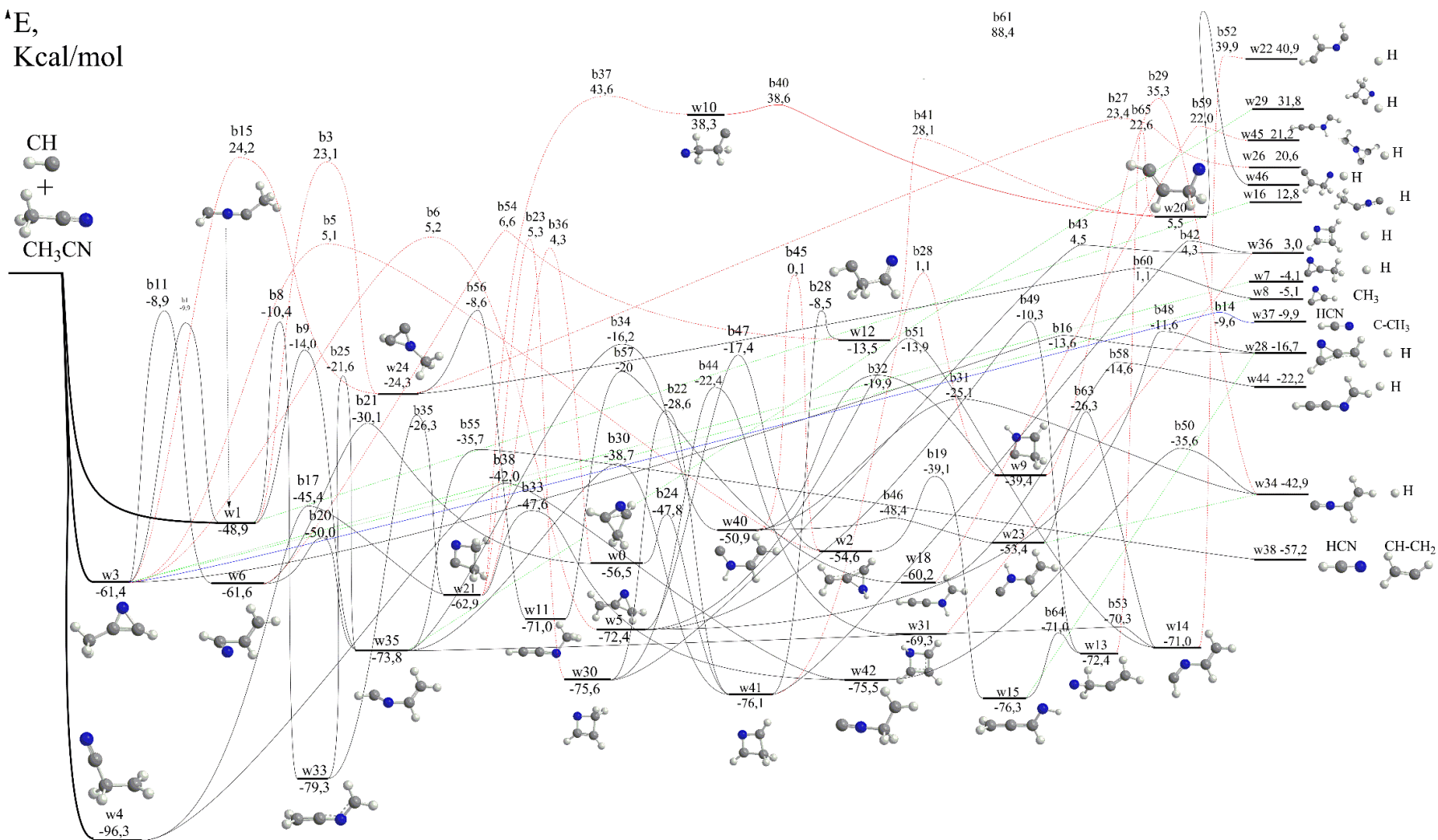
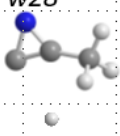
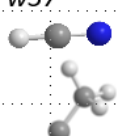
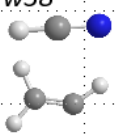


Рис. 1. Поверхности потенциальной энергии ацетонитрила с метиновым радикалом $\text{CH}_3\text{CN} + \text{CH}$

Относительные выходы продуктов реакции представлены в таблицах 1 и 2, соответственно.

Таблица 1. Относительные выходы продуктов реакции

| Продукты реакции | w28 | w37 | w38 |
|-------------------|---|--|---|
| Начальные аддукты |  |  |  |
| w1 | 5% | 8% | 85% |
| w3 | 35% | 60% | 5% |
| w4 | <1% | <1% | 99% |

При выборе интермедиата w1 и w4 основным продуктом реакции является w38, с относительной концентрацией 85-99%. Если же реализуется интермедиат w3, то преобладает продукт w37 с долей в 60%. Во всех случаях получена молекула синильной кислоты HCN.

Таблица 2. Константы скорости наиболее выгодных шагов реакции

| Шаг реакции | c^{-1} | Шаг реакции | c^{-1} | Шаг реакции | c^{-1} |
|-------------|----------|-------------|-----------|-------------|-----------|
| w21→w42 | 5.75E+12 | w40→w23 | 1.62E+12 | w0→w6 | 1.48E+11 |
| w42→w21 | 2.07E+10 | w23→w40 | 4.91E+18 | w6→w35 | 8.75E+11 |
| w21→w33 | 1.82E+10 | w40→w34 | 2.49E+11 | w35→w6 | 1.28E+11 |
| w33→w21 | 4.39E+07 | w41→w0 | 6.90E+10 | w1→w33 | 5.44E+07 |
| w33→w35 | 9.18E+07 | w0→w41 | 2.77E+12 | w33→w1 | 752366.92 |
| w35→w33 | 4.69E+08 | w41→w36 | 72321.336 | w1→w35 | 7.79E+08 |
| w35→w38 | 2.07E+12 | w4→w21 | 2.81E+08 | w35→w1 | 5.50E+07 |
| w35→w40 | 2.47E+08 | w21→w4 | 2.60E+12 | w3→w28 | 9.44E+08 |
| w40→w35 | 9.89E+09 | w4→w42 | 1.83E+09 | w3→w37 | 1.63E+09 |
| w3→w6 | 6.15E+07 | w42→w4 | 6.08E+10 | w1→w3 | 1.47E+08 |
| w6→w3 | 4.15E+07 | w6→w0 | 4.73E+09 | w3→w1 | 1.05E+08 |

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Построенная ППЭ и рассчитанные в пределе одиночных столкновений значения констант скоростей и относительных выходов свидетельствуют о преобладании линейного продукта – молекулы синильной кислоты, которая представляет интерес при изучении химических реакций в холодном

космосе. Нельзя исключать так же из рассмотрения сопутствующие радикалы, единичные столкновения с которыми также представляют интерес для астрохимии.

Научно-исследовательская работа в Самарском университете выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках гранта № 075-15-2021-597 «Происхождение и эволюция органических молекул в нашей Галактике».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. S.L. Miller, H.C. Urey, *Science journal*. 1959, 130, 245.
2. J.-C. Loison, A. Bergeat, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2009, 11, 655.
3. A.A. Nikolayev, V.N. Azyazov, R.I. Kaiser, A.M. Mebel, *J. Phys. Chem. A*. 2021, 125, 9536.
4. C. He, K. Fujioka, A.A. Nikolayev, L. Zhao, S. Doddipatla, V.N. Azyazov, A.M. Mebel, R. Sun, R.I. Kaiser, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2022, 24, 578.
5. Chai J.-D. and Head-Gordon M., Long-range corrected hybrid density functionals with damped atom-atom dispersion corrections / J.-D. Chai and M. Head-Gordon // *Physics Chemical Journal*. – 2008. – 10. – P.6615–6620.
6. J.-D. Chai and M. Head-Gordon, Systematic optimization of long-range corrected hybrid density functionals / J.-D. Chai and M. Head-Gordon // *Physics Chemical Journal*. – 2008. 128 – 084106.
7. H. Eyring, S.H. Lin, S.M. Lin, *Basic Chemical Kinetics*, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1980.
8. R.A. Marcus, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Physical and Engineering Sciences*. 1990, 332, 283.
9. Frenklach M. *Reaction Mechanism of Soot Formation in Flames* // *PCCP*. - 2002. - № 4. - P. 2028–2037.
10. R.I. Kaiser, A.M. Mebel, V.V. Kislov, S.J. Klippenstein, L.B. Harding, M.C. Liang, and Y.L. Yung. // *A crossed molecular beams study on the formation of the exotic cyanoethynyl radical in titan's atmosphere x. Gu1, / astrophysical journal V. 701, – i 2, – 2009, – p. 1797-1803*
11. X.Gu, Y.S. Kim, R.I. Kaiser, A.M. Mebel, M.C. Liang, Y.L. Yung // *Chemical dynamics of triacetylene formation and implications to the synthesis of polyynes in Titan's atmosphere* // *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* V. 106, – I. 38, – 2009, – P. 16078-16083.

**POTENTIAL ENERGY SURFACE AND MOLECULAR PARAMETERS
OF THE ACETONITRILE MOLECULE WITH METHYLIDYNE
RADICAL REACTION UNDER COLD SPACE**

L.I. Krikunova^{1,2}, D.P. Porfirev^{1,2}, V.N. Azyazov^{1,2}

*¹Samara National Research University,
(Russia, Samara, Moskovskoye shosse, 34, 443086)*

*²Lebedev Physical Institute, Samara Branch,
(Russia, Samara, Novo-Sadovaya str., 221, 443011)*

e-mail: lubov_markova@inbox.ru

The reaction of the methylidyne (CH) with the molecule of acetonitrile (CH₃CN) is considered in this study. As a result of the interaction of the reagents, linear and cyclic intermediates were obtained. For all structures, optimal geometries, vibration frequencies and potential energies were found at the level of density functional theory using the hybrid method of density functional theory ωB97xd/cc-pvtz. Relative yields and rate constants of the reaction were calculated within the framework of the RRKM theory.

Keywords: acetonitrile, methine radical, density functional theory, potential energy surface.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОРОШКОВ И СУСПЕНЗИЙ НАНОКОМПОЗИТА ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ С ГИДРОКСИАПАТИТОМ

С.Ю. Кулагина¹, Н.В. Латухина¹

¹Самарский национальный исследовательский университет,
(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)
e-mail: kulagina4@ya.ru

В данной работе исследовался наноккомпозит пористого кремния (por-Si) с гидроксиапатитом (ГАП) как основа перспективного биоматериала для остеопластики, так как использование ПК с ГАП вместе даст наиболее эффективный результат.

Была проведена проверка на растворимость наноккомпозитных материалов ПК с ГАП, а также проведено сравнение двух способов создания суспензии: механический и метод лазерной абляции.

Ключевые слова: пористый кремний, гидроксиапатит, наноккомпозиты, гравиметрический метод, лазерная абляция.

1. ВВЕДЕНИЕ

Задача лежит в области доставки гидроксиапатита к участкам кости, поврежденным в результате травмы или заболевания, с помощью пористых наночастиц [1]. Для доставки ГАП к пораженным участкам кости необходимо использовать водорастворимые транспортные пористые частицы, насыщенные веществом, так как чистый ГАП практически нерастворим в крови и плазме [2]. Целью данной работы было проверить растворимость наноккомпозита por-Si с ГАП. Гидроксиапатит является нерастворимым в биологических жидкостях веществом, а ПК растворятся в воде и других жидкостях полностью. При заполнении пор растворимого por-Si нерастворимым ГАП важно получить растворимые пористые наноккомпозитные частицы [3]. Это чрезвычайно важно для создания биоразлагаемых наноконтейнеров.

2. МЕТОДИКИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ И ИССЛЕДОВАНИЯ ОБРАЗЦОВ

Пористый кремний получали на поверхности пластин р-типа монокристаллического кремния с помощью анодного электрохимического травления в растворе HF:H₂O:C₂H₅OH [4]. Образцы с полированной и шлифованной поверхностью травились в течение 20 и 10 минут при плотности тока 10 мА/см².

Пористость пластин оценивали гравиметрическим методом [5]:

$V_{por-Si} = S \times d$ – объем пористого слоя,

где S – площадь пористого слоя, d – толщина пористого слоя

$$V_{porous} = \frac{\Delta M}{\rho_{porous}} = \frac{M_{Si} - M_{por-Si}}{\rho_{porous}} - \text{объем пор}$$

$$P = V_{porous} / V_{por-Si} - \text{пористость}$$

Толщина пористого слоя определяется с помощью фотографий скола пластин с оптического микроскопа "Neopot 21".

Для получения нанокompозитов $por-Si$ с ГАП пористый кремний насыщали раствором ГАП в спирте или в воде общей массой 33,8 мг + 1,5 мл и 1 г 638,7 мг + 1,5 мг на поверхность пластин. Избыток гидроксиапатита удаляли с поверхности пластин после полного высыхания поверхности.

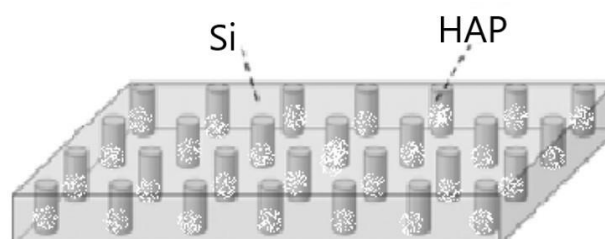


Рис. 1. Процесс насыщения ПК ГАП

Для исследования растворения образцы выдерживались в течение 1,5 месяцев в дистиллированной воде. Затем образцы высушивали и взвешивали. Растворимость образцов изучали с помощью измерения массы до и после растворения.

Образец жидкостей, полученные после растворения образца №1 с шлифованной поверхностью $por-Si$ с ГАП, высаживали на предметное стекло. После полного высыхания осадка его исследовали с помощью растрового электронного микроскопа «VEGA3 TESCAN».

Порошок нанокompозита $por-Si$ с ГАП готовили механическим измельчением пористого слоя с поверхности образца №3 с шлифованной поверхностью. Размеры частиц и элементный состав порошка изучали под растровым электронным микроскопом «VEGA3 TESCAN».

Также порошок нанокompозита $por-Si$ с ГАП готовили методом лазерной абляции - метода удаления вещества с поверхности лазерным импульсом. С помощью иттербиевого лазера (ближний ИК спектр) с источником Raucus 20W с показателями скорость 20 мм/с, частота 25 кГц, мощность 80% в воде снимался верхний слой кремния с образцов.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

В таблице 1 приведены значения параметров травления и пористости образцов. Также в этой же таблице приведены значения масс после получения нанокompозитов ПК+ГАП и убыль массы после растворения.

Таблица 1. Параметры образцов

| | Масса до травления, мг | Время травления, мг | Пористость, % | Масса после насыщения (ГАП+спирт), мг | Убыль массы после растворения, мг |
|---------------------------------|------------------------|---------------------|---------------|---------------------------------------|-----------------------------------|
| Полированная поверхность | | | | | |
| 1 | 501,0 | 20 | 3,9 | 0,20 | 0,32 |
| 2 | 506,0 | | 7,1 | 0,35 | 0,50 |
| Шлифованная поверхность | | | | | |
| 1 | 837,5 | 20 | 12,6 | 1,20 | 1,60 |
| 2 | 816,3 | | 8,8 | 0,30 | 1,42 |
| | | | | ГАП+вода | |
| 3 | 799,1 | 10 | 1,0 | 2,60 | 0,90 |
| 4 | 830,7 | | 2,4 | 2,30 | |
| 5 | 804,1 | | 2,2 | 0,90 | 1,00 |

Как видно из таблицы 1, наибольшая пористость присуща образцам кремния с шлифованной поверхностью при более долгом времени травления и равна 8-12 %. Увеличение массы при осаждении ГАП из водной суспензии составляет 2,3-2,6 мг, что более чем в два раза больше, чем увеличение массы при использовании спиртовой суспензии ГАП. Наиболее растворимыми оказались нанокompозиты ПК+ГАП на основе пластин шлифованного кремния с большей пористостью. Убыль массы в этом случае составила около 1,5 мг, что примерно в два раза больше, чем у других образцов.

На рисунке 2 представлено изображение частиц порошка, полученного механическим способом из нанокompозита ПК+ГАП. Исследование порошков нанокompозита показало, что размер отдельных частей порошинок составляет 10-15 мкм, так же присутствуют частицы меньшего размера, которые нельзя увидеть при помощи оптического микроскопа. Выход порошка с одной пластины очень мал и порошинки слишком

крупные. Для уменьшения размеров частиц нужно дополнительно измельчать их. Стоит выбрать другой метод создания суспензии/порошка нанокompозита ПК+ГАП.

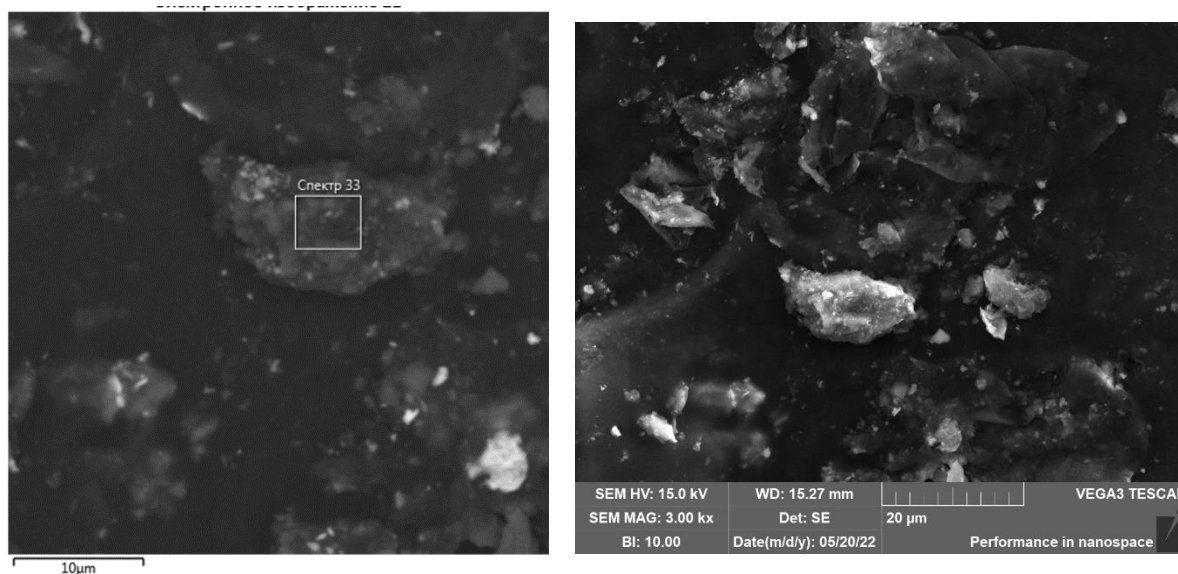


Рис. 2. РЭМ–изображения частиц порошка нанокompозита ПК+ГАП, полученных путем механической обработки поверхности

В таблице 2 представлен элементный состав выделенной области на поверхности отдельной порошинки. Порошинка состоит из кислорода, кальция и углерода, которые являются составными частями гидроксиапатита, а также из кремния. Это подтверждает наличие ГАП в порах кремния.

Таблица 2. Состав нанокompозитного порошка ПК+ГАП

| Элемент | Атом. % |
|---------|---------|
| C | 64.63 |
| O | 29.19 |
| Ca | 3.32 |
| Al | 1.43 |
| S | 0.75 |
| Cd | 0.34 |
| Si | 0.28 |
| P | 0.05 |
| Сумма | 100.00 |

После лазерной абляции у шлифованных образцов после одного прохода лазера полностью снимается пористый слой (Рис. 3). Вес пластин уменьшается на 2-4 мг, около 0,7 % от начальной массы.

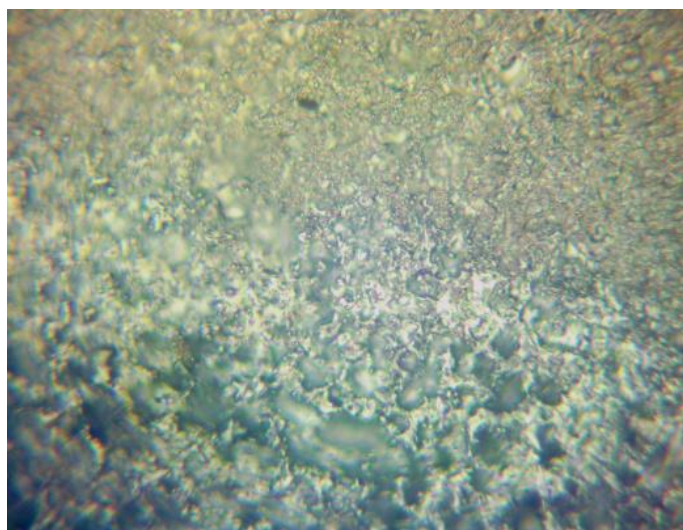


Рис. 3. № 4ш граница реза (снизу) и ПК слоя (сверху)

Полученная суспензия была высажена на предметное стекло для изучения под оптическим микроскопом «Неорот-21». Частицы имеют круглую форму и «запеченные» лазером края. Их размер примерно 2,5-4,8 мкм, что значительно меньше частиц, полученных путем механической обработки (более 20 мкм) (Рис. 4). На более точном микроскопе и после сортировки частиц по размерам возможно будут видны частицы меньших размеров.

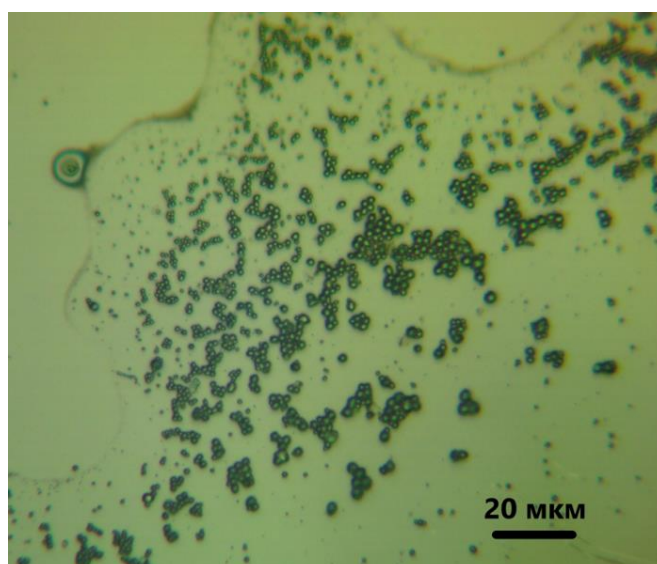


Рис. 4. Частицы порошка нанокompозита ПК+ГАП, полученные путем лазерной абляции

Осадок, полученный после растворения нанокompозита с поверхности кремниевой пластины, исследовался с помощью электронной микроскопии на растровом электронном микроскопе «VEGA3 TESCAN». Фото участка осадка приведено на рисунке 5.

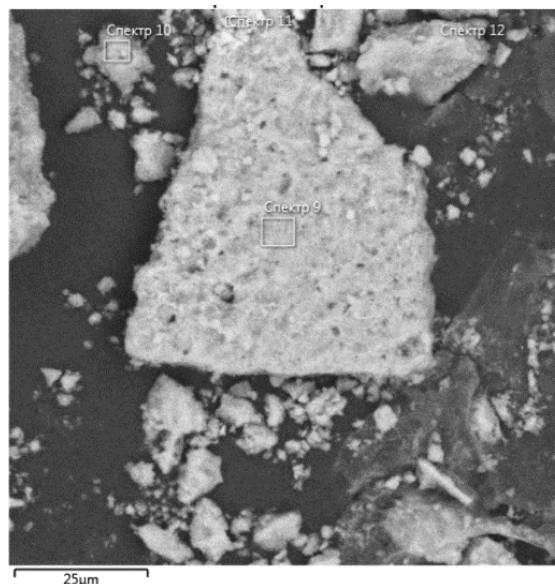


Рис. 53. РЭМ-изображение осадка, полученного после растворения нанокompозита с поверхности кремниевой пластины №3и

В таблице 3 представлен элементный состав осадка. Как видно из таблицы, мутный осадок, полученный после растворения, состоит на 10 и более процентов из Р, О, Са – основных составляющих ГАП. Кремния же присутствует менее чем 1%, что подтверждает процесс растворения нанокompозитов ПК+ГАП в воде. На данном этапе был проведен только качественный анализ растворимости, количественный анализ запланирован на будущие исследования.

Таблица 3. Состав осадка после растворения

| Элемент | Атом. % |
|---------|---------|
| O | 54.06 |
| P | 12.82 |
| Ca | 19.94 |
| Na | 2.43 |
| Cl | 1.12 |
| C | 8.88 |
| Si | 0.37 |
| Mg | 0.37 |
| Сумма | 100.00 |

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, проведенное исследование подтверждает растворимость в воде нанокompозитов на основе ПК+ГАП и может лечь в основу создания методики изготовления нанокompозита ПК+ГАП с контролируемым содержанием ГАП. Метод лазерной абляции подходит для создания суспензий нанокompозита. При мощности лазера 16 Вт нужно один проход лазера для шлифованной поверхности. С помощью метода лазерной абляции можно получить частицы меньшего размера (около 2 мкм), чем с помощью механического метода (около 15 мкм).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. А.С. Леншин, Формирование и функциональные свойства наноструктур на основе пористого кремния // Воронежский гос. университет, 2020.
2. Gonzalo R. S., Ramon J. P., Porous silicon: An attractive material for biomedical uses // *Inorganic Frameworks as Smart Nanomedicines*, 2018, v. 3, p. 789–797.
3. Jeffery L Coffey, Porous silicon-based scaffolds for tissue engineering and other biomedical applications // *Phys. Stat. Sol. (a)*, 2005, v. 202(8), pp. 1451–1455.
4. X. G. Zhang, Morphology and formation mechanisms of porous silicon // *Journal of the Electrochemical Society*, 2004, v. 1 (151), p. 69-80.

5. Д.Р. Суюндукова, Н.В. Латухина, А.Н. Агафонов и др., Исследование растворимости порошка нанокompозита пористого кремния с нанокompозитом // Journal of Biomedical Photonics and Engineering, 2022, т. 8(2), 020306.

STUDY OF THE SOLUBILITY OF POROUS SILICON NANOCOMPOSITE WITH HYDROXYAPATITE

S.Y. Kulagina¹, N.V. Latuhina¹

*¹Samara National Research University,
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)
e-mail: kulagina4@ya.ru*

In this work, a nanocomposite of porous silicon (por-Si) with hydroxyapatite (HAP) was studied as the basis of a promising biomaterial for osteoplasty, since the combined use of por-Si with HAP will give the most effective result.

A test for the solubility of por-Si + HAP nanocomposite materials was carried out and a comparison was made of two methods for creating a suspension: mechanical and laser ablation.

Keywords: porous silicon, hydroxyapatite, nanocomposites, gravimetric method, laser ablation.

ИЗМЕРЕНИЕ КОНСТАНТ СКОРОСТИ ЭНЕРГООБМЕННЫХ ПРОЦЕССОВ В ПЛАЗМЕ Ar/He

Р.А. Курамшин^{1,2}, А.П. Торбин¹, М.И. Свистун¹,
М.В. Загидуллин¹, А.К. Чернышов¹, П.А. Михеев¹

¹Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева РАН
(443011, г. Самара, ул. Ново-Садовая, 221)

²Самарский национальный исследовательский университет,
(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)
e-mail: kuramshinr2001@gmail.com

В работе получены значения констант скорости энергообменных процессов между уровнями Ar $2p_6$, $2p_7$ и $2p_8$ в плазме Ar/He. Плазма Ar/He является активной средой актуального для изучения лазера на метастабильных атомах тяжёлых инертных газов с оптической накачкой. Ранее построенные модели не содержали уровни $2p_7$ и $2p_6$. Однако наши эксперименты показали, что заселение этих уровней происходит достаточно активно при давлении более 100 Торр. На основе временных зависимостей концентраций $2p_6$, $2p_7$ и $2p_8$, полученных в эксперименте при накачке перехода $1s_5 \rightarrow 2p_6$ импульсным перестраиваемым Ti:Sa лазером, с помощью моделирования определены значения констант столкновительной передачи энергии.

Ключевые слова: лазер на метастабильных атомах инертных газов с оптической накачкой, импульсный разряд, метастабильные атомы, аргон

1. ВВЕДЕНИЕ

Создание мощных лазеров до сих пор является актуальной задачей. Магистральным направлением в настоящее время является преобразование излучения диодных лазеров с помощью различных твердотельных, а в последнее время и газовых сред. За последнее десятилетие созданы мощные и эффективные диодные лазеры линейки и матрицы на их основе с мощностью излучения более 10 кВт, но качество их излучения заметно хуже дифракционного. Одной из наиболее перспективных лазерных систем, суммирующих и преобразующих излучение лазерных диодов в мощное излучение высокого качества, на сегодняшний день является лазер на метастабильных атомах инертных газов с оптической накачкой [1].

Метастабильные атомы Rg* нарабатываются в плазме тлеющего разряда, после чего осуществляется оптическая накачка из нижнего метастабильного состояния $1s_5$ (в дальнейшем используются обозначения Пашена) на уровень $2p_9$ или $2p_8$. В результате столкновений возбужденного атома с атомом He заселяется уровень $2p_{10}$, находящийся ниже уровня накачки, создаётся инверсная населенность между уровнями $2p_{10}$ и $1s_5$, и происходит лазерная генерация.

Модели, созданные ранее [2, 3, 4], учитывали только уровни $1s_5$, $1s_4$, $2p_8$, $2p_9$, $2p_{10}$. В ходе данной работы было выявлено, что при интенсивной накачке уровня $2p_8$ так же заселяются и уровни $2p_7$ и $2p_6$, поскольку $2p_7$ отстоит от $2p_8$ всего на 470 см^{-1} . Их заметное заселение происходит при давлении более 100 Тор , и оказывает влияние на измеряемые значения констант столкновительного энергообмена между уровнями $2p_8$, $2p_9$ и $2p_{10}$, что не учитывалось ранее. При этом уровень $2p_5$, отстоящий от $2p_6$ на 817 см^{-1} заселяется пренебрежимо мало. Целью данного исследования является определение констант энергообменных процессов, происходящих в смеси газов Ar/He при оптической накачке, ранее не учитывавшихся при моделировании.

2. МОДЕЛЬ

Моделирование произведено в программном пакете COMSOL Multiphysics 5.5. В модели для уровней $1s_5 - 2p_6$ записаны уравнения баланса:

$$\begin{aligned} \frac{d[Ar(2p_i)]}{dt} &= \sum_{j \neq i} ([Ar(2p_j)](k_{j,i}[He] + A_{j,i}) - [Ar(2p_i)](k_{i,j}[He] + A_{i,j})) - \\ &- [Ar(2p_i)](k_{i,1s_5}[He] + A_{i,1s_5} + k_{i,1s_4}[He] + A_{i,1s_4}) + \delta_{i,q}P(t)([Ar(1s_5)] - \frac{g_{1s_5}}{g_{2p_q}}[Ar(2p_q)]), \\ \frac{d[Ar(1s_n)]}{dt} &= \sum_{m \neq n} ([Ar(1s_m)](k_{m,n}[He] + A_{m,n}) - [Ar(1s_n)](k_{n,m}[He] + A_{n,m})) + \\ &+ \sum_j ([Ar(2p_j)](k_{j,n}[He] + A_{j,n}) - \delta_{n,5}P(t)([Ar(1s_5)] - \frac{g_{1s_5}}{g_{2p_q}}[Ar(2p_q)]) - \delta_{n,4}[Ar(1s_n)]A_{n,0} \end{aligned}$$

где $i, j = 6, 7, 8, 9, 10$; $m, n = 4, 5$; $[Ar(2p_i)]$ – концентрация $2p_i$ уровня; $k_{j,i}$ – константа скорости реакции $2p_j \rightarrow 2p_i$; $[He]$ – концентрация гелия; $k_{i,1s_5}$ – константа скорости реакции; $A_{i,1s_5}$ – коэффициент Эйнштейна $2p_i \rightarrow 1s_5$, $k_{i,1s_4}$ – константа скорости реакции $2p_i \rightarrow 1s_4$, $A_{i,1s_4}$ – коэффициент Эйнштейна $2p_i \rightarrow 1s_4$, δ – символ Кронекера, $P(t)$ – временной профиль лазерного

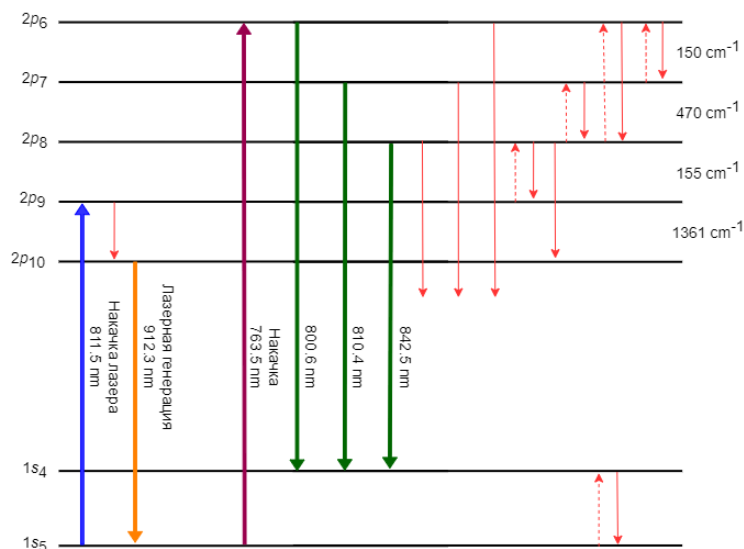


Рис. 1. Энергетические уровни и переходы метастабильного атома Ar, включенные в модель.

импульса, полученный аппроксимацией экспериментального импульса; g_{1s5} – статистический вес уровня $1s_5$ равный 5; g_{2pq} – статистический вес уровня $2p_q$; q – уровень на который производится оптическая накачка. Энергий уровней, коэффициенты Эйнштейна и

статистические веса взяты из [5]. Связь констант прямых и обратных реакций в модели обеспечивается принципом детального равновесия:

$$k_{l,u} = k_{u,l} \frac{g_u}{g_l} \exp\left(-\frac{E_u - E_l}{kT}\right),$$

где $k_{l,u}$ - константа скорости обратной реакции; $k_{u,l}$ - константа скорости прямой реакции; g_l - статистический вес нижнего уровня; g_u - статистический вес верхнего уровня; E_u - энергия верхнего уровня; E_l - энергия нижнего уровня. На рисунке 1 красными тонкими стрелками показаны столкновительные переходы с верхних уровней на нижележащие, красными штрихованными стрелками – обратные переходы, учтённые в модели. Так же показаны накачка $1s_5 \rightarrow 2p_6$ и излучение переходов $2p_8 \rightarrow 1s_4$, $2p_7 \rightarrow 1s_4$, $2p_6 \rightarrow 1s_4$, с помощью которых определялась динамика населённости уровней $2p_8$, $2p_7$ и $2p_6$.

3. ЭКСПЕРИМЕНТ

Схема экспериментальной установки для измерения констант скоростей процессов между возбужденными состояниями метастабильных атомов аргона Ar^* и гелия He представлена на рисунке 2. Нарботка Ar^* проводилась с помощью импульсно-периодического разряда (ИПР) в смеси Ar/He с содержанием аргона 1 %. Разряд зажигался между парой титановых электродов с размерами 40×2 мм. Межэлектродное расстояние составляло

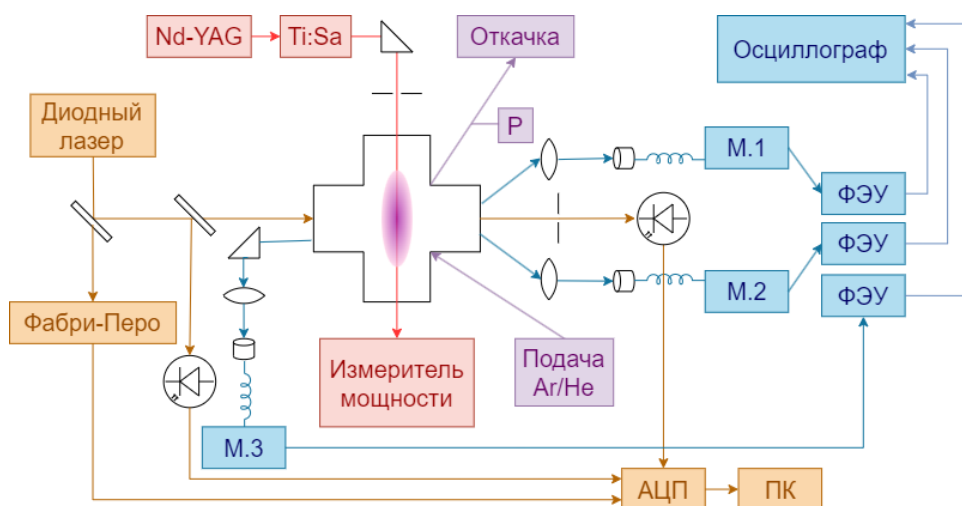


Рис. 2. Схема экспериментальной установки (пояснения в тексте).

3 мм. Электроды размещались внутри 3-х осевого креста объемом 0.5 л с фланцами KF40. Крест представляет собой три взаимно перпендикулярных канала, которые в экспериментах использовались для ввода лазерного излучения накачки, излучения перестраиваемого диодного лазера и подвода питания разряда. Разрядная камера была оборудована безмасляной откачкой с измерителем давления Р “Сапфир”, химически инертными трубками и вакуумной арматурой Swagelok. С помощью систем откачки и контроллеров расхода газа Bronkhorst F-201CV был организован проток смеси через разрядную камеру 2 стандартных литра в минуту. Для поддержания ИПР применялся генератор высоковольтных импульсов длительностью 80 нс с частотой 200 кГц. Источник питания обеспечивал плотность тока 2 А см^{-2} при давлении до 400 Торр, что достаточно для наработки атомов $\text{Ar}(1s_5)$ с концентрацией $\sim 1 \times 10^{13} \text{ см}^{-3}$.

Исследования кинетики Ar^* в смеси Ar/He проводились методом лазерно-индуцированной флуоресценции. Излучение накачки для возбуждения уровней $\text{Ar}(2p)$ обеспечивалось перестраиваемым Ti-Sa лазером, накачиваемым 2-й гармоникой импульсного твердотельного Nd-YAG лазера Solar Laser Systems LQ829. Ti-Sa лазер позволял перестраивать длину волны в диапазоне 690-960 нм, спектральная ширина излучения по полувысоте составляла $< 1 \text{ нм}$, длительность импульса по полувысоте $\sim 12 \text{ нс}$. Излучение накачки ослаблялось нейтральными фильтрами, обрезалось диафрагмой диаметром 0.8 мм и заводилось в разрядную камеру через окна, наклоненные под углом Брюстера, вдоль длинной стороны электродов посередине между ними. Лазер и источник

питания разряда были синхронизированы через генератор задержек Stanford Research Systems DG645, обеспечивающего постоянное время прихода лазерного импульса после импульса разряда. Флуоресценция возбужденных лазером переходов регистрировалась по трем каналам, состоящим из собирающих линз, оптоволоконных жгутов, способных передавать изображения, монохроматоров (М.1,2,3 на рисунке 2), настроенных на нужные линии излучения, и скоростного фотоэлектронного умножителя (ФЭУ) Hamamatsu H10720-20. В каждом из 3-х каналов с помощью линзы строилось изображение части разряда на входном торце оптоволоконного жгута, по которому оно затем передавалось на вход монохроматора так, чтобы переданное изображение располагалось напротив и параллельно щели. Сигналы от ФЭУ регистрировались с помощью осциллографа LECROY WaveJet Touch 354R с полосой пропускания 500 MHz.

Температура газа и концентрация $[Ar(1s_5)]$ в плазме разряда определялись методом диодно-лазерной абсорбционной спектроскопии в схеме с опорным каналом. Сканирующее излучение лазерного диода на длине волны в районе 912.3 нм, соответствующей переходу $1s_5 \rightarrow 2p_{10}$, направлялось в центр между электродами перпендикулярно длинной стороне и затем поступало на фотодиод. Перед входом в камеру часть лазерного пучка направлялась на опорный фотодиод и интерферометр Фабри-Перо. Сигналы от двух фотодиодов и интерферометра регистрировались АЦП National Instruments SCB-68 и обрабатывались программой, написанной с помощью LabView. Наблюдаемые профили поглощения аргона аппроксимировались функцией Фойгта, позволяя определить температуру газа по уширению линии и концентрацию $[Ar(1s_5)]$.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ И АНАЛИЗ

Поскольку проводимые в работе исследования необходимы для развития лазера на метастабильных атомах инертных газов, то в первой серии экспериментов для изучения были выбраны переходы с уровней $2p_{10}$, $2p_9$ и $2p_8$, которые непосредственно задействованы в лазерном цикле. На рисунке 3(а) сплошными линиями представлены типичные сигналы с трех каналов, настроенных на переходы $2p_{10} \rightarrow 1s_5$, $2p_9 \rightarrow 1s_5$, $2p_8 \rightarrow 1s_4$, при накачке перехода $1s_5 \rightarrow 2p_8$ на длине волны 801.5 нм, давлении в камере 275 Торр и температуре газа в зоне разряда ~ 400 К. Обработка полученных

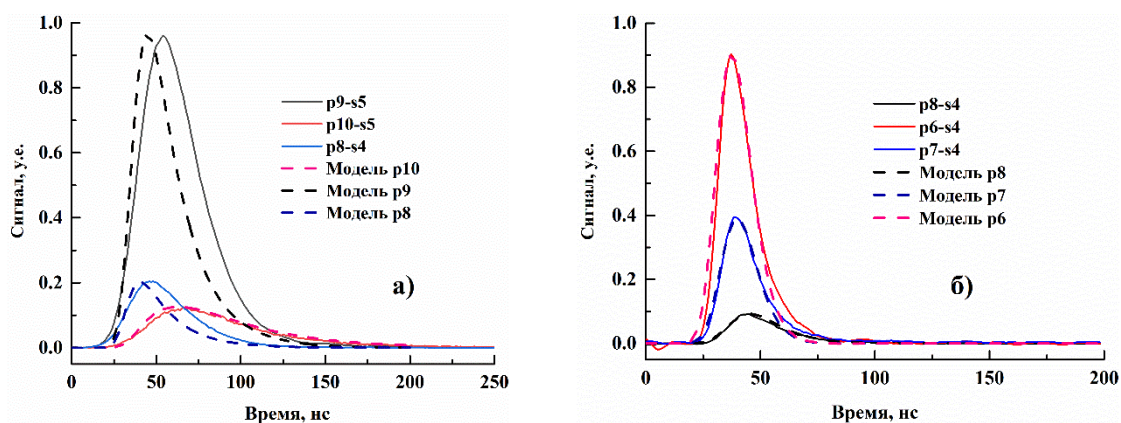
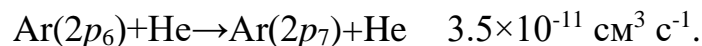
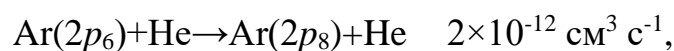
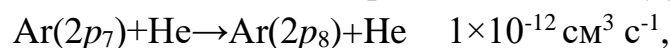


Рис. 3. Сигналы переходов между уровнями метастабильного атома аргона при 275 Торр, 400 К и накачке а) $1s_5 \rightarrow 2p_8$; б) $1s_5 \rightarrow 2p_6$.

данных проводилась в среде COMSOL с использованием созданной модели, учитывающей только переходы между уровнями $1s_5$, $1s_4$, $2p_{10}$, $2p_9$ и $2p_8$. В ходе работы было обнаружено, что результаты моделирования (пунктирные линии на рисунке 3(а)), имеют сильное расхождение с экспериментом для переходов с $2p_9$ и $2p_8$. Экспериментальные сигналы шире модели на $\sim 20\%$ на полувысоте и их максимум смещен на несколько нс. Средствами модели данные различия устранить не удалось. Эффект уширения сигналов с $2p_9$ и $2p_8$ наблюдался при давлениях выше 100 Торр. Было выдвинуто предположение, что наблюдаемые различия объясняются участием в кинетике более высоко лежащих уровней $2p_7$ и $2p_6$. Экспериментальная проверка данного предположения подтвердила, что при накачке $1s_5 \rightarrow 2p_8$ наблюдаются эмиссионные сигналы как с уровня $2p_7$, так и $2p_6$. При этом излучение с уровня $2p_5$ было незначительным. В более ранних работах [2, 3, 4] по моделированию плазмы Ar/He считалось, что вклад этих уровней в общую кинетику пренебрежимо мал. Однако полученные нами результаты указывают на то, что уровни $2p_7$ и $2p_6$ должны учитываться по крайней мере при измерении наиболее важных констант скоростей передачи энергии в активной среде нового лазера.

На рисунке 3(б) сплошными линиями показаны типичные сигналы с трех каналов, настроенных на переходы $2p_8 \rightarrow 1s_4$, $2p_7 \rightarrow 1s_4$, $2p_6 \rightarrow 1s_4$, при накачке перехода $1s_5 \rightarrow 2p_6$ на длине волны 763.5 нм и условиях эксперимента, совпадающих с рисунком 3(а). Для описания сигналов в модель были добавлены уровни $2p_7$ и $2p_6$, заселение уровня $2p_5$ принято пренебрежимо малым. Удовлетворительное согласие модели с

экспериментом было достигнуто при следующих подобранных значениях констант скорости столкновительной релаксации между p уровнями:



При этом суммарные константы скорости процессов тушения состояний $2p_8$, $2p_7$ и $2p_6$ составили 1×10^{-11} , 3.6×10^{-11} и 7.2×10^{-11} ($\text{см}^3 \text{ с}^{-1}$), соответственно. Ранее тушение этих уровней изучалось только в собственном газе Ar [6]. Полученные значения носят оценочный характер и требуют дополнительной верификации на большем наборе экспериментальных данных при разных давлениях и температурах газовой смеси.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе создана экспериментальная установка для одновременной регистрации лазерно-индуцированной флуоресценции метастабильных атомов аргона Ar^* , генерируемых в ИПР. В среде COMSOL Multiphysics разработана математическая модель, описывающая кинетику тушения и заселения уровней Ar^* . В ходе проведенных работ обнаружено, что для корректного определения интересующих констант модель требует включения не только уровней $2p_{10}$, $2p_9$ и $2p_8$, участвующих в лазерном цикле, как было принято ранее, но также $2p_7$ и $2p_6$, активно заселяемых при давлении более 100 Торр. Особая важность данного наблюдения заключается в том, что разрабатываемый лазер Ar^*/He с оптической накачкой планируется использовать при рабочем давлении активной среды в районе 1 атм, при котором вклад обратных реакций станет особенно заметным.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Han J., Heaven M.C. Gain and lasing of optically pumped metastable rare gas atoms // Opt. Lett., Vol. 37, No. 11, 2012. pp. 2157-2159.
2. Han J., Heaven M.C. Kinetics of optically pumped Ar metastables // Opt. Lett., Vol. 39, No. 22, 2014. pp. 6541-6544.

3. Eshel B., Perram G.P. Five-level argon–helium discharge model for characterization of a diode-pumped rare-gas laser // JOSA B, Vol. 35, No. 1, 2018. pp. 164-173.
4. Wang R., Yang Z., Li K., Wang H., Xu X. Experiment and modeling of the pulsed lasing in a diode-pumped argon metastable laser // Journal of Applied Physics, Vol. 131, No. 2, 2022. P. 023104.
5. Atomic Spectra Database [Электронный ресурс] // NIST: [сайт]. [2021]. URL: <https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database> (дата обращения: 14.10.2022).
6. Chang R.S.F., Setser D.W. Radiative lifetimes and twobody deactivation rate constants for Ar(3p5, 4p) // The Journal of Chemical Physics, Vol. 69, No. 9, November 1978. P. 1.

**THE RATE CONSTANTS MEASUREMENT
OF ENERGY TRANSFER PROCESSES IN AR/He PLASMA**

R.A. Kuramshin^{1,2}, A.P. Torbin¹, M.I. Svistun¹,

M.V. Zagidullin¹, A.K. Chernyshov¹, P.A. Mikheyev¹

*¹Lebedev Physical Institute, Samara Branch
(Novo-Sadovaya str., 221, Samara, Russia, 443011)*

*²Samara National Research University,
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)*

e-mail: kuramshinr2001@gmail.com

The rate constants of the energy transfer processes between the $2p_6$, $2p_7$ and $2p_8$ Ar levels in the Ar/He plasma have been obtained in this work. The Ar/He plasma is an active medium of the optically pumped rare gas laser. Previous models did not include levels $2p_7$ and $2p_6$. However, we have found experimentally that these levels are actively populated at pressure above 100 Torr.

Keywords: optically pumped rare gas laser, pulsed discharge, metastable atoms, argon.

ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТРУКТУР С ОКИСЛЕННЫМ ПОРИСТЫМ КРЕМНИЕМ, ДОПИРОВАННЫМ ЭРБИЕМ

Н.В. Латухина¹, Д.А.Нестеров¹, А.В. Павликов², О.А. Шалыгина²

¹ Самарский национальный исследовательский университет имени
академика С.П. Королева
(443086, г. Самара, Московское шоссе, д. 34)

² Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
(119234, г. Москва, Ленинские горы, д. 1)
e-mail: natalat@yandex.ru, nesand2606@mail.ru

В данной работе рассматривается вопрос создания новых материалов для фотоэлектрических преобразователей (ФЭП, повышающих эффективность кремниевых солнечных элементов за счет эффекта ап-конверсии (up-conversion)).

Были изучены образцы пористого кремния, допированного эрбием. Создание образцов происходило при помощи анодного электрохимического травления пластин монокристаллического кремния. Приведены графики спектральных характеристик fotocувствительности и коэффициентов отражения и спектры люминесценции в видимой и ближней ИК-области.

Ключевые слова: пористый кремний, наноструктуры, ап-конверсия, Er^{3+} , фотоэлектрические преобразователи, fotocувствительность, спектральные характеристики.

1. ВВЕДЕНИЕ

Одной из особо актуальных задач современной физики полупроводников является создание новых материалов оптоэлектроники, повышающих эффективность приборов и расширяющих их функциональные возможности [1]. Одним из таких материалов является пористый кремний, допированный редкоземельными элементами [2-4]. Для солнечной энергетики использование этих материалов как заднего ап-конверсионного покрытия кремниевых фотоэлектрических преобразователей позволяет эффективно использовать большую часть солнечного спектра, за счёт ап-конверсионного преобразования излучения

ИК области в видимую часть спектра, которая в свою очередь уже может поглощаться кремнием [5,6].

Ап-конверсия - процесс преобразования длинноволнового излучения в коротковолновое. Являются сложными многофотонными процессами, когда происходит поглощение 2-х, 3-х и более фотонов с низкой энергией и последующее излучение высокоэнергетических фотонов. Ап-конверсия наблюдается в образцах, допированных редкоземельными элементами (РЗЭ).

В данной работе были измерены спектральные характеристики фоточувствительности и коэффициентов отражения образцов структур со слоем окисленного пористого кремния, допированного редкоземельным элементом эрбием. Вид спектральных характеристик показывает явную зависимость фотоэлектрических свойств образца от его структуры.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Образцы пористого кремния были получены анодным электрохимическим травлением пластин монокристаллического кремния в спиртовом растворе плавиковой кислоты HF: C₂H₅OH. Использовались пластины с текстурированной поверхностью р-типа проводимости и с полированной поверхностью с заранее сформированным локально мелкозалегающим р-п-переходом. На таких поверхностях образование пор происходит преимущественно в углублениях рельефа [7]. Травление происходило при постоянной плотности тока 10 мА/см². Время травления составляло 5, 10 и 15 минут.

Для определения толщины пористого слоя исследовался скол образца на оптическом микроскопе «Neopt-21». Значения толщин пористого слоя образцов лежали в диапазоне от 18.36 мкм до 54.28 мкм.

Для получения образцов, допированных эрбием, на поверхность пористого кремния наносился спиртовой раствор эрбия. После этого образцы отжигались в печи при температуре 950⁰ С в атмосфере воздуха на протяжении 30 минут.

Пористость P рассчитывалась гравиметрическим методом:

$$P = \frac{V_{\text{пор}}}{V_{\text{пор.слоя}}} \quad (1)$$

$$V_{\text{пор}} = \frac{\Delta m}{\rho} \quad (2)$$

$$V_{\text{пор.слоя}} = S * d \quad (3)$$

$$P = \frac{\Delta m}{\rho * S * d} \quad (4)$$

где Δm – убыль массы образца после травления, ρ – плотность кремния, V – объём пор или пористого слоя, S - площадь пористого слоя, d – его толщина.

Схема исследования спектральных характеристик фоточувствительности включала ртутную лампу с известным спектром, монохроматор МДР-3 и лабораторный амперметр.

Спектр коэффициента отражения измерялся при помощи сканирующего спектрофотометра Shimadzu UV-2450PC – для видимого диапазона, а так же ИК Фурье-спектрометра Shimadzu IRPrestige-21- для ближнего ИК диапазона.

Спектры фотолюминесценции измерялись при возбуждении He-Cd – лазером на длине волны 325 нм. Исследовались образцы 7,8,9, в которых пористый слой создавался на текстурированной поверхности.

Все измерения проводились при комнатной температуре.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

В таблице 1 приведены значение толщины пористого слоя, объёмов пор и пористого слоя, а также рассчитанные значения пористости образцов.

На рисунке 1 приведены графики спектральных характеристик фототока, нормированные на его максимальное значение. По графикам спектральных характеристик видно, что для образцов 1,3,4,7,9 максимумы смещены в коротковолновую часть спектра (в районе 400 нм), что часто встречается в структурах с пористым кремнием [6]. График образца 2 соответствует спектральным характеристикам кремниевых структур с максимумом, находящимся на длине волны около 700 нм. Также стоит отметить что две структуры (образцы 7 и 9) проявляют отрицательную генерацию с последующим переходом в положительную. Это, возможно, связано с наличием n - p перехода внутри пористого слоя.

На рисунках 2-3 приведены графики спектров коэффициентов отражения в видимой и ближней ИК-области для образцов пористого кремния с текстурированным типом поверхности.

Таблица 1. Расчет пористости

| № | Толщина пористого слоя, мкм | Площадь поверхности, см ² | Объем пористого слоя, см ³ | Объем пор в образце, см ³ | Пористость, % |
|-------------------------------------|-----------------------------|--------------------------------------|---------------------------------------|--------------------------------------|---------------|
| Полированная поверхность | | | | | |
| 1 | 54,28 | 21,50 | 0,11670 | 0,00210 | 1,80 |
| 2 | 28,30 | 16,50 | 0,04670 | 0,00077 | 1,65 |
| 3 | 43,52 | 18,09 | 0,07873 | 0,00288 | 3,65 |
| 4 | 26,66 | 4,39 | 0,01171 | 0,00112 | 9,53 |
| 5 | 18,36 | 4,43 | 0,00813 | 0,00077 | 9,50 |
| 6 | 55,33 | 4,43 | 0,02450 | 0,00060 | 2,45 |
| Текстурированная поверхность | | | | | |
| 7 | 40,84 | 4,36 | 0,01779 | 0,00043 | 2,41 |
| 8 | 38,23 | 4,36 | 0,01665 | 0,00094 | 5,67 |
| 9 | 45,63 | 4,36 | 0,01988 | 0,00086 | 4,32 |

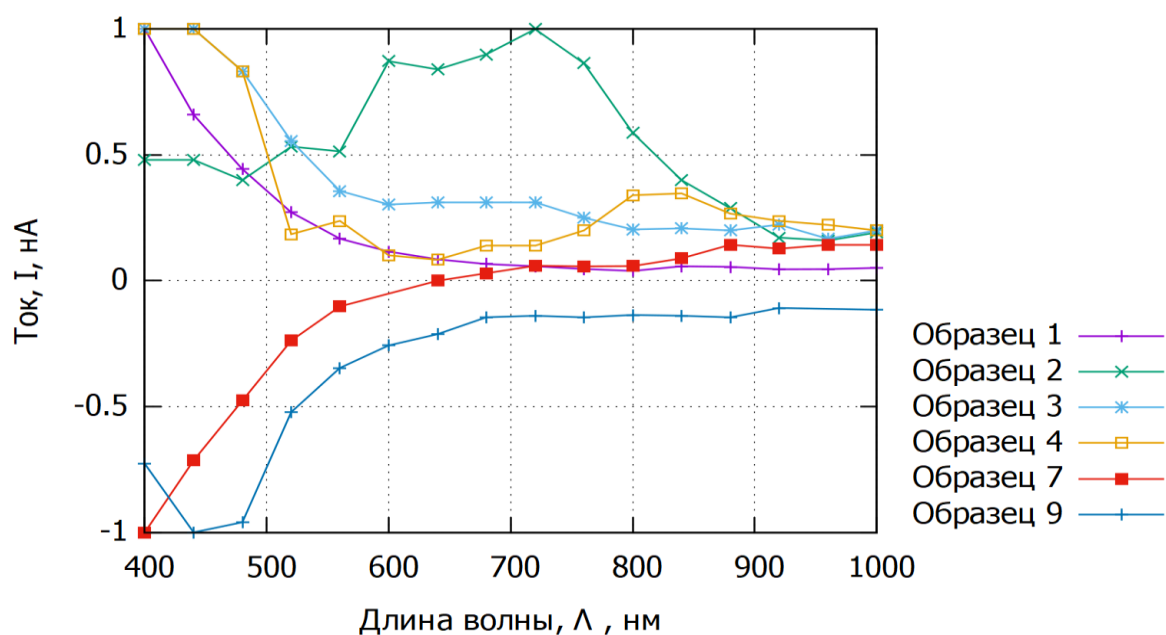


Рис. 1. Спектральные характеристики фототока, нормированные на максимум

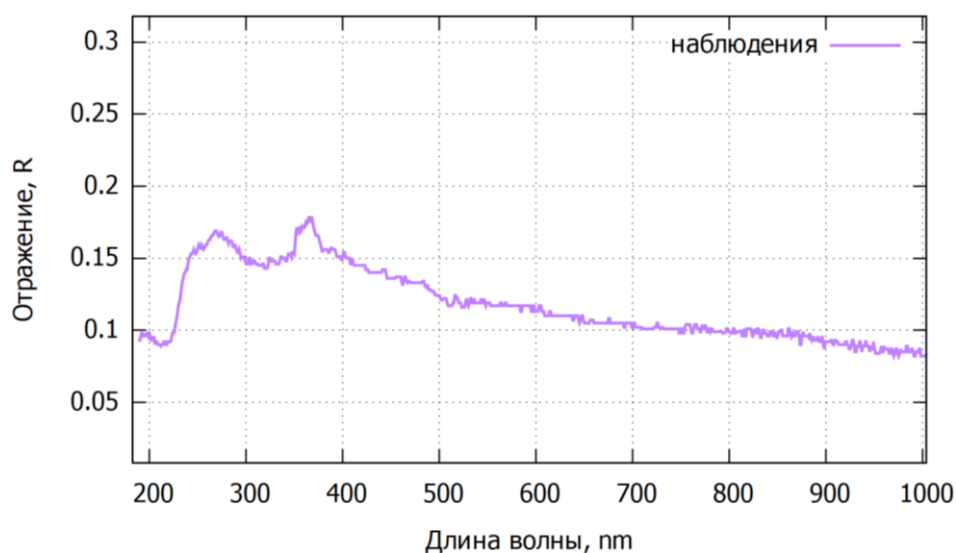


Рис. 2. Спектральные характеристики коэффициента отражения,
Shimadzu UV-2450PC

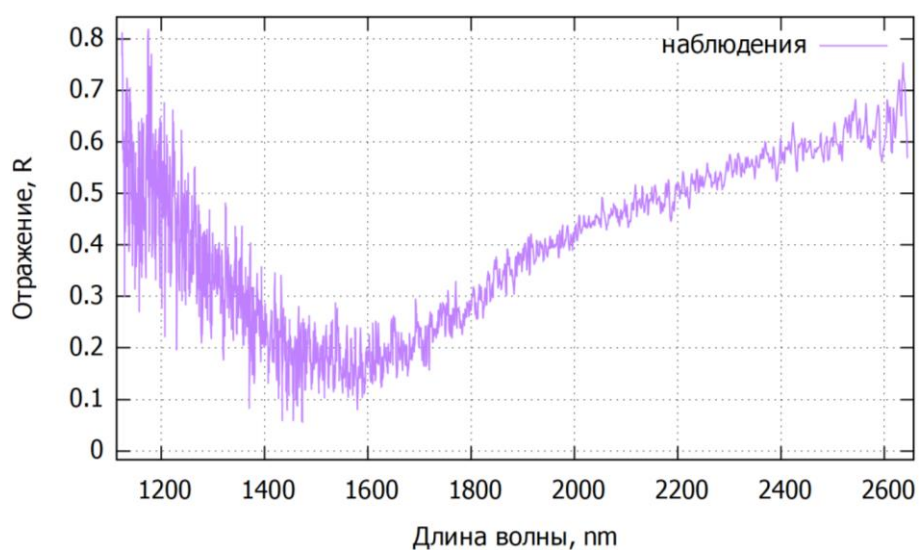


Рис. 3. Спектральные характеристики коэффициента отражения,
Shimadzu IRPrestige-21

Значения, полученные для коэффициента отражения видимого диапазона длин волн (Рис. 2), соответствуют значениям, характерным для текстурированной поверхности монокристаллического кремния [8]. Поскольку пористый слой занимает небольшую часть текстурированной поверхности и располагается в углублениях на стыках пирамид в углублениях, он оказывает слабое влияние на коэффициент отражения, лишь немного уменьшая его [9].

Результаты, полученные для ближнего ИК спектра (Рис. 3), несколько отличаются от характерных значений для монокристаллического кремния. В области 1500 нм имеется провал, который, вероятно, связан с наличием ионов эрбия в структуре кремния.

Спектр фотолюминесценции образцов в видимой части спектра имеет заметные пики с максимумом на 450 нм и 650 нм (Рис.4). Пики в этой области спектра наблюдали в порошках и композитах «ксерогель/порошок» ВаТiО3: Er при возбуждении сфокусированным излучением лазерного диода на длине волны ~ 980 нм [10]. Длина волны этого излучения соответствует полосе поглощения при переходе электронов из основного состояния трехвалентных ионов эрбия $^4I_{15/2}$ в возбужденное состояние $^4I_{11/2}$. Ап-конверсионная люминесценция зеленого или красного цвета порошка ВаТiО3: Er наблюдается при комнатной температуре и связана с переходами трехвалентного иона эрбия $^2H_{11/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$, $^4S_{3/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$ и $^4F_{9/2} \rightarrow ^4I_{15/2}$ на длинах волн 525, 550 и 660 нм соответственно. Механизм ап-конверсии обусловлен кооперативным ион - ионным взаимодействием соседних ионов эрбия, находящихся в возбужденном состоянии $^4I_{11/2}$ вследствие перехода $^4I_{15/2} \rightarrow ^4I_{11/2}$ при поглощении возбуждающего излучения на длине волны ~ 980 нм. Наличие подобных пиков в спектре фотолюминесценции пористого кремния, допированного эрбием, подтверждает возможность ап-конверсионной люминесценции в этом материале. Максимальное значение фотолюминесценции получено для образца №8 с наибольшей пористостью.

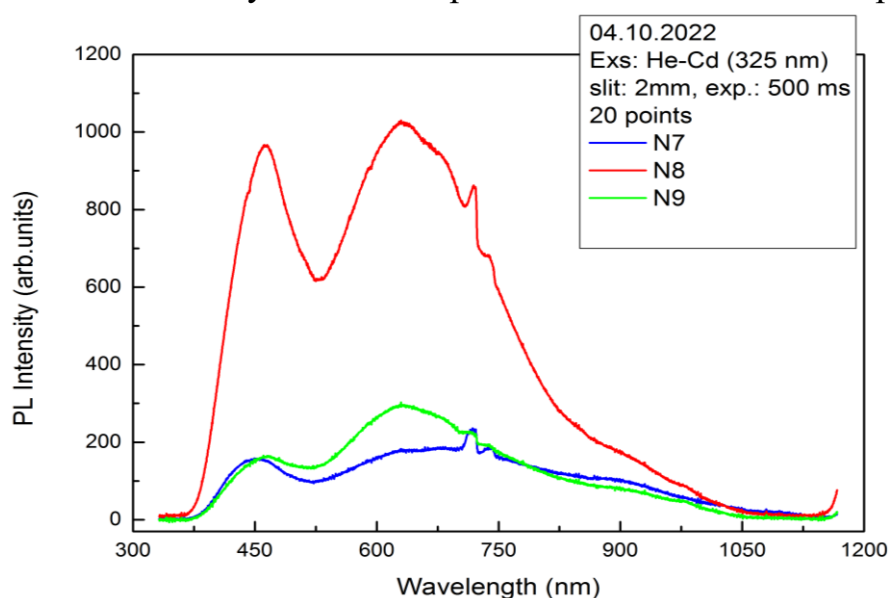


Рис. 4. Спектры фотолюминесценции образцов пористого кремния, допированного эрбием

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, проведенные исследования показывают, что пористый кремний, допированный эрбием, может использоваться как ап-конверсионный материал. Следует отметить, что его свойства сильно зависят от характеристик пористого слоя, что дает возможность получить структуры с заданными свойствами подбором необходимого исходного материала и технологического режима.

Результаты проведенных исследований могут быть положены в основу методики исследования и изготовления кремниевых образцов для солнечных элементов с расширенным спектром фоточувствительности в коротковолновую область спектра за счет пористого слоя и в длинноволновую – за счет ап-конверсионного покрытия.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. A. Shalav, B. S. Richards, T. Trupke, Application of $\text{NaYF}_4:\text{Er}^{3+}$ up-converting phosphors for enhanced near-infrared silicon solar cell response. // Applied physics letters, 2005, v. 86, № 013505.
2. S. A. Sokolov, R. Rösslhuber, D. M. Zhigunov, N. V. Latukhina, V. Y. Timoshenko, Photoluminescence of rare earth ions (Er^{3+}) in a porous silicon matrix. // Thin Sol. Films, 2014, v. 562, p. 462-466.
3. M.V. Karzanova, Luminescence of porous silicon with admixtures of rare earth elements, Cand. phys. and math. sci. diss. // Nizhniy Novgorod, 2013.
4. V. P. Bondarenko, Luminescence of erbium-doped porous silicon. // Tech. Phys. Lett., 1997, v. 23, p. 3–4.
5. J. C. Goldschmidt, S. Fischer, Up-conversion for Photovoltaics – a Review of Materials, Devices and Concepts for Performance Enhancement. // Adv. Opt. Mater., 2015, v. 3(1487).
6. E.B. Kaganovich, E.G. Manoilov, S.V. Svechnikov, Photosensitive structures on porous silicon (FTP) Semiconductors. // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics, 1999, v. 3 (33), p. 327 -331.
7. Shishkin I. A., Shishkina D. A., Latukhina N. V. The process of pore formation on a textured silicon substrate during electrochemical etching: 3D model // Journal of Physics: Conference Series. — 2021. — Vol. 1745. Issue 1. ISSN 17426588 DOI 10.1088/1742-6596/1745/1/012004

8. А. Н. Магунов, О. В. Лукин, Оптические методы измерения температуры полупроводниковых кристаллов в диапазоне 300 - 800 К. // Микроэлектроника, 1996, т. 2 (25), с. 97-111.
9. Латухина Н.В., Лизункова Д.А., Шишкин И.А. Моделирование оптических свойств многослойных структур, содержащих слои пористого кремния и оптические покрытия // V Международная конференция и молодежная школа "Информационные технологии и нанотехнологии" (ИТНТ-2019). — 2019. — т. 1. — с. 34-38
10. Н.В. Гапоненко и др. Излучательные свойства ап-конверсионных покрытий, формируемых на основе ксерогелей титаната бария, легированных эрбием // Физика и техника полупроводников, 2021, том 55, вып. 9, с. 713-718.

PHOTOELECTRIC PROPERTIES OF STRUCTURES WITH OXIDIZED POROUS SILICON DOPED WITH ERBIUM

N.V. Latukhina¹, D.A.Nesterov¹, A.V. Pavlikov², O.A. Shalygina²

*¹Samara National Research University named after Academician
S.P. Korolev*

(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)

²Lomonosov Moscow State University

(Leninskie gory, 1, Moscow, Russia, 119234)

e-mail: natalat@yandex.ru, nesand2606@mail.ru

In this paper, the issue of creating new materials for photovoltaic converters that increase the efficiency of silicon solar cells due to the up-conversion effect is considered.

Samples of porous silicon doped with erbium were studied. The samples were created using anodic electrochemical etching of single-crystal silicon plates. Graphs of the spectral characteristics of photosensitivity and reflection coefficients and luminescence spectra in the visible and near-infrared regions are presented.

Keywords: porous silicon, nanostructures, ap-conversion, Er³⁺, photoelectric converters, photosensitivity, spectral characteristics.

РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ МОНИТОРИНГА СОДЕРЖАНИЯ СВОБОДНОЙ ВОДЫ В АВИАЦИОННОМ ТОПЛИВЕ

А.И. Пономарев^{1*}, О.А. Заякин², С.П. Котова², Н.Н. Лосевский²,
Т.Н. Сапцина²

¹Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, г. Самара, Россия
(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)

²Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева
(443011, г. Самара, ул. Ново-Садовая, 221)

*E-mail: andrey2000_10@mail.ru

Исследована зависимость интенсивности рассеяния света на мелких каплях воды в несмешивающейся жидкости от количества воды и угла наблюдения для разработки датчика контроля количества воды в авиационном топливе. Работа направлена на поиск оптимального угла рассеяния для получения наибольшей чувствительности и монотонности сигнала в зависимости от количества воды.

Ключевые слова: рассеяние света на больших каплях, датчик воды в керосине.

1. ВВЕДЕНИЕ

Вода не смешивается с керосином и является нежелательной примесью в авиационном топливе. Однако, некоторое количество воды всегда присутствует. Она в очень малых количествах растворяется в керосине, поступая из окружающей атмосферы. Например, при 21°C и атмосферном давлении насыщенное содержание воды в керосине приблизительно составляет от 40 до 80 (вода) частей на миллион массовых долей (ppm) [1]. При этом вода не считается загрязняющим веществом, пока она находится в растворенном состоянии. Но при изменении внешних условий может произойти конденсация воды в капли, а также прямое попадание воды в топливо, например, конденсата со стенок резервуара, с последующим возможным образованием льда во время полета, что является опасным.

При заправке топлива в аэропортах осуществляется постоянный контроль содержания воды в топливе разными способами, в том числе и оптическими. Оптические методы контроля отличаются быстроедействием и точностью, что позволяет использовать их в непрерывном режиме. Сконденсированная вода в керосине образует капли разного размера, на которых может происходить рассеяние света. Хотя допустимое значение содержания сконденсированной воды в керосине достаточно низкое, порядка 10^{-5} массовой доли [2], рассеяние на таких каплях можно зафиксировать, если применять высокочувствительные методы. Существуют импортные датчики, основанные на этом принципе [2]. При этом у авторов нет информации относительно отечественных датчиков такого типа, что делает проблему более актуальной.

Актуальность работы обусловлена необходимостью создания отечественного датчика контроля содержания сконденсированной воды в заправляемом в самолет авиационном топливе в процессе заправки.

2. РАССЕЯНИЕ СВЕТА НА МЕЛКИХ КАПЛЯХ ВОДЫ В НЕСМЕШИВАЮЩЕЙСЯ ЖИДКОСТИ

Рассеяние света на различных объектах хорошо исследовано теоретически. В зависимости от размеров рассеивающего объекта применяются разные теории, в том числе теории Густава Ми и Джона Релея, дифракционный подход. Для частиц размером на порядок больше длины волны рассеивающегося света используется и геометрикооптический метод. Экспериментальных работ для интересующего нас случая гораздо меньше, поэтому практическое исследование рассеяния на модельной среде, близкой по оптическим свойствам к авиационному топливу представляет определенный интерес. Из таких работ можно назвать количественный анализ концентрации жира и белка в молоке на основе оптоволоконной оценки интенсивности обратного рассеяния [3]. Однако в отличие от нашей задачи, здесь речь идет о мутной среде. У нас же среда является практически прозрачной, что, помимо качественных различий с упомянутыми работами, дает на несколько порядков меньший оптический сигнал.

В качестве модельной среды для разработки датчика контроля количества воды в авиационном топливе было выбрано рафинированное подсолнечное масло с водой. Масло прозрачно и его показатель

преломления близок к показателю преломления керосина (масло – 1,46, керосин – 1,39). Также на практике не трудно создать смеси с необходимым, очень низким содержанием воды. В работе исследовалась зависимость интенсивности рассеянного света от количества воды и угла рассеяния. Целью работы было установление оптимального угла рассеяния и монотонности сигнала рассеяния в зависимости от количества воды.

3. ОПИСАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

Массовая доля воды в масле варьировалась от $10 \cdot 10^{-6}$ до $40 \cdot 10^{-6}$. Контроль содержания воды в масле осуществлялся путем двухстадийного разбавления. На первой стадии массовая доля воды определялась по количеству капель из дозатора. Объем каждой капли был оценивался при помощи медицинского шприца. Смесь тщательно размешивалась. На второй стадии определенное количество полученной эмульсии при помощи шприца добавлялось в чистое масло и размешивалось.

Дробление капель воды в масле производилось взбиванием бытовым миксером в течение пяти минут с последующим отстаиванием в течение часа для освобождения смеси от пузырьков воздуха. Определение размеров капель воды проводилось с использованием микроскопа ПоламЛ-213М и цифровой камеры ScopDEC DCM 300 с компьютерным интерфейсом USB 2.0.

Приготовленная среда помещалась в небольшой цилиндрический сосуд без дна, укрепленный на стеклянной подложке оптического качества. Схема экспериментальной установки показана на Рис.1. Излучение заводилось через делительный кубик снизу, чтобы минимизировать оптические шумы. При этом уменьшению шумов способствовало то, что свет, рассеянный в исследуемой среде, содержащейся в кювете 8, попадал на фотоприемник 9 через свободную поверхность жидкости, минуя стенки кюветы. Такая конфигурация оптической схемы была выбрана нами не случайно. Дело в том, что ходе данной работы мы обнаружили экспериментально, что в предыдущей конфигурации нашей схемы оптический сигнал был непостоянным во времени, что мешало нашим измерениям. Опытным путем мы выяснили, что фактором этого являлись стенки кюветы, через которые проходил свет, попадая на фотоприемник 10.

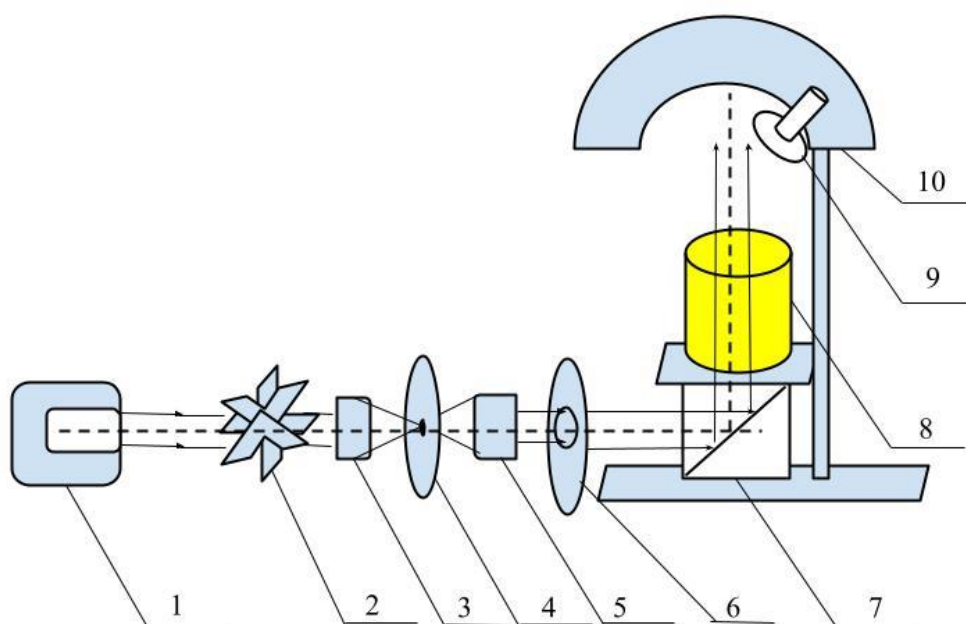


Рис. 1. Схема установки: 1 – гелий-неоновый лазер (ГН-5П); 2 – прерыватель; 3 – фокусирующий объектив (фокусное расстояние $F = 16$ мм, числовая апертура $NA = 0,3$); 4 – пинхол (диаметр 0,05мм); 5 – коллимирующий объектив (фокусное расстояние $F = 33$ мм, числовая апертура $NA = 0,11$); 6 – диафрагма (диаметр 2 мм); 7 – светоделительный кубик; 8 – кювета с исследуемой средой; 9 – фотодиодный датчик (ФД-24); 10 – поворотная подвижка.

Источником света являлся гелий-неоновый лазер ГН-5П, мощностью 5 мВт. Мощность излучения, прошедшего через масло, равнялась 0,27 мВт.

Мощность излучения, прошедшего прямо через рассеивающую среду, измерялась фотодиодным измерителем 10 (Рис. 1). Расстояние от центра светящегося столба в исследуемой среде в кювете 8 до фотоприемника равнялось 10 см. Технический расчет мощности был выполнен нами по известной градуировочной характеристике фотодиодного измерителя [4], также прокалиброванного ранее с помощью серийного измерителя мощности света ИМО-4С калориметрического типа.

Излучение непрерывного лазера модулировалось частотой 170 Гц механическим прерывателем. Рассеянный свет регистрировался фотоприемным измерителем [4] на основе фотодиода ФД 24, с

чувствительностью 3,33 мкВт/В, временем срабатывания (постоянной времени) 10^{-5} с и отклонением линейности, не превосходящим 2%, укрепленным на поворотной оправе. Сигнал с фотоприемника подавался на селективный вольтметр В6-9, в результате чего чувствительность увеличивалась еще в восемь раз, а быстродействие уменьшалось на два порядка.

4. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Размеры капель определялись микроскопом и варьировались в интервале от 8 до 50 мкм. Вид капель в микроскопе и распределение капель по размерам, полученное в результате статистической обработки более 30 фотографий с камеры микроскопа со 160 кратным увеличением, приведены на Рис.2. Как и ожидалось, мелких капель (8 мкм) оказалось гораздо больше, чем крупных (больше 15 мкм). Далее в расчетах использовался размер капель, равный 8 мкм.

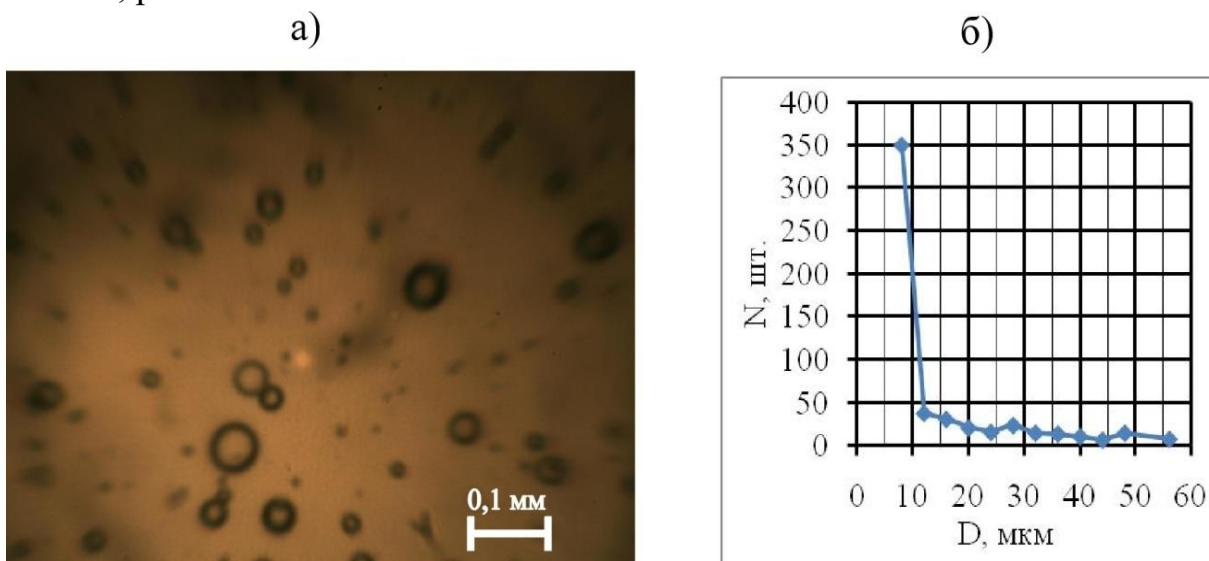


Рис. 2. Статистика капель: а – вид капель под микроскопом; б – статистика распределения капель по размерам, где D – размер капли; N – количество частиц.

Экспериментальные результаты зависимости сигнала датчика, регистрирующего интенсивность рассеянного излучения, от содержания воды в масле, показаны на Рис.3.

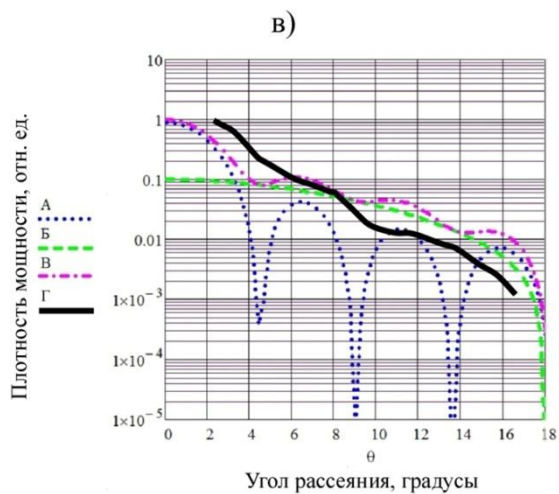
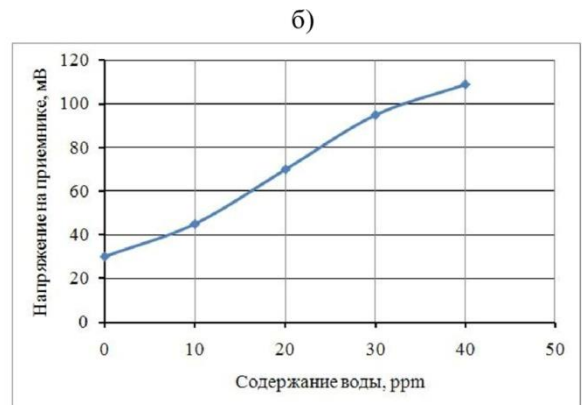
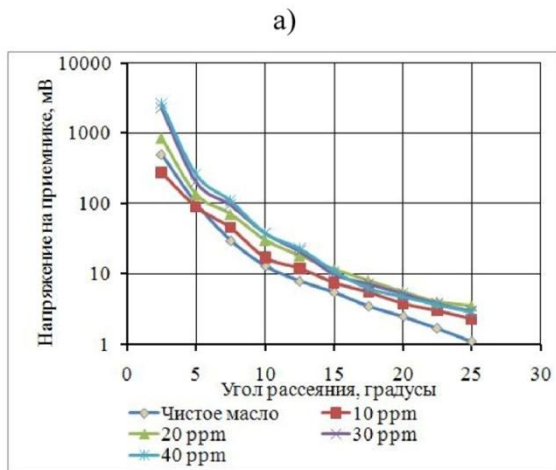


Рис. 3. Экспериментальные результаты: а – распределение интенсивности рассеянного света по углу для разной концентрации воды; б – зависимость интенсивности рассеянного света от концентрации воды при угле рассеяния 7,5°; в) – сравнение расчетной зависимости интенсивности рассеянного света от угла с экспериментальными данными: А – дифракционная составляющая, Б – геометрооптическая составляющая, В – суммарная кривая, Г – экспериментальные результаты с массовой долей воды 40×10^{-6} .

Видно, что при угле рассеяния 7,5 градусов наблюдается монотонная зависимость сигнала приемника от концентрации воды в масле, что может позволить определять содержание воды по сигналу рассеяния. Следует отметить, что для углов рассеяния, меньших 5 градусов, наблюдается

немонотонная зависимость сигнала рассеяния от массовой доли воды в масле, что требует дальнейшего исследования.

Можно предположить, что вклад в рассеяние дает как дифракция, так и преломление [5]. Сравнение результатов расчетов, полученных на основе формул, приведенных в [5], с нашими экспериментальными результатами показало удовлетворительное качественное согласие (см. Рис. 3б).

Полученные данные показывают, что сигнал приемника резко спадает с характерными неоднородностями на несколько порядков при изменении угла рассеяния до 20° , что только и можно считать совпадением с расчетами. Так как условия эксперимента существенно отличаются от теоретических (близкое расположение фотоприемника по сравнению с протяженностью рассеивающей области), происходит усреднение по разным углам рассеяния и эти особенности гораздо слабее выражены. В доступных нам источниках конфигурация, соответствующая нашему эксперименту, не рассматривалась. Не анализировалась теоретически и схожая с нашей схема фирмы FAUDI [2], причем как самой фирмой, так и другими исследователями.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе полученных экспериментальных результатов установлено, что при угле рассеяния $7,5$ градусов наблюдается монотонная зависимость сигнала приемника от количества воды, что подтверждает возможность разработки отечественного датчика контроля содержания свободной воды в несмешивающейся жидкости для достаточно низкой концентрации $10 - 40$ ppm.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ваена S., Repetto S.L., Lawson C.P. et al. // Progress in Aerospace Science. 2013. V. 60. P. 35.
2. Официальный сайт FAUDI Aviation GmbH. URL: https://www.faudi-aviation.com/fileadmin/user_upload/BA_AFGUARD_Ex_rev2.3_English.pdf.
3. Toru Katsumata, Hiroaki Aizawa, Shuji Komuro, et al. // International Dairy Journal, 2020. V. 109. No. 104743.

4. Калашников С.П., Мацвейко А.А. // Приборы и техника эксперимента. 1981. №2. С. 169.

5. Qingwei Duan. On the three-dimensional light scattering by a large nonspherical particle based on vectorial complex ray model. Fluid mechanics [physics.class-ph]. Normandie Université; Xidian University (Xi'an (Chine)), 2020. 147 p. URL: <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-02975280/document> (access 20.07.2022).

INVESTIGATION OF LIGHT SCATTERING ON WATER-IN-OIL EMULSIONS TO CONTROL THE WATER CONTENT IN AN IMMISCIBLE LIQUID

**A.I. Ponomarev^{1,*}, O.A. Zayakin², S.P. Kotova², N.N. Losevsky²,
T.N. Sapsina²**

¹ *Samara National Research University
(443086, Samara, street Moscow highway, 34)*

² *Lebedev Physical Institute, Samara Branch
(443011, Samara, Novo-Sadovaya st. 221)*

**E-mail: andrey2000_10@mail.ru*

The dependence of light scattering on small water droplets in an immiscible liquid on the observation angle and the amount of water has been studied to develop a sensor for monitoring the amount of water in aviation fuel. The work is aimed at finding the optimal scattering angle to obtain the highest sensitivity and monotonicity of the signal depending on the amount of water.

Key words: scattering on large drops, sensor for water in kerosene.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЖЕЛЧИ МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ В РАМКАХ ОЦЕНКИ ПЕЧЕНОЧНОЙ НЕДОСТАТОЧНОСТИ ПРИ СИНДРОМЕ МЕХАНИЧЕСКОЙ ЖЕЛТУХИ

В.Н. Приземин¹, Д.С. Сумин^{1,2}, Н.В. Голубова¹, К.Ю. Кандурова¹,
А.В. Мамошин^{1,2}, Е.В. Потапова¹

¹Научно-технологический центр биомедицинской фотоники,
Орловский государственный университет имени И.С. Тургенева,
(302026, г. Орёл, ул. Комсомольская, 95)

²Орловская областная клиническая больница,
(302028, г. Орёл, б-р Победы, 10)
e-mail: vprizemin@gmail.com

В работе описаны результаты исследования состава желчи методом спектроскопии комбинационного рассеяния (КР) у больных с синдромом механической желтухи на момент антеградной декомпрессии желчевыводящих путей и в динамике в послеоперационном периоде. Проводился анализ результатов измерений спектров КР и параметров лабораторной диагностики. Выявлено, что отсутствие характерных пиков билирубина на длинах волн 1255 см^{-1} и 1611 см^{-1} в спектрах КР может служить диагностическим признаком нарушения выделительной функции печени при неблагоприятном течении заболевания. Предложенный подход представляется перспективным в оценке функционального состояния печени и прогнозирования течения печеночной недостаточности при синдроме механической желтухи.

Ключевые слова: спектроскопия комбинационного рассеяния, желчь, механическая желтуха, печеночная недостаточность.

1. ВВЕДЕНИЕ

Наиболее частым и грозным осложнением синдрома механической желтухи, приводящим к развитию летального исхода, является печеночная недостаточность. Своевременное определение и прогнозирование развития нарушения функционального состояния печени занимает важное место в проблеме улучшения результатов лечения больных с обструкцией желчевыводящих путей. В настоящее время для оценки функционального

состояния печени при синдроме механической желтухи используют данные лабораторных методов исследования и различные неспецифические шкалы, недостатками которых являются отсутствие стандартов и статистического характера прогнозов.

Синтез желчных кислот, выделение билирубина и его конъюгация с глюкуроновой кислотой являются специфичными функциями печени. Исследование этих веществ в желчи с целью оценки функционального состояния печени при синдроме механической желтухе представляет значительный интерес для прогнозирования течения болезни. Состав продукта секреции клеток печени может выступать маркером их функционального состояния [1]. Желчь, полученная при выполнении антеградной декомпрессии желчевыводящих путей и в послеоперационном периоде по дренажному катетеру, может служить основой для быстрой и высокочувствительной диагностики.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Целью данной работы было исследование состава желчи методом спектроскопии КР. В исследовании приняли участие 4 пациента с синдромом механической желтухи, обследованные в момент выполнения антеградной декомпрессии желчевыводящей системы и в динамике в послеоперационном периоде. В результате обработки анализировались полосы КР: 1615 см^{-1} и 1264 см^{-1} , характерные для билирубина [2-4]. Забор образцов желчи из дренажного катетера производился в среднем 4-хкратно с периодичностью в 3-4 дня после первичной декомпрессии желчевыводящих путей с параллельным контролем лабораторных показателей.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

В результате анализа данных было обнаружено, что у 3-х пациентов зарегистрирована схожая динамика изменения показателей лабораторной диагностики и данных спектроскопии КР. Отмечено, что при поступлении в стационар наблюдался критически высокий уровень билирубина в крови, а в спектрах КР желчи, напротив, пики, характерные для билирубина, не обнаруживались. При последующих измерениях в динамике после декомпрессии желчевыводящих путей уровень билирубина в крови

постепенно снижался, а в спектрах КР желчи стали отчетливо регистрироваться пики, характерные для билирубина. Результаты спектроскопии КР и лабораторной диагностики для пациентов представлены на рисунке 1 и в таблице 1.

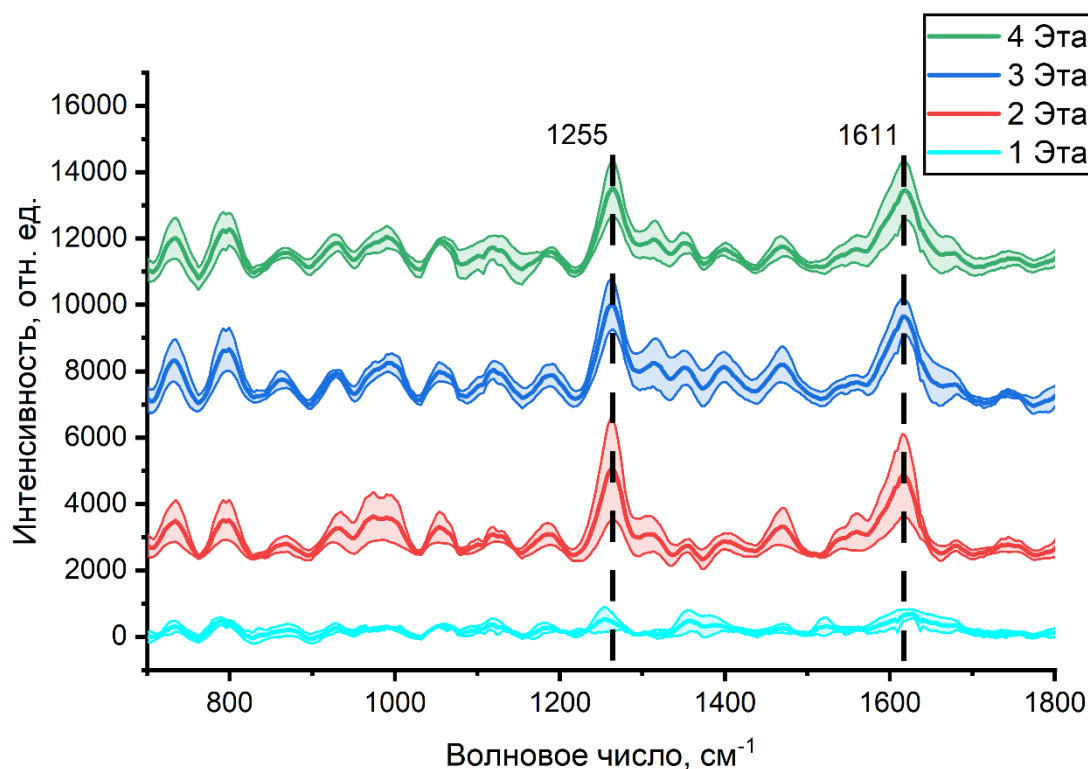


Рис. 1. Спектроскопия КР желчи пациентов, полученной при антеградной декомпрессии желчевыводящих путей

Таблица 1. Параметры лабораторной диагностики

| | | Этап 1 | Этап 2 | Этап 3 | Этап 4 |
|-------------------------------------|-----------|--------|--------|--------|--------|
| Уровень билирубина в крови, Ммоль/л | | 370±65 | 222±35 | 162±88 | 108±65 |
| Баллы Чайлд-Пью | Пациент 1 | 10 | 10 | 10 | 9 |
| | Пациент 2 | 7 | 8 | 7 | 6 |
| | Пациент 3 | 10 | 8 | 8 | 8 |
| Баллы MELD | | 28±7 | 24±2 | 26±1 | 23±5 |
| Длительность заболевания, дней | | 10±4 | | | |

Отдельно был проведен анализ данных четвертого пациента. У данного больного, на первом этапе исследования был отмечен высокий уровень

билирубина в крови, который достаточно резко начал снижаться при дальнейшем наблюдении, и в спектрах КР желчи сразу отмечалось наличие пиков билирубина. Результаты спектроскопии КР и лабораторной диагностики для данного пациента представлены на рисунке 2 и в таблице 2.

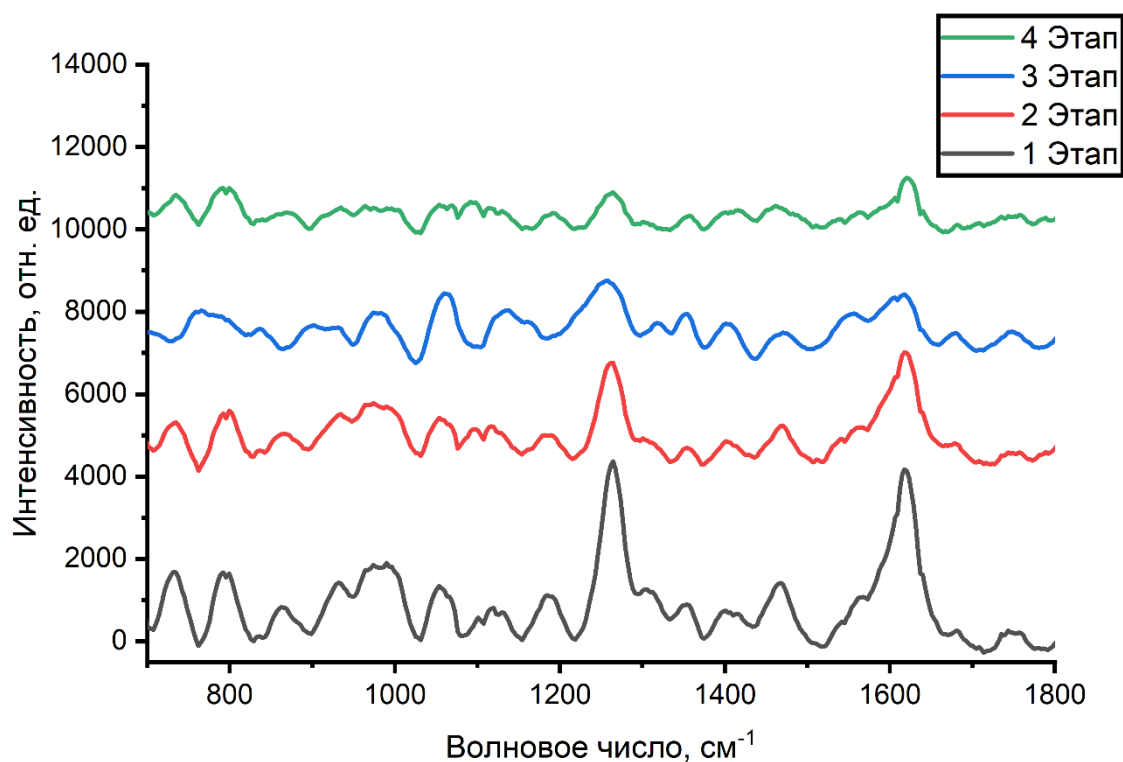


Рис. 2. Спектроскопия КР желчи пациента с хроническим псевдотуморозным панкреатитом, полученной при антеградной декомпрессии желчевыводящих путей

Таблица 2. Параметры лабораторной диагностики

| | Этап 1 | Этап 2 | Этап 3 | Этап 4 |
|--------------------------------------|--------|--------|--------|--------|
| Уровень билирубина в крови, Ммоль/л. | 439 | 96 | 45 | 18 |
| Баллы Чайлд- Пью | 10 | 7 | 6 | 6 |
| Баллы MELD | 32 | 17 | 20 | 15 |
| Длительность заболевания, дней | 3 | | | |

При анализе истории болезни было выявлено, что пациент имел меньшую длительность заболевания и характер заболевания (хронический

псевдотуморозный панкреатит) не был непосредственно связан с угнетением выделительной функции печени.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Анализ результатов показал, что угнетение выделительной функции гепатоцитов при синдроме механической желтухи влияет на уровень билирубина в желчи. При этом наблюдается значительное снижение амплитуды пиков билирубина в характерных полосах комбинационного рассеяния: 1615 см^{-1} , 1264 см^{-1} . По мере улучшения состояния пациентов наблюдалось повышение содержания уровня билирубина в желчи. Эти данные коррелировали с уровнем фракций билирубина и печеночных ферментов в крови, длительностью механической желтухи и этиологией обструкции желчевыводящих путей. Предложенный подход может являться чувствительным и перспективным в оценке функционального состояния печени и прогнозировании течения заболевания.

Исследование было выполнено при поддержке Российского научного фонда в рамках проекта № 21-15-00325.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Я.В. Ганиткевич, Я.И. Карбач, Исследование желчи. Биохимические и биофизические методы. // К.: Вища шк., 1985, 136 с.
2. Yang, B. Resonance Raman spectroscopy of bilirubins: band assignments and application to bilirubin/lipid complexation / B. Yang, M.D. Morris, M. Xie, D.A. Lightner// Biochemistry. – 1991. – V. 30. – №. 3. – P. 688-694.
3. Celis, F. Surface-enhanced Raman scattering and theoretical study of the bilichromes biliverdin and bilirubin / F. Celis, M.M. Campos-Vallette, J.S. Gómez-Jeria, R.E. Clavijo, G.P. Jara, C. Garrido// Spectroscopy Letters. – 2016. – V. 49. – №. 5. – P. 336-342.
4. Vu, T.D. Feasibility of voltage-applied SERS measurement of bile juice as an effective analytical scheme to enhance discrimination between gall bladder (GB) polyp and GB cancer / T.D. Vu, E. Jang, J. Lee, D. Choi, J. Chang, H. Chung // Analytical Chemistry. – 2020. – V. 92. – №. 12. – P. 8159-8169.

STUDY OF BILE BY RAMAN SPECTROSCOPY AS PART OF THE ASSESSMENT OF LIVER FAILURE IN OBSTRUCTIVE JAUNDICE SYNDROME

V.N. Prizemin¹, D.S. Sumin^{1,2}, N.V. Golubova¹, K.Y. Kandurova¹,
A.V. Mamoshin^{1,2}, E.V. Potapova¹

¹ Orel State University named after I.S. Turgenev
(Komsomolskaya str., 95, Orel, Russia, 302026)

²Orel Regional Clinical Hospital,
(Pobedy blvd., 10, Orel, Russia, 302028)
e-mail: vprizemin@gmail.com

The work describes the results of bile composition investigation by Raman spectroscopy in patients with obstructive jaundice syndrome at the moment of antegrade biliary tract decompression and in dynamics in the post-operative period. The analysis of measurement results of Raman spectra and parameters of laboratory diagnostics was carried out. It was found out that absence of characteristic peaks of bilirubin at the wavelengths 1255 cm^{-1} and 1611 cm^{-1} in Raman spectra can serve as a diagnostic sign of liver excretory function disturbance at unfavorable course of the disease. The proposed approach appears promising in evaluation of functional state of the liver and prediction of the course of liver failure in obstructive jaundice syndrome.

Keywords: Raman spectroscopy, bile, obstructive jaundice, liver failure.

ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИЕ МОДУЛЯТОРУ СУБМЕГАГЕРЦОВОГО ДИАПАЗОНА

И. Г. Рютин^{1,2}, А. В. Кузнецов^{1,2}, А.А. Жукович-Гордеева^{1,2},
Е. П. Пожидаев^{1,2}

¹Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук
(119991 ГСП-1 Москва, Ленинский проспект, д.53)

²Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)»
(125993, г. Москва, Волоколамское шоссе, д. 4)
e-mail: iryutin@mail.ru

Аннотация — В данной работе рассматриваются работа ячеек ДНФ с субволновым шагом спирали сегнетоэлектрического жидкого кристалла толщиной слоя 1,5 мкм в режим деформированной спирали и возможность достижения субмегагерцового диапазона модуляции света.

Ключевые слова: электрооптический модулятор, жидкие кристаллы, ДНФ.

1. ВВЕДЕНИЕ

Сегнетоэлектрические жидкокристаллические ячейки с деформированной спиралью (DNFLC) [1, 2] успешно применяются в дисплеях, модуляции добротности лазера, управляемых дифракционных решётках, лазерных пинцетов [3] как самый быстрый электрооптический режим жидких кристаллов достигая субмегагерцового диапазона в широком диапазоне температур [4, 5].

2. ДНФ ЭФФЕКТ

Электрически управляемое двулучепреломление $\Delta n_{eff}(E) = \langle n_h(E) - n_p(E) \rangle$ представляет собой деформацию спиральной структуры ЖКС и отклонения $\Delta\psi(E)$ главной оптической оси в электрическом поле [1, 2, 6, 7, 8], см. Рис. 1.

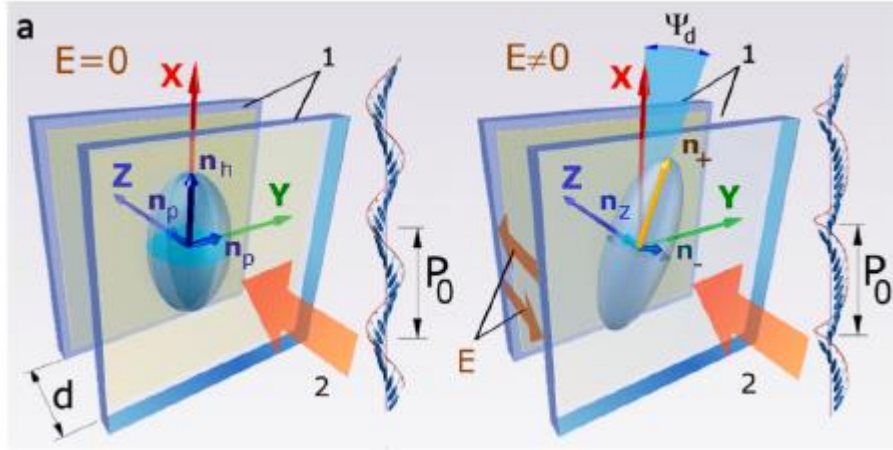


Рис. 1. Иллюстрация двуслойной трансформации эллипсоида эффективных показателей преломления спиральной nano структуры в электрическом поле в планарно ориентированной DHF-ячейке. [3]

При субволновом шаге спирали коэффициент светопропускания T_h DHFLC, размещенной между скрещенными поляризаторами, выражается как [7-9]:

$$T_h = \sin^2 2[\beta \pm \Delta\Psi(E)] * \sin^2 \frac{\Delta\Phi(E)}{2}, (1)$$

где β - угол между плоскостью поляризации входного линейно поляризованного света и осью X (см. рисунок 1), а $\Delta\Phi$ записывается как:

$$\Delta\Phi(E) = \frac{2\pi d_{FLC} \Delta n_{eff}}{\lambda}, (2)$$

Здесь λ - длина волны, d_{FLC} - толщина слоя FLC, и $\Delta n_{eff} = \Delta n_{eff}^{E=0} + \Delta n_{eff}(E)$.

Если падающий поляризованный свет распространяется параллельно смектическим слоям DHFLC с шагом спирали субволновой длины, то, согласно [7, 8], электрически управляемое двулучепреломление пропорционально квадрату электрического поля E:

$$\Delta n_{eff}(E) = (n_h - n_p) \frac{\sin^2 2\theta}{1 - \frac{3}{2} \sin^2 \theta} G^2 E^2, (3)$$

Здесь θ - угол наклона, n_p , n_h - обычный и экстраординарный показатели преломления соответственно, и

$$G = \frac{\varepsilon_0 \chi_G}{P_s}, \quad (4)$$

где ε_0 - диэлектрическая проницаемость вакуума, P_s - спонтанная поляризация; χ_G - диэлектрическая восприимчивость в режиме Голдстоуна. Отклонение $\Delta\Psi(E) \ll \theta$ основной оси ЖКС в электрическом поле при $\beta=0$ пропорционально электрическому полю [10]:

$$\Delta\Psi(E) = \frac{\sin 2\theta}{2(1 - \frac{3}{1} \sin^2 \theta)} GE, \quad (5)$$

Таким образом, как $\Delta n_{eff}(E)$, так и $\Delta\Psi(E)$ зависят от диэлектрической восприимчивости χ_G , в то время как ее хорошо известным неотъемлемым свойством является диэлектрическая дисперсия. Следовательно, Δn_{eff} и $\Delta\Psi$ должны быть также зависят от частоты.

4. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ

Типичная диэлектрическая дисперсия DHFLC с субволновым шагом спирали наблюдается очень четко в широком диапазоне частот от 1 кГц до 200 кГц, см. рис. 2. В экспериментах использовался ЖКС-576.

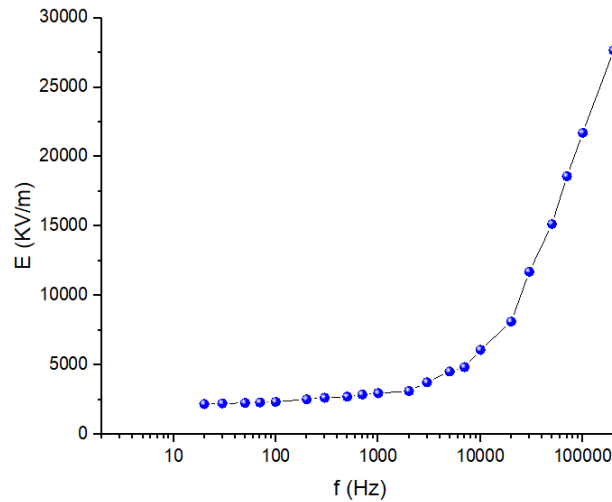


Рис. 3. Зависимость напряжённости поля близкого к напряжённости поля раскрутки спирали от частоты подаваемого сигнала на ячейку ЖКС-576 толщиной слоя 1,5 мкм.

В DHFLC наблюдаются два основных электрооптических эффекта. Разница между этими эффектами связана в первую очередь с ориентацией плоскости поляризации падающего света относительно основной оптической оси спиральной структуры. Две ориентации, соответствующие двум основным электрооптическим режимам DHFLC, являются наиболее важными:

$$|\beta| = |\Delta\Psi|, (6)$$

$$\beta = 0 \text{ или } \frac{\pi}{2}, (7)$$

При условии (6) электрооптический отклик чувствителен к полярности приложенного напряжения (рис. 4), аналогично отклику ячеек SSFLC [10]. Однако отклик ячейки DHFLC (время отклика $\tau_{0.1-0.9} \cong 1\text{ мс}$ при частоте управляющего напряжения 400 кГц, см. нижнюю осциллограмму на рис. 4) значительно быстрее по сравнению с ячейками SSFLC.

Причиной такого улучшения является как раз работа ячейки в области дисперсии (рис. 2), где реальные отклонения молекул от их положений равновесия становятся меньше с увеличением частоты приложенного

напряжения. Следовательно, время, необходимое для достижения новых положений равновесия, также уменьшается.

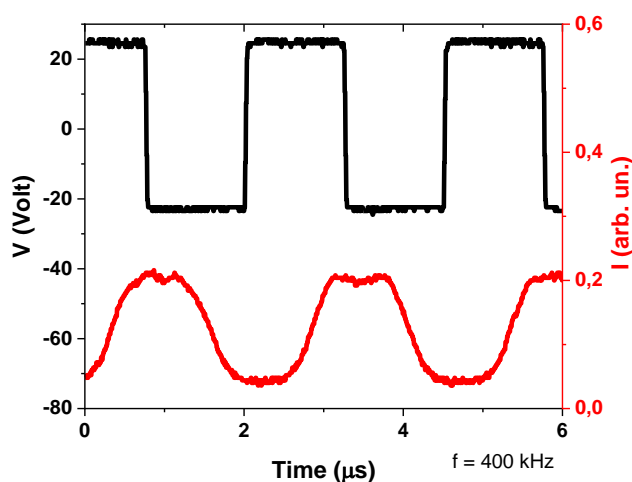


Рис. 4. Осциллограммы отклика электрооптической ячейки (красная кривая снизу) на основе сегнетоэлектрика ЖКС-576, толщина слоя которого 1,5 мкм, и управляющего напряжения, приложенного к ячейке (верхняя кривая).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итак, электрооптический режим DHFLC при условии (6) обеспечивает очень короткое время отклика, которое практически не зависит от температуры, как было показано ранее [9]. Была достигнута частота модуляции 400 КГц, и времена отклика 0,5 мкс. Но при увеличении чистоты падает светопропускание и возникает проблема перегрева ячейки токами смещения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. L.A. Beresnev, L.M. Blinov, D.I. Dergachev, S.B. Kondratev. JETP Lett. 46(8), 328 (1987).
2. L.A. Beresnev, V.G. Chigrinov, D.I. Dergachev, E.P. Pozhidaev, J. Funfshilling, M. Schadt, Liq. Cryst. 5(4), 1171 (1989).
3. Evgeny P. Pozhidaev, Sofia I. Torgova, Vadim A. Barbashov, Electro-optics of ferroelectric and antiferroelectric liquid crystal helical nanostructures, 9 (2022)

4. V.G. Chigrinov, H.S. Kwok, E.P. Pozhidaev, T.Z. Lu. Proc. Second Asia-Pacific Polymer Fiber Optics Workshop, 149 (2003).
5. W. Haase, A. Suvorova, I. Chernyaev, N. Kundikova, E. Pozhidaev, F. Podgornov, Integr. Ferroelectr. 87, 3 (2007).
6. E.P. Pozhidaev, S.A. Pikin, D. Ganzke, S.A. Shevtchenko, W. Haase, Ferroelectr. 246(1-4), 1141 (2000).
7. I. Abdulhalim, G. Moddel, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 200, 79 (1991).
8. E. Pozhidaev, S. Torgova, M. Minchenko, C.A.R. Yednak, A. Strigazzi, E. Miraldi, Liq. Cryst. 37(8), 1067 (2010).
9. V.G. Chigrinov, *Liquid Crystal Devices: Physics and Applications* (Artech House, Boston, London 1999).
10. N.A. Clark, S.T. Lagerwall, J. Appl. Phys. 36, 899 (1980).

LIQUID CRYSTAL ELECTRO-OPTICAL MODULATORS OF THE SUBMEGAHERTZ RANGE

**I. G. Ryutin^{1,2}, A.V. Kuznetsov^{1,2}, A.A. Zhukovich-Gordeeva^{1,2}, E. P.
Pozhidaev^{1,2}**

¹ *Federal State Budgetary Institution of Science P.N. Lebedev Physical Institute
of the Russian Academy of Sciences*

(119991 GSP-1 Moscow, Leninsky Prospekt, 53)

² *Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education "Moscow
Aviation Institute (National Research University)"*

(125993, Moscow, Volokolamsk Highway, 4)

e-mail: iryutin@mail.ru

Abstract — This paper discusses the operation of DHF cells with a subwavelength pitch of a ferroelectric liquid crystal spiral with a layer thickness of 1.5 microns in a deformed spiral mode and the possibility of achieving a submegahertz light modulation range.

Keywords: electro-optical modulator, liquid crystals, DHF.

ОПТИЧЕСКИЙ МЕТОД ОЦЕНКИ СОСТАВА МИНЕРАЛЬНОГО КОМПОНЕНТА КОМПАКТНОЙ КОСТНОЙ ТКАНИ ПОСЛЕ ПРОТОЧНОЙ ДЕЛИПИДАЦИИ

Р.Т. Самигуллин¹, П.Е. Тимченко¹, Е.В. Писарева¹, О.О. Фролов¹,
Л.Т. Волова²

¹Самарский национальный исследовательский университет,
(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)

²Самарский государственный медицинский университет, НИИ БиоТех,
(443079, г. Самара, ул. Гагарина, 20)
e-mail: samigullin.ravil2015@yandex.ru

В работе представлены результаты исследований состава минерального компонента кости (МКК) с помощью метода спектроскопии комбинационного рассеяния. Объектами исследования являлись группы образцов МКК, изготовленных по технологии «Лиопласт»® с заменой вакуумной делипидации на проточную. В качестве дополнительной обработки была использована фильтрация растворов. В результате проведенных экспериментов показано, что при получении МКК можно использовать проточную делипидацию.

Ключевые слова: Минеральный компонент кости, спектроскопия комбинационного рассеяния, делипидация, фильтрация, деминерализация

1. ВВЕДЕНИЕ

Обеспечение полной регенерации костной ткани в области дефектных участков кости, несмотря на накопленные знания в этом вопросе и широкому спектру применяемых биоматериалов, – одна из острейших проблем регенеративной медицины [1].

С увеличением востребованности в поиске биологически совместимых материалов, удовлетворяющих критериям стандартов, предъявляемых к активным имплантируемым медицинским изделиям, появилась необходимость в оценке качественного и количественного состава минерального компонента кости (МКК), изготовленного по технологии «Лиопласт»® (ТУ-9398-001-01963143-2004).

Известно, что липиды участвуют в механизме минерализации костной ткани, в которой снижение их концентрации *in situ* указывает на активную

минерализацию, так как липиды связывают белки и минералы [2], а скорость репаративного остеогенеза в области костного дефекта напрямую зависит от качества МКК и его физико-химических свойств (состав, размеры и пористость частиц, их способность к агрегации) [3]. С другой стороны, образование токсических перекисных соединений, в первую очередь гидроксил-радикала OH^\cdot в результате перекисного окисления липидов индуцирует повреждение клеточных структур, в первую очередь мембран. Поэтому, в процессе вакуумной делипидации достигается максимальное удаление липидов и свободной воды из кости.

Из этого следует, что успешный результат профилактики и лечения заболеваний, связанных с потерей костной массы, зависит от аллогенных свойств вещества, липидного состава и контроля качества производства МКК. В процессе получения МКК необходим постоянный мониторинг контроля качества материала с оценкой его органической и липидной составляющей.

Биоимплантаты должны соответствовать требованиям вышеуказанных технических условий. Относительное содержание липидов в костной ткани после обработки должно составлять менее 5%. Стандартная обработка по ТУ включает вакуумную делипидацию исходного материала. Поэтому одной из задач настоящего исследования стало определение целесообразности предварительной отмывки костной ткани под вакуумом, что требует специального дорогостоящего оборудования.

Для оценки биоматериалов различного назначения наиболее распространёнными являются физические методы. [4,5]. В работе [4] с помощью метода рентгеновской дифракции были исследованы образцы минеральной составляющей зубов. В данной работе были изучены люминесцентные характеристики аналога минеральной составляющей эмали зубов нанокристаллического карбонат-замещенного ГАП кальция В-типа с дефектами на поверхности.

Методы спектроскопии являются эффективными методами в изучении структуры МКК [5]. В работе [6] методом рамановской спектроскопии уменьшение относительного содержания карбонат-ионов В-типа в образцах при развитии коксартроза.

Нами ранее было показано в работе [7], что с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния можно оценивать уменьшение минеральных

компонентов в процессе деминерализации гидроксиапатита, полученного от разных доноров и распад органических веществ при термическом воздействии.

Цель работы: исследования состава минерального компонента компактной кости ткани после проточной делипидации с помощью рамановских спектров.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Объектами исследования являлись группы образцов МКК, изготовленных по технологии «Лиопласт»® из компактной костной ткани коровы (породы *Bos taurus*). Образцы разделены на 2 основные группы: полученные из фильтрованных и нефильтрованных растворов после деминерализации костной ткани животных в соляной кислоте концентрацией 2,4н. Фильтрация растворов осуществлялась через фильтры типа «красная лента», с размером пор 8-12 мкм. Количество образцов n каждого вида составляло 10.

В качестве основного метода исследования порошка МКК использовался метод спектроскопии комбинационного рассеяния света (рис.1), реализованный с помощью цифрового спектрометра высокого разрешения AndorShamrockSR-303i со встроенной охлаждающей камерой DV420A-0E, обеспечивающей спектральное разрешение $1,5 \text{ см}^{-1}$, и волоконным световодом, оптическим зондом для рамановской спектроскопии RPB785, совмещенным с лазерным модулем LuxxMaster LML-785.0RB-04 (до 500 мВт, длина волны 785 нм) [8]. Спектры снимали в трех различных точках и усреднялись с помощью пакета программного обеспечения «Wolfram mathematica» [9].

В качестве дополнительного метода исследования был проведён биохимический анализ. Концентрацию липидов в образцах МКК определяли колориметрически на спектрофотометре «Shimadzu UVmini-1240» (Япония) по реакции с ацетилацетоном и выражали в мг/г ткани [10].

3. АНАЛИЗ

На рисунке 1 приведены результаты исследований образцов МКК.

В спектрах МКК наблюдаются изменения на линии 960 см^{-1} ($\nu \text{ PO}_4^{3-}$) обусловлены разной степенью деминерализации исследуемых образцов [7].

Для повышения информативности полученных спектров КР был произведен нелинейный регрессионный анализ спектров, состоящий в их разложении на спектральные линии. Результаты разложения спектрального контура на сумму распределений линий Гаусса имеет следующие характеристики. Среднее значение коэффициента детерминации результирующего спектра от исходного в области 800-1780 см^{-1} составило $R^2 = 0,99$, относительная погрешность определения интенсивности спектральных линий а не превышает 7%, усредненное стандартное отклонение координаты линии x_0 составляет 0,9 см^{-1} , усреднённое стандартное отклонение ширины линии (HWHM) Гаусса dx составило 1,9 см^{-1} .

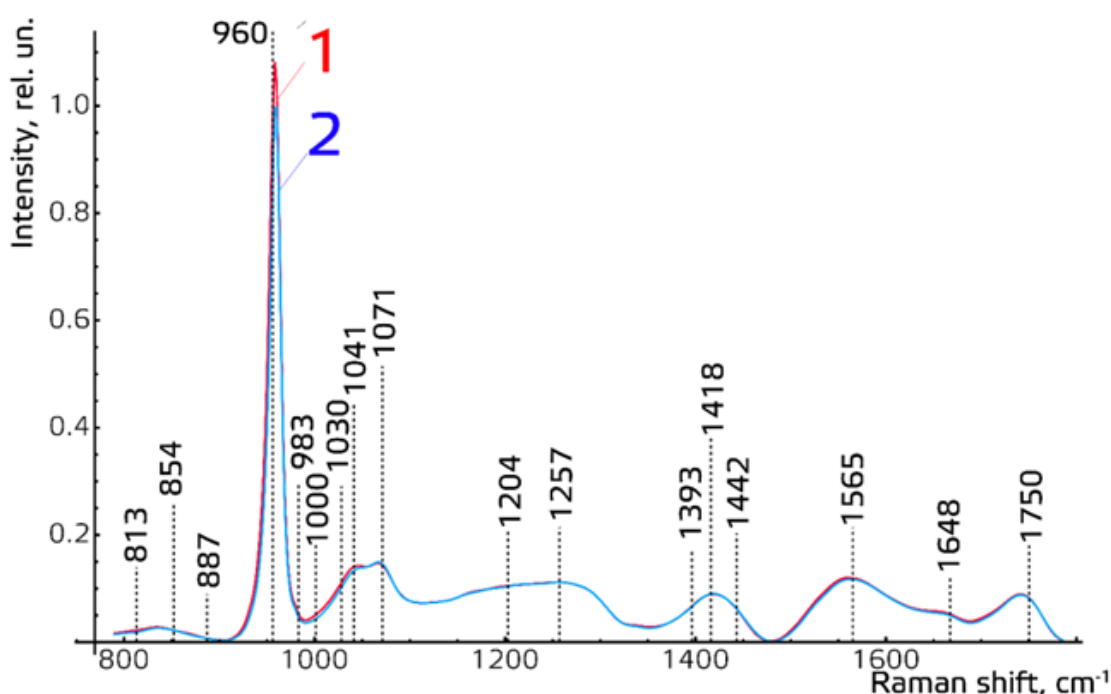


Рис. 1. Усредненные спектры комбинационного рассеяния МКК коровы, полученного из: 1 – нефльтрованного раствора (красный); 2 – фильтрованного раствора (синий)

Для относительной количественной оценки компонентного состава МКК использовались отношения интенсивности линий КР к интенсивности линии амида I. Для дальнейшего анализа полученных после разделения спектральных линий исследуемых объектов был выбран метод линейного дискриминантного анализа в программной среде IBM SPSS Statistics.

На рисунке 2(а) представлены результаты LDA сравнения двух групп образцов. Проанализированы 108 спектров МКК (54 фильтрованных и 54

нефильтрованных). Дискриминантная функция LD-1 описывает дисперсию на 100 %. Положительные значения LD-1 в большей степени характерны для спектров КР, полученных фильтрованных материалов, и наоборот отрицательные – для нефильтрованных. Области групп имеют значительное пересечение в интервале LD-1 = {-1,25; 1,75}.

На рисунке 2(б) показаны коэффициенты матрицы факторной структуры, имеющие физический смысл корреляции между переменными в модели и дискриминирующей функцией. Чем выше по модулю значение LD-1 для переменной, тем в большей степени она определяет разницу в дискриминационной модели между группами образцов. Специфичность диагностической модели на основе дискриминантного анализа составила 50%, чувствительность 55,6%, что говорит о том, что статистически значимых изменений в спектральном составе между группами образцов нет.

В ходе биохимического анализа получены достоверные отличия между образцами МКК из фильтрованных и нефильтрованных растворов.

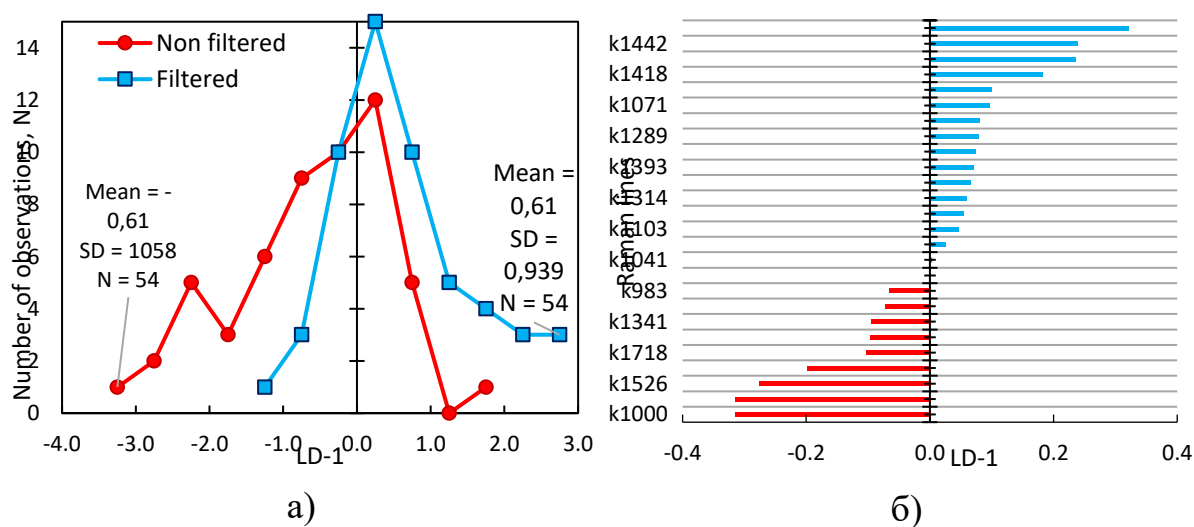


Рис. 2. Результаты линейного дискриминантного анализа: а) График значений линейной дискриминантной функции для образцов МКК, б) Значения коэффициентов факторной структуры

Таблица 1. Содержание липидов в образцах МКК коровы при концентрации кислоты 2,4 н. (* – отличия от образцов, полученных без этапа фильтрации деминерализующего раствора ($p < 0,001$)).

| Сутки | Компактная костная ткань | |
|-------|--------------------------|-----------------------|
| | Нефильтрованный раствор | Фильтрованный раствор |
| 1 | 5,16±0,36 мг/г | 2,63±0,02* мг/г |
| 2 | 3,58±0,12 мг/г | 2,59±0,03* мг/г |
| 3 | 7,60±0,07 мг/г | 5,82±0,26* мг/г |

В таблице 1 приведены результаты исследований, колориметрическим методом на спектрофотометре по реакции с ацетилацетоном, образцов МКК коровы из компактной костной ткани при различной длительности деминерализации (1-3 сутки). При исключении этапа фильтрации содержание триглицеридов выше, чем у образцов из фильтрованных растворов, отмечен волнообразный характер изменения концентрации липидов в минеральном компоненте кости, что связано с особенностями строения компактного вещества костной ткани и послойным выходом компонентов, в том числе органических веществ, из кости в процессе деминерализации.

Все полученные значения липидов не превышают требований ТУ, по которым производятся костные аллогенные биоимплантаты. Все образцы получены без применения вакуумной делипидации, в связи с чем данный этап в процессе получения МКК можно исключить.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведенных исследований установлены спектральные изменения образцов МКК, изготовленных по технологии «Лиопласт»® в процессе их очистки и фильтрации. Проведен хемометрический анализ спектров комбинационного рассеяния образцов МКК, полученных с использованием проточной делипидации. Установлено, что незначительные различия между исследуемыми образцами проявляются на линии комбинационного рассеяния 960 см^{-1} ($\nu\text{ PO}_4^{3-}$), что обусловлено разной степенью деминерализации образцов. Значимых изменений на других

линиях КР не обнаружено, что свидетельствует о том, что проточная делипидация МКК является достаточной, а также является экономически выгодной по сравнению с применением стандартной вакуумной очистки.

Результаты исследований подтверждены биохимическим анализом.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. H.F. Pereira, I.F. Cengiz, F.S. Silva, R.L. Reis, J.M. Oliveira, Scaffolds and coatings for bone regeneration. // J. Mater. Sci. Mater. Med., 2020, v.31.
2. S. Weiner, W. Troub, H.D. Wagner, Lamellar bone: structure-function relations. // J. Struct. Biol., 1999, № 126, p. 241-255.
3. М.З. Федорова, С.В. Надеждин, Н.А. Павлов, Е.В. Зубарева, Исследование остеоиндуктивных и остеокондуктивных свойств костнопластических материалов на основе гидроксиапатита и коллагена. // Нанотехнологии и охрана здоровья, 2010, № 1, с. 42-46.
4. D.L. Goloshchapov, P.V. Seredin, D.A. Minakov, E.P. Domashevskaya, Photoluminescent properties of nanoporous nanocrystalline carbonate-substituted hydroxyapatite. // Optics and Spectroscopy, 2018, т. 124, № 2, с. 187-192.
5. Д.Л. Голощапов, В.М. Кашкаров, Н.А. Румянцева и др., Получение нанокристаллического гидроксилатапатита методом химического осаждения с использованием биогенного источника кальция. // Конденсированные среды и межфазные границы, 2011, т. 13, № 4, с. 427–441.
6. Д.В. Киселева, Применение Рамановской микроспектроскопии для исследования структурных особенностей биогенного апатита. // Ежегодник Тр. ИГГУрОРАН., 2010, № 157, с. 332–335.
7. P.E. Timchenko, E.V. Timchenko, E.V. Pisareva, M.Yu. Vlasov, L.T. Volova, O.O. Frolov, A. R. Kalimullina, Experimental studies of hydroxyapatite by Raman spectroscopy. // Journal of optical technology, 2018, v.85, Issue 3, p. 130-135.
8. P.E. Timchenko, E.V. Timchenko, L.T. Volova, O.O. Frolov, Spectral Analysis of Organic Components of Demineralized Bone Biografts. // Optics and Spectroscopy, 2019, v.126, Issue 6, p.769-775.

9. P.E. Timchenko, E.V. Timchenko, L.T. Volova, O.O. Frolov, M. A. Zybin, I.V. Bazhutova, Raman spectroscopy of changes in the tissues of teeth with periodontitis. // *Diagnostics*, 2020, v.10.
10. А. И. Карпищенко и др., Медицинские лабораторные технологии: Справочник: (В 2 т.). // СПб.:Интермедика, 1999, 92-93 с.

OPTICAL METHOD FOR ASSESSING THE COMPOSITION OF THE MINERAL COMPONENT OF COMPACT BONE TISSUE AFTER FLOW DELIPIDATION

**R.T. Samigullin¹, P.E. Timchenko¹, E.V. Pisareva¹, O.O. Frolov¹,
L.T. Volova²**

¹Samara National Research University

(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)

²Samara State Medical University, BioTech Research Institute,

(443079, Samara, st. Gagarina, 20)

e-mail: laser-optics.timchenko@mail.ru

The paper presents the results of studies of the composition of the mineral bone component (MBC) using the Raman spectroscopy method. The objects of the study were groups of MBC samples made using the Lioplast® technology with the replacement of vacuum delipidation with flow delipidation by successive washing in hydrogen peroxide and ether. Solution filtration was used as an additional treatment. As a result of the experiments performed, it was shown that flow delipidation can be used to obtain this type of bio-materials (MBC).

Keywords: Mineral component of bone, Raman spectroscopy, demineralization, production of xenomaterials.

МСR-АНАЛИЗ СПЕКТРОВ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ КОЖИ РАЗНЫХ ФОТОТИПОВ

Е.В. Сорокина, Ю.А. Христофорова, И.А. Матвеева

*Самарский национальный исследовательский университет,
(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)
e-mail: hellitio15@gmail.com*

Было проведено экспериментальное измерение спектров комбинационного рассеяния кожи внутреннего предплечья волонтеров с разными фототипами. Измерения проводились с помощью зондирующего лазерного излучения ближнего ИК с длиной волны 785 нм. С помощью МСR анализа проведено разложение спектров кожи предплечья волонтеров разных фототипов на отдельные компоненты. Проанализирован вклад отдельных компонентов в зависимости от фототипа. Сравнительный анализ относительных значений концентраций отдельных компонентов в спектрах кожи разных фототипов позволил оценить различия химического состава кожи в зависимости от фототипа.

Ключевые слова: комбинационное рассеяние, МСR анализ, фототип, кожа, хемометрика.

1. ВВЕДЕНИЕ

Кожа является самым большим органом человека и составляет около 15% от общей массы тела. При этом химический состав кожи может варьироваться в нормальном состоянии в зависимости от типа, цвета и локализации. С другой стороны, изменение химического состава кожи может быть следствием развития заболеваний. Чтобы лучше понимать, какие изменения кожи связаны с различными заболеваниями, важно оценить изменчивость молекулярного состава кожи в нормальном состоянии.

Для неинвазивного анализа биологических тканей успешно применяется спектроскопия комбинационного рассеяния (КР) [1], поскольку этот метод очень чувствителен к структуре и изменениям биохимического состава. Метод спектроскопии КР, основанный на изменении длины волны зондирующего излучения после взаимодействия с

молекулами исследуемого объекта, позволяет с высокой точностью определять наличие химических соединений и их изменение вследствие различных процессов в исследуемой среде. Применение спектроскопии комбинационного рассеивания для измерения состояния кожи представляет собой интерес из-за доступности и простоты экспериментальных измерений.

Цель данной работы – провести разложение на компоненты и анализ спектров КР кожи, оценить вариабельность спектральных характеристик кожи разных локализаций и разных фототипов в нормальном состоянии при разных способах нормировки.

2. МЕТОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Исследование кожи проводилось с использованием экспериментального оборудования, которое включает в себя термостабилизированный полупроводниковый лазерный модуль LML-785.0RB-04 (центральная длина волны $785 \pm 0,1$ нм, 150 мВт), портативный спектрометр QE6500, включающий матричный ПЗС-детектор с термоэлектрическим охлаждением до -15 °С, оптический пробник inPhotonics. Спектры кожи внутреннего предплечья были зарегистрированы в течение 20 секунд с трехкратным накоплением. Добровольцами выступили 32 человека с разными фототипами (10 человек с II фототипом, 8 человек – III и 10 – IV фототипом). У спектров был предварительно удален уровень флуоресценции с помощью полинома 5 степени, затем они были обработаны с помощью сглаживающего фильтра Савицкого-Голея. Анализ спектров КР проводился в диапазоне $1100\text{--}1800$ см⁻¹.

Для анализа спектров КР кожи предплечья волонтеров разных фототипов был применен метод асимметричных наименьших квадратов с многомерным разрешением кривой (MCR-ALS) [2]. MCR-ALS метод позволяет разложить каждый зарегистрированный спектр кожи d в виде линейной комбинации отдельных компонентов, входящих в состав кожи:

$$d = c_1 s^T_1 + c_2 s^T_2 + \dots + c_A s^T_A,$$

где c_1, c_2, \dots, c_A – это концентрации отдельных компонентов, s_1, s_2, \dots, s_A – это спектры отдельных компонентов.

Проведенный MCR анализ позволяет физически интерпретировать компоненты, на которые раскладываются исходные спектры, то есть

получить спектры веществ, составляющих исследуемый образец кожи и оценить их относительный вклад в исходный спектр. Применение MCR анализа для разложения спектров кожи разных фототипов позволит проанализировать относительные различия химического состава кожи разных фототипов.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

MCR анализ был применен к матрице исходных данных, состоящей из 28 спектров кожи предплечья волонтеров с 3 различными фототипами кожи. Было проведено разложение исходных спектров на 7 отдельных компонентов, представленных на рисунке 1. Было проведено сопоставление полученных спектров со спектрами чистых веществ, входящих в состав кожи человека, представленных в работе Фенг и соавторов [3]. Нужно учитывать, что полученные спектры компонентов не являются спектрами чистых веществ. Полученные результаты позволяют предположить, что 1 компонент (рис. 1А) соответствует основному вкладу коллагена, 2 компонент соответствует основному вкладу кератина, 3 компонент (рис. 1Б) наиболее близко описывает спектр меланина, 4 компонент (рис. 1В) можно сопоставить с липидами, 5 компонент (рис. 1Г) соответствует основному вкладу коллагена, 6 компонент (рис. 1Д) можно соотнести с вкладом воды, 7 компонент (рис. 1Е) соответствует основному вкладу гемоглобина.

В результате MCR разложения для каждого отдельного компонента также было рассчитано значение его относительной концентрации во всех спектрах кожи. На основании полученных значений концентраций были построены диаграммы разброса, которые позволили проанализировать, по вкладу каких химических компонент могут различаться спектры кожи разных фототипов. На рисунке 2 представлены диаграммы разброса относительных концентраций некоторых компонентов.

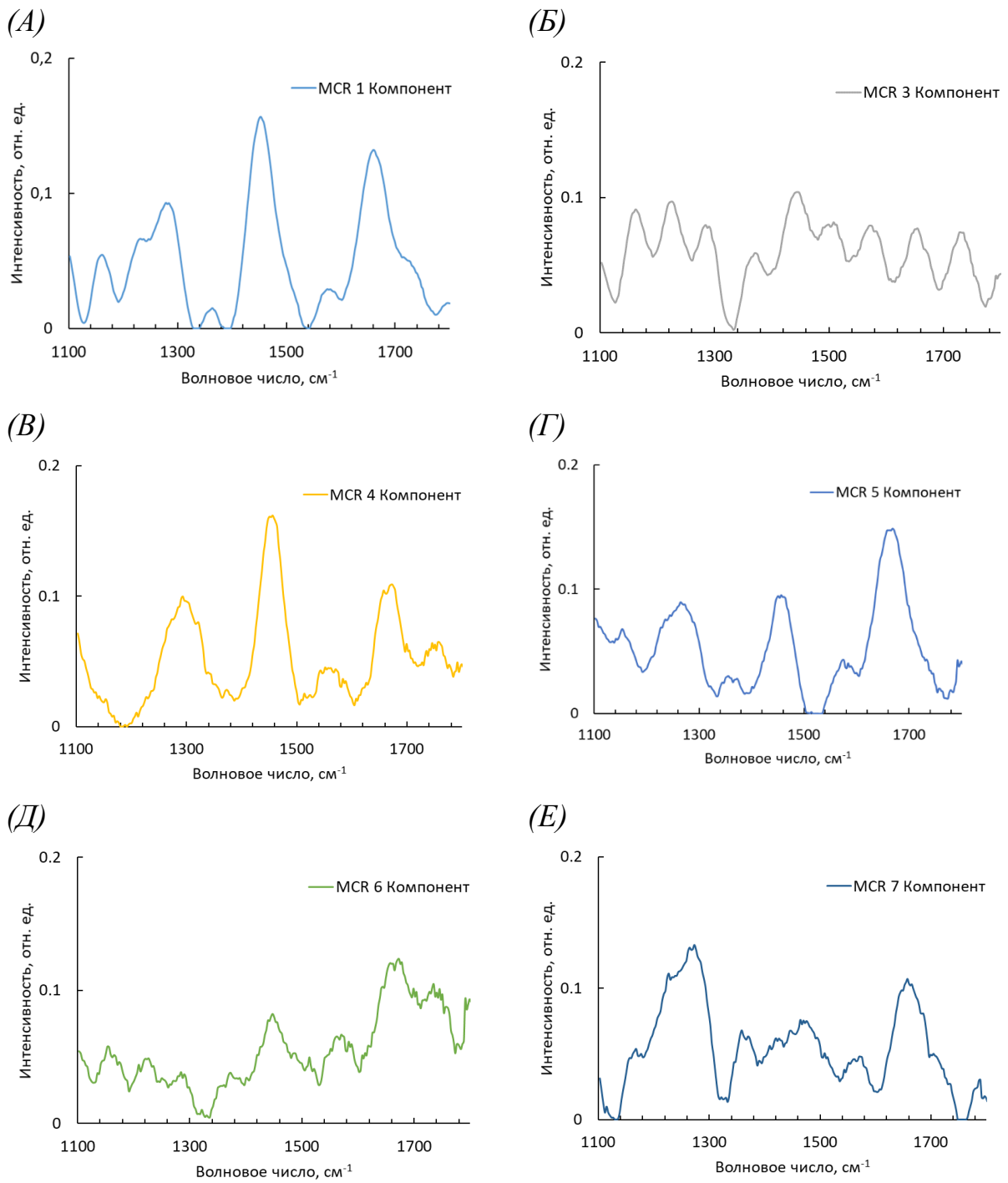


Рис. 1. Спектры отдельных компонентов разложения спектра кожи предплечья

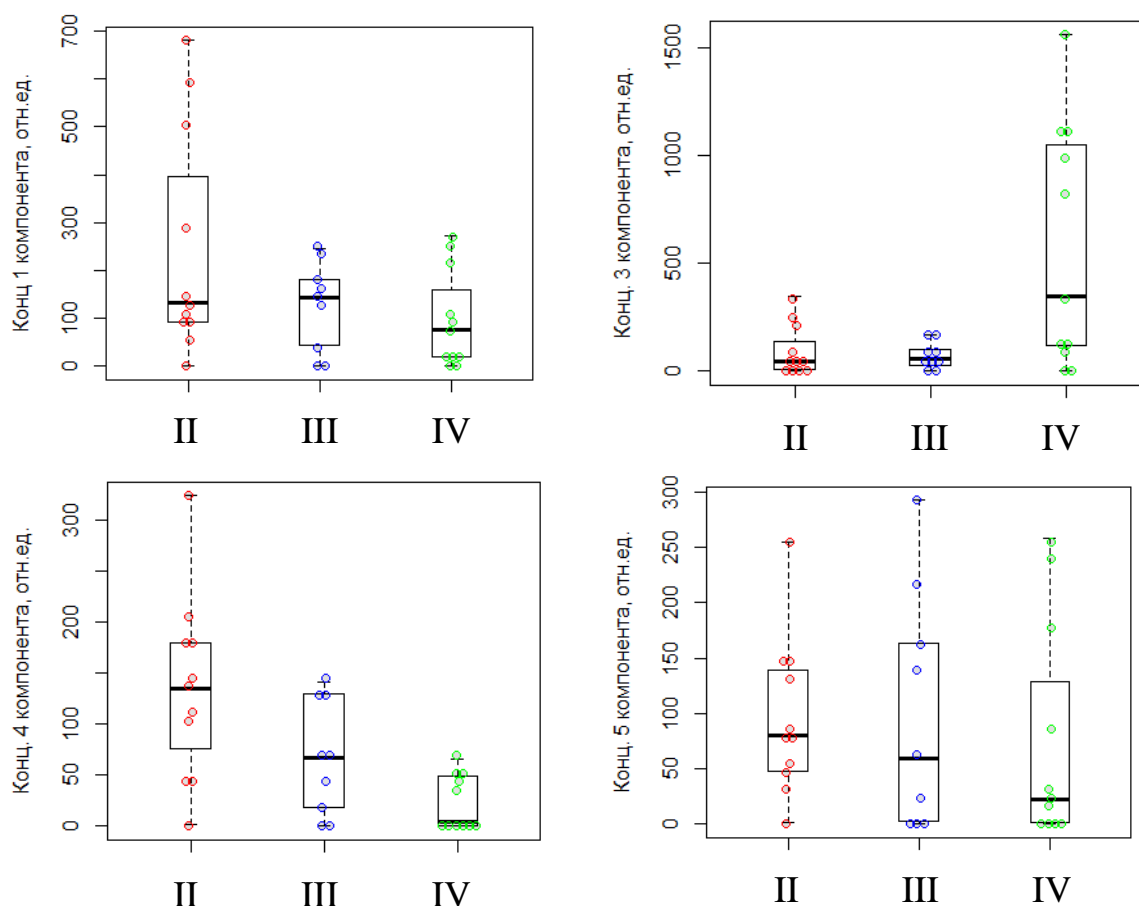


Рис.2. Диаграммы разброса относительных значений концентраций а) 1 компонента, б) 3 компонента, в) 4 компонента, г) 5 компонента.

По диаграммам разброса относительных концентраций видно, что значительные различия значений в зависимости от фототипа кожи наблюдаются для меланина, а также для липидов. При чем различия по концентрации меланина не наблюдаются между II и III фототипом кожи, но существенно различаются с IV фототипом. В остальном различия по химическому составу кожи предплечья в нормальном состоянии является незначительным [3].

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По приведенным результатам можно сделать вывод, что при разложении на химические компоненты спектры комбинационного рассеяния кожи разных фенотипов в нормальном состоянии не наблюдается значительных различий, за исключением меланина, что объясняется

различными биохимическими особенностях кожи на различных анатомических участках тела и влиянии особенностей фенотипов.

Полученные результаты могут использоваться для анализа КР спектральных особенностей кожи человека с нарушенным метаболизмом или пигментацией в следствие различных заболеваний. Данные вычисления могут помочь в дальнейшем определении границ нормы спектральных значений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Cordero, E. In-vivo Raman spectroscopy: from basics to applications / E. Cordero, I. Latka, C. Matthäus et al // Journal of biomedical optics., 2018, v. 23(7), p. 071210.
2. I. A. Matveeva, Y. A. Khristoforova, L. A. Bratchenko, V. P. Zakharov, Analysis of Raman spectra using the multivariate curve resolution-alternating least squares (MCR-ALS) algorithm. // Biomedical Spectroscopy, Microscopy, and Imaging II., 2022, v. 12144. <https://doi.org/10.1117/12.2620966>.
3. X.Feng, A. J Moy, H. T. M. Nguyen, Raman active components of skin cancer. // Biomedical Optics Express., 2017, v. 8. No. 6.

MCR-ANALYSIS OF THE SKIN SCATTERING SPECTRA OF DIFFERENT PHOTOTYPES

E.V. Sorokina, Y.A Khristoforova, I.A. Matveeva

*Samara National Research University,
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)
e-mail: hellitio15@gmail.com*

An experimental measurement of the Raman scattering spectra of the skin of the inner forearm of volunteers with different phototypes was carried out. The measurements were carried out using near-IR probing laser radiation with a wavelength of 785 nm. With the help of MCR analysis, the spectra of the skin of the forearm of volunteers of different phototypes were decomposed into separate components. The contribution of individual components depending on the phototype was analyzed. A comparative analysis of the relative values of the concentrations of individual components in the spectra of skin of different phototypes made it possible to assess the differences in the chemical composition of the skin depending on the phototype.

Keywords: Raman scattering, phototype, MCR-analysis, skin, chemometrics.

ЧИСЛЕННЫЕ СИМУЛЯЦИИ ВРЕМЯПРОЛЕТНОГО МАСС-СПЕКТРОМЕТРА С ИОННЫМ ЗЕРКАЛОМ ДЛЯ ЦЕНТРА ЛАБОРАТОРНОЙ АСТРОФИЗИКИ

Д.С.Труфанов^{1,2}, И.О.Антонов^{1,2}

¹ Самарский национальный исследовательский университет,
(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)
e-mail: ciritopwp@mail.ru

² Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева РАН
(443011, г. Самара, ул. Ново-Садовая, 221)

В данной работе была создана численная модель времяпролетного масс-спектрометра в программе Simion. С помощью численной модели были проведены симуляции времяпролетного масс-спектрометра с изменением потенциалов на электродах с целью увеличения массового разрешения. Также проведены аналитические расчеты и их сравнение с компьютерной симуляцией.

Ключевые слова: времяпролетный масс-спектрометр, Simion, массовое разрешение.

1. ВВЕДЕНИЕ

Астрономические наблюдения и недавние миссии космических аппаратов к кометам Чурюмова-Герасименко и Вильда показали, что в космическом пространстве содержится значительное количество сложных органических молекул (СОМ). Существующие механизмы астрохимических реакций, основаны главным образом на газофазных ионно-молекулярных реакциях. Данные реакции легко протекают в условиях космического пространства благодаря отсутствию энергетического барьера. Однако они плохо объясняют наблюдаемые концентрации и ассортимент космических молекул (>200 видов), потому что для образования СОМ земного типа требуются маловероятные в условиях космоса процессы (трехчастичные столкновения или излучательная ассоциация). Для объяснения образования СОМ в космосе были предложены механизмы реакций протекающих в ледяных мантиях частиц межзвездной пыли инициируемые действием галактических космических лучей и ультрафиолетового излучения звезд. Данные реакции протекают в экзотических условиях ($T < 10\text{K}$, молекулярные льды, состоящие из воды, монооксида углерода, аммиака, метанола и других простых молекул) и крайне плохо изучены. Для их изучения на базе Самарского университета и СФ ФИАН в рамках недавно выигранного

мегагранта создается новая уникальная научная установка для изучения криогенных поверхностных процессов при помощи метода фотоионизационной масс-спектрометрии. Сердце этой установки – времяпролетный масс-спектрометр с ионным зеркалом (рефлектрон) позволяющий разделять катионы SOM, получаемые путем фотоионизации по массе с массовым разрешением $M/\Delta M > 1000$, что достаточно для различения органических молекул образующихся в криогенных поверхностных реакциях. В данной работе при помощи численных симуляций и аналитических расчетов оптимизируется разрешающая способность и эффективность сбора ионов для времяпролетного масс-спектрометра.

Времяпролетный масс-спектрометр с ионным зеркалом, также известный как рефлектрон, был разработан группой советских ученых под руководством Б.А. Мамырина в 1970-х годах. Принцип работы рефлекторна, заключается во временной фокусировке второго порядка, т.е. в функциональной зависимости времени пролета t от энергии ионов E «выключаются» члены первого и второго порядка, что позволяет собрать ионы данной массы M с широким распределением по начальным энергиям ΔE на детекторе в пакет с очень малой темпоральной шириной Δt . Благодаря ионному зеркалу ионы дважды проходят бесполое пространство, что даёт возможность уменьшить габариты масс-спектрометра. Данная конструкция дважды фокусирует ионный пакет, что уменьшает влияние начального энергетического разброса.

В статье [1] подробно рассказывается о принципах работы линейного времяпролетного масс-спектрометра (без ионного зеркала), а также приведены формулы для аналитического расчета времени пролета, и конструкция масс-спектрометра

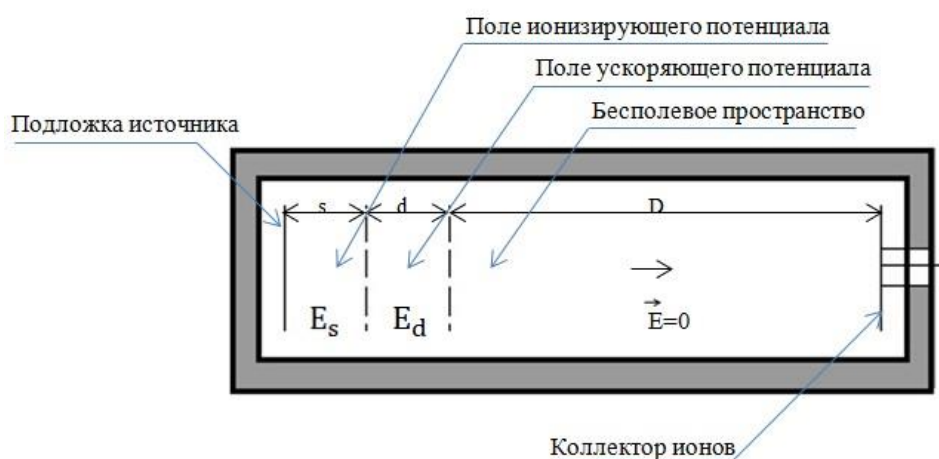


Рис. 1. Базовая геометрия линейного времяпролетного масс-спектрометра

При прохождении через источник любой ион с начальной энергией U_0 увеличит свою энергию до значения U , которое не зависит от m , но

зависит от начальной энергии U_0 , расстояния s и заряда иона q :

$$U = U_0 + qsE_s + qdE_d \quad (1)$$

В этих условиях можно легко показать, что время пролета находится следующим образом:

$$T(U_0, s) = T_s + T_d + T_D \quad (2)$$

$$T_s = 1.02 \frac{(2m)^{\frac{1}{2}}}{qE_s} \left[(U_0 + qsE_s)^{\frac{1}{2}} \pm (U_0)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (3a)$$

$$T_d = 1.02 \frac{(2m)^{\frac{1}{2}}}{qE_d} \left[U^{\frac{1}{2}} - (U_0 + qsE_s)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (3b)$$

$$T_D = 1.02 \frac{(2m)^{\frac{1}{2}} D}{2U^{\frac{1}{2}}} \quad (3c)$$

Знаки + и - в T_s соответствуют начальным скоростям, направленным соответственно от коллектора и к нему.

В статье [2] приведена схема и объяснены принципы работы рефлекторна

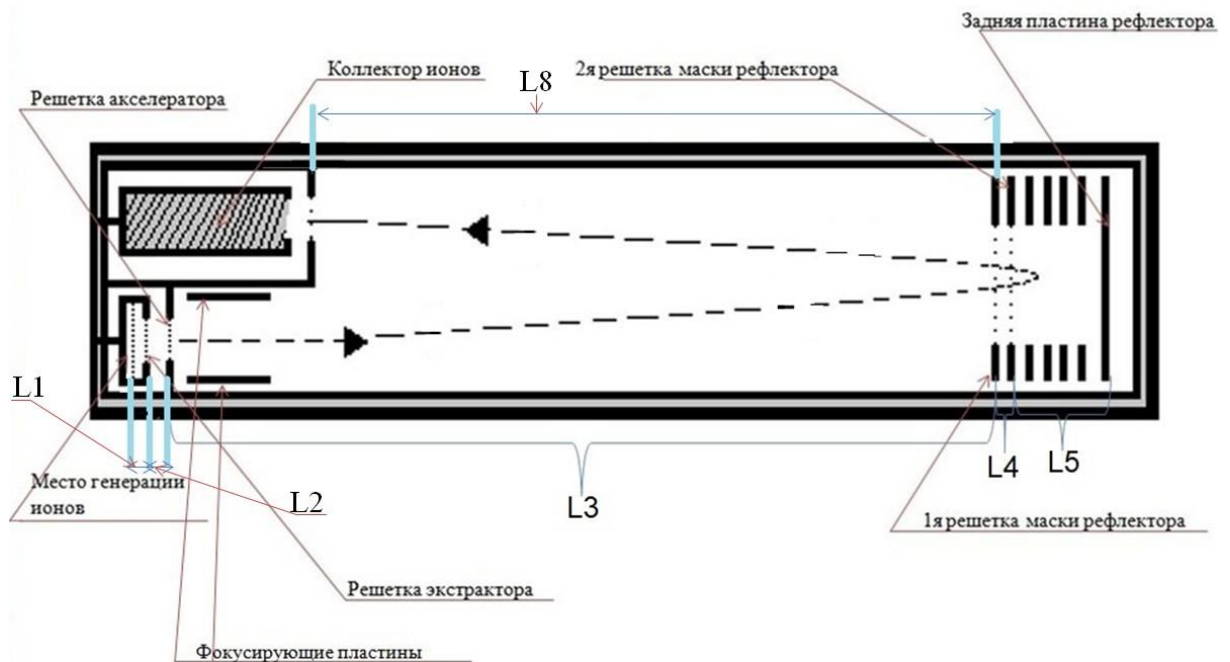


Рис. 2. Базовая геометрия рефлекторна: $L1$ -расстояние между генерацией ионов и решеткой экстрактора, $L2$ -расстояние между решеткой экстрактора и решеткой акселератора, $L3$ -расстояние от акселератора до 1й решетки маски рефлектора, $L4$ -расстояние между решетками маски рефлектора, $L5$ -расстояние между 2й решеткой маски и задней пластиной рефлектора, $L8$ -расстояние между 1й решетки маски рефлектора и коллектором ионов.

Формула времени пролета иона в рефлекторне:

$$T(U_0, L1) = \sum_{i=1}^8 T_i \quad (4)$$

Где T_i – время пролета i -го участка, E_j – плотность поля j -го участка, $q = 1$: заряд иона, $m = 42.0695$: масса иона пропена.:

Время пролета участка L1:

$$T_1 = \theta \frac{(2m)^{\frac{1}{2}}}{qE_1} \left[(U_0 + qL1E_s)^{\frac{1}{2}} \pm (U_0)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (5)$$

$$\text{,где } \theta = \left(\frac{1 \cdot 10^5}{1.602176 \cdot 10^{-19} \text{ Кл} \cdot 6.022140 \cdot 10^{23} \text{ Моль}^{-1}} \right)^{\frac{1}{2}} = 1.018051 \quad (6)$$

Время пролета участка L2:

$$T_2 = \theta \frac{(2m)^{\frac{1}{2}}}{qE_2} \left[U^{\frac{1}{2}} - (U_0 + qL2E_2)^{\frac{1}{2}} \right], \text{ где } U = U_0 + qL1E_1 + qL2E_2 \quad (7)$$

Время пролета участка L3:

$$T_3 = \theta \frac{(2m)^{\frac{1}{2}} L3}{2U^{\frac{1}{2}}} \quad (8)$$

Время пролета участка L4:

$$T_4 = \theta \frac{(2m)^{\frac{1}{2}}}{qE_4} \left[U^{\frac{1}{2}} - \left(U^{\frac{1}{2}} - qL4E_4 \right)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (9)$$

Время пролета участка L5:

$$T_5 = \theta \frac{(2m)^{\frac{1}{2}}}{qE_5} \left[\left(U^{\frac{1}{2}} - qL4E_4 \right)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (10)$$

Время пролета участков L6, L7, L8 получаются аналогично формулам 7-9.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И АНАЛИТИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ

2.1. Математическая модель.

Для проведения компьютерных симуляций с целью увеличения массового разрешения и увеличения числа, захватываемых детектором ионов была создана математическая модель в программе Simion[4]. В модели изменяемыми параметрами были потенциалы на экстракторе, анализаторе, а также на масках зеркала для лучшей фокусировки ионного пакета. Начальные координаты генерации задавались на середине расстояния между подложкой и решеткой экстрактора в виде цилиндра с единичным радиусом (в миллиметрах) и высотой равной 5mm, а начальное распределение скоростей задавались векторно, согласно распределению Гаусса. Происходила симуляция одной тысячи траекторий за один запуск. Ионы имели массу 42.04695 а.е.м., что соответствует ионам пропена ($C_3H_6^+$). Симуляция выдавала падение иона на детектор или «мимо» него (отсюда находилось число ионов захваченных детектором) и его время пролета, из чего считалось среднее время пролета всех ионов за 1 запуск

симуляции. После чего находилось среднее отклонение от среднего времени пролета. А массовое разрешение находилось по формуле: $\frac{T_{cp}}{2 \cdot \Delta T}$, где Δ - среднее отклонение, а T_{cp} – среднее время пролета.

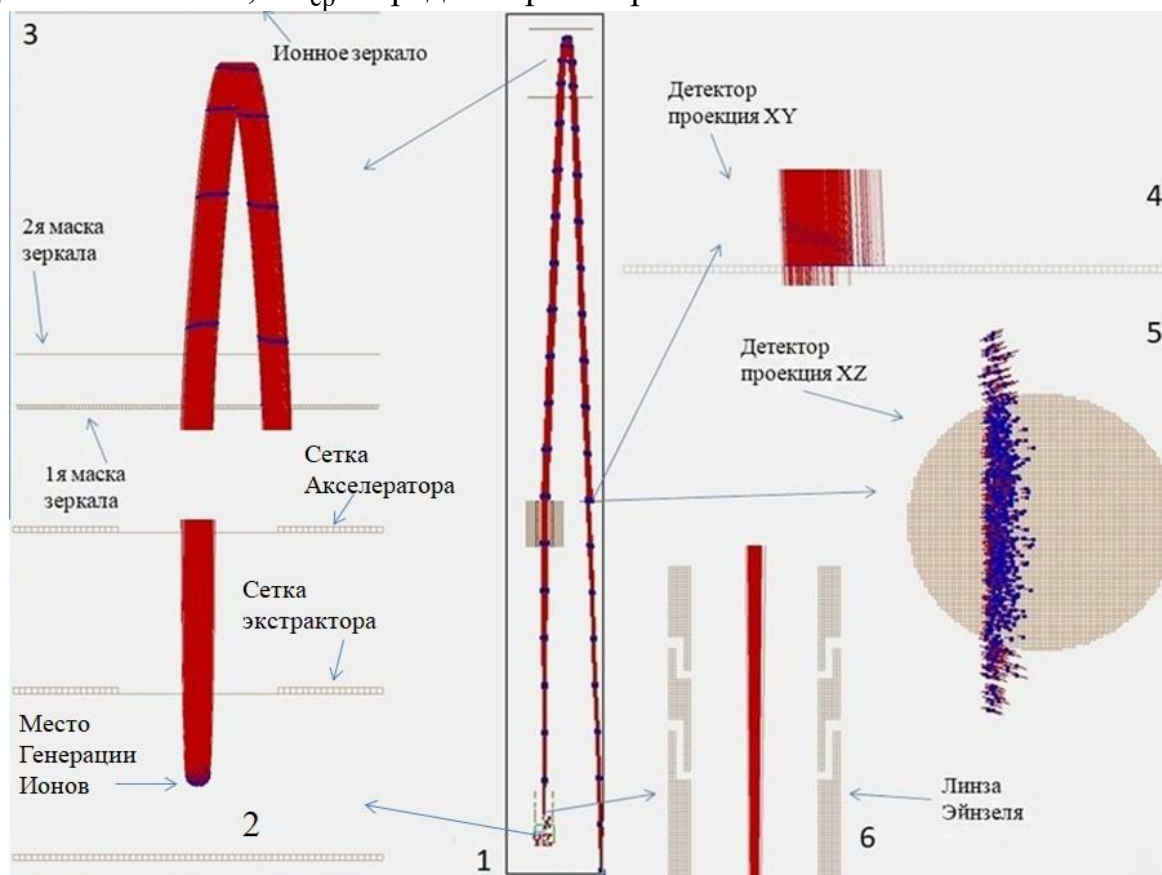


Рис. 3. Диаграмма компьютерной симуляции.

2.2. Аналитические расчеты

Получив значения для потенциалов после обработки и опираясь на теорию [1] были выведены формулы, аналогичные формулам 4-10 для аналитического расчета времени пролета. Расчет был проведен в программе Mathcad.

Массовое разрешение считалось по формуле:

$$\frac{1}{\sqrt{\left(\frac{1}{M(x)}\right)^2 + \left(\frac{1}{M(v)}\right)^2}} \quad (11)$$

,где $M(x) = \frac{T_{cp}}{2(T(x_{cp} + \Delta x) - T(x_{cp} - \Delta x))}$ -массовое разрешение для распределения

координат, а $M(v) = \frac{L}{L_f} * \sqrt{\frac{U_n}{k_b * 300K}}$ -массовое разрешение для распределения

скоростей, L -расстояние, пройденного ионом в бесполовом пространстве, L_f -расстояние до первого фокуса, U_n - разность потенциалов между местом генерации ионов и акселератором, k_b -постоянная Больцмана, 300K-температура, при которой происходила симуляция.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

На графиках показаны максимальные значения массового разрешения при оптимизации компьютерной симуляции:

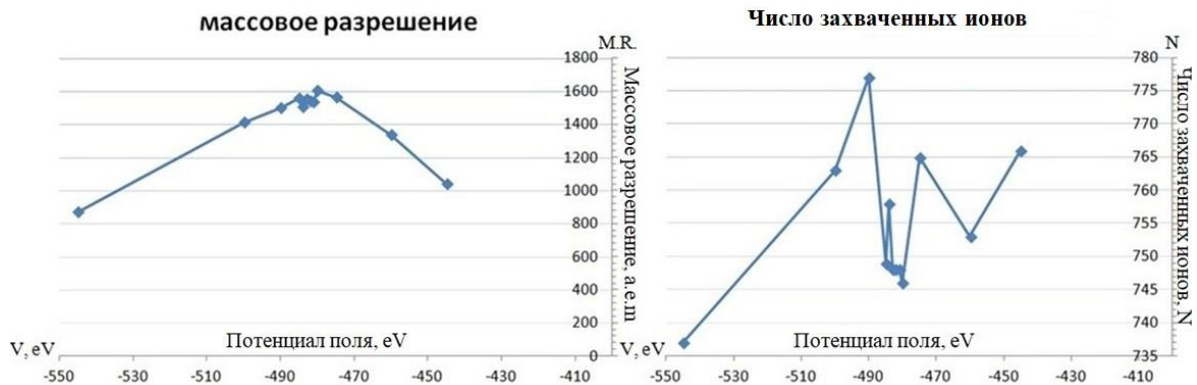


Рис. 4. Графики массового разрешения и числа захваченных ионов.

Аналитический расчет времени пролета показал нам достаточное высокое совпадение с данными, полученными во время симуляций:

время пролета симуляции = 34.32 мкс

время пролета, полученное аналитически = 34.13 мкс

массовое разрешение = 1240.

массовое разрешение полученное аналитически = 1383

Данные значения достаточно близки, потому что время пролета определяется электростатикой и размерами масс-спектрометра. Однако, в симуляции время пролета больше, так как они пролетают линзу Эйнзеля и дефлектор, которые и добавляют задержку.

Ниже представлен график зависимости общего времени пролета ионов пропена, рассчитанного по формуле 4 от положения точки старта траектории.

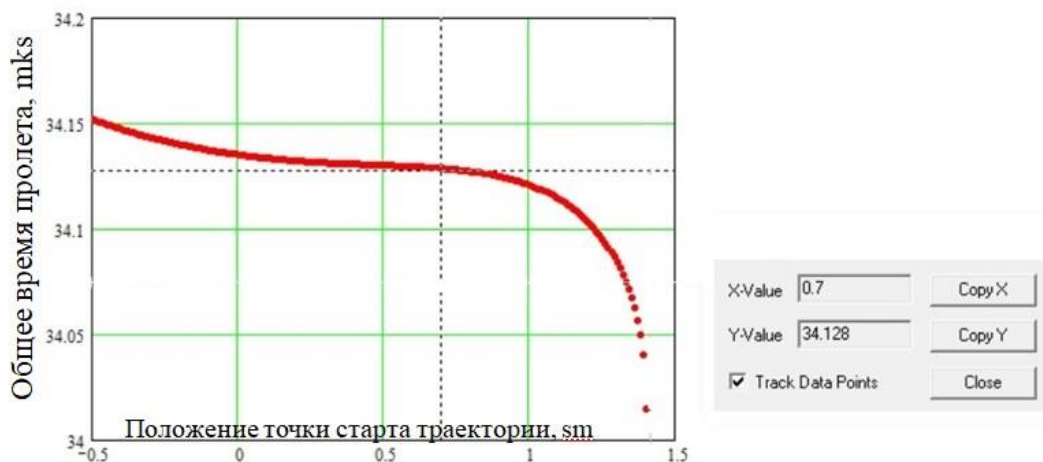


Рис. 5. График времени пролета

За счет подбора напряжений в симуляции удалось достичь минимизации отклонения времени пролета ионов от среднего значения для большого диапазона начальных энергий. В точке 0,7 см по оси X минимизированы производные первого и второго порядков времени пролета от координаты в поле источника ионов, т.е. достигается фокусировка второго порядка времени пролета от энергии.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В рамках исследования были созданы численная модель и компьютерная симуляция времяпролетного масс-спектрометра с ионным зеркалом. При помощи данных инструментов была проведена оптимизация данного масс-спектрометра. Работа проведена в рамках соглашения между Министерством науки и высшего образования Российской Федерации и ФИАН № 075-15-2021-597 от 2 июня 2021 г.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. W.C. Wiley, I.H. McLaren, Time-of-Flight Mass Spectrometer with Improved Resolution. // Review of Scientific Instruments, 1955, v. 26, p. 1150-1157.
2. В. А. Мамырин, V. I. Karataev, D. V. Shmikk, V. A. Zagulin, The mass-reflectron, a new nonmagnetic time-of-flight mass spectrometer with high resolution. // Zh. Eksp. Teor. Fiz., 1973, v.64, p. 82-89.
3. M.Guilhaus, Principles and Instrumentation in Time-of-flight mass spectrometry // journal of Mass Spectrometry, 1995, v. 30, p. 1519-1532
4. D. A. Dahl, "SIMION for the personal computer in reflection," Int. J. Mass Spectrom. 200 (2000) 3. (source: Adaptas Solutions, LLC, Palmer, MA adaptas.com)

**NUMERICAL SIMULATIONS OF A TIME-OF-FLIGHT MASS
SPECTROMETER WITH AN ION MIRROR FOR THE CENTER FOR
LABORATORY ASTROPHYSICS**

D.S. Trufanov^{1,2}, I.O. Antonov^{1,2}

*¹ Samara National Research University,
(34 Moskovskoe Shosse str., Samara, 443086)
e-mail: ciritopwp@mail.ru*

*² Samara Branch of the Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of
Sciences
(221 Novo-Sadovaya str., Samara, 443011)*

In this work, a numerical model of a time-of-flight mass spectrometer was created in the Simion program. With the help of a numerical model, simulations of a time-of-flight mass spectrometer with a change in potentials on the electrodes were carried out in order to increase the mass resolution. Analytical calculations and their comparison with computer simulation were also carried out.

Keywords: time-of-flight mass spectrometer, Simion, mass resolution.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОЛЕКУЛЯРНО-ИОННОГО КУБИТА С РАДИОЧАСТОТНЫМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ПОЛЕМ

С.О. Тучин^{1,2}, И.О. Антонов^{1,2}

¹Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева РАН
(443011, г. Самара, ул. Ново-Садовая, 221)

²Самарский национальный исследовательский университет
(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34)
e-mail: serezhnka.tuchin@mail.ru

В данной работе выведен гамильтониан для молекулярно-ионного микроволнового кубита в квадрупольной ионной ловушке. В дальнейшем планируется построить численную модель в программном пакете Qutip и проанализировать взаимодействие молекулярно-ионного кубита с радиочастотным электромагнитным полем в дипольном и квадрупольном приближениях.

Ключевые слова: квантовый компьютер, молекулярно-ионный кубит, квадрупольная ионная ловушка.

1. ВВЕДЕНИЕ

Квантовый компьютер – это вычислительное устройство с возможностью обрабатывать все состояния одновременно. Многие слышали про квантовые вычисления, но немногие задумываются как это происходит с точки зрения физики и какие процессы имеют наиболее важное значение для функционирования такой системы.

Целью данной работы является рассмотрение принципиальной схемы работы квантового компьютера на ионных ловушках, построение математической модели для однокубитного гамильтониана и рассмотрение перспектив в будущем.

2. СРАВНЕНИЕ РАЗЛИЧНЫХ КУБИТОВ

Кубит – это двухуровневая система, которая имеет два собственных состояния $|0\rangle$ и $|1\rangle$, а также может находиться в суперпозиции этих двух состояний. Состояние кубита обычно описывается волновой функцией вида $a|0\rangle + b|1\rangle$. Изображать такие состояния можно на сфере Блоха (Рис.1). Если же у нас имеется n кубитов то такая конфигурация имеет 2^n независимых состояний. Возьмём, к примеру, систему из двух кубитов. Количество состояний в котором может находиться данная система равно четырём – это

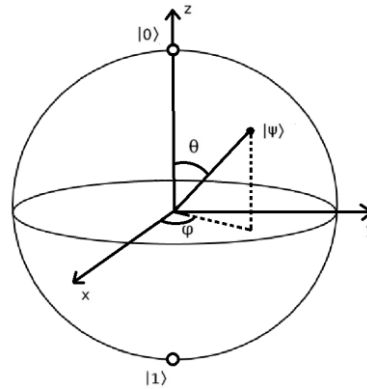


Рис. 1. Изображение произвольного состояния $|\psi\rangle$ на сфере Блоха

называется квантовой запутанностью. Другими словами, это квантовое состояние двух или более связанных объектов.

Квантовые операции над кубитами проводятся с помощью логических вентилях и поворотов состояния кубита. Рассмотрим различные виды кубитов.

Нейтральные атомы [1]. Атом может находиться в невозбужденном состоянии $|0\rangle$ и в возбужденном состоянии $|1\rangle$. Кубитом будет являться состояние электрона. Так же атом может находиться и в суперпозиции этих состояний. Удобнее использовать атомы у которых на внешнем уровне один неспаренный электрон и ненулевой спин ядра, следовательно возможны сверхтонкие энергетические переходы. Больше всего подходят атомы лития, цезия или рубидия. Создание такого массива кубитов не простая задача. Для начала их необходимо охладить, так как тепловой шум не позволяет контролировать атомное состояние. Используется лазерное охлаждение, что бы охладить кубиты до состояния близкого к абсолютному нулю. После этого их нужно удерживать на месте. С этой целью их подвешивают в оптических ловушках. Оптические ловушки представляют собой серии скрещивающихся лазерных лучей, на пересечении которых образуются стоячие электромагнитные волны, во впадинах которых и находятся атомы. С помощью еще одного лазера управляют их квантовым состоянием.

Сверхпроводящие квантовые цепи. Часто применяются в качестве кубитов сверхпроводящие квантовые системы. Данные системы так же могут находиться в стоянии суперпозиции, но по сравнению с другими системами имеют большие размеры. Основным элементом сверхпроводниковых кубитов является джозефсоновский контакт, размер которого лежит в пределах от нескольких десятков до нескольких сотен нанометров. Такой контакт состоит из двух слоёв проводника (сверхпроводящего металла), разделенного тонким слоем диэлектрика, наиболее часто это оксид металла. Электроны, а точнее куперовские пары,

могут переходить из одного слоя сверхпроводящего металла в другой через диэлектрический слой оксида. Это происходит из-за туннельного эффекта.

Таблица.1 Сравнение различных типов кубитов.

| | Ионные кубиты | Нейтральные атомы | Сверхпроводники |
|--|---------------------------------|---------------------------------|----------------------------------|
| Время когерентности $\tau_{\text{ког}}$ | До 60 мин | До 7 с | До 320 мкс |
| Время операции $\tau_{\text{оп}}$ | От 1 мкс | 400 нс | 10 нс |
| $\frac{\tau_{\text{ког}}}{\tau_{\text{оп}}}$ | До 10^9 | До 10^7 | До 10^4 |
| Идентичность | Обеспечена физическими законами | Обеспечена физическими законами | Зависит от качества изготовления |

Так же в кольцевом проводнике ток может течь бесконечно долго. Благодаря тому, что джозефсоновский контакт чувствителен к магнитному полю, его используют в качестве высокочувствительных магнитных сенсоров. Также состояние джозефсоновских контактов начнет квантоваться. Возникают вырожденные уровни: связанные с направлением циркулирующего тока у потоковых кубитов, связанные с электрическим зарядом у зарядовых кубитов, связанные с его фазой у фазовых кубитов. Управление такими кубитами происходит с помощью микроволнового излучения.

Ионные кубиты [2]. Есть два способа с использованием электронных состояний иона создать кубит. Первый способ - это формирование сверхтонкого кубита, где используются два сверхтонких уровня основного состояния. Второй способ - это формирование оптического кубита, здесь используется уровни основного и возбуждённого электронного состояния. К достоинствам оптических кубитов относится то, что они чрезвычайно долговечны. Время распада порядка от тысяч до миллионов лет. Оптические кубиты тоже относительно долговечны, со временем затухания порядка секунды, по сравнению со временем работы логического элемента, которое составляет порядка микросекунд.

Сравнение различных типов кубитов представлено в таблице 1 [3],[4].

3. КВАНТОВЫЙ КОМПЬЮТЕР НА КВАДРУПОЛЬНОЙ ИОННОЙ ЛОВУШКЕ

Рассмотрим механизм работы квантового компьютера на ионной ловушке. Квадрупольная ионная ловушка (Рис.2) - это тип ионной ловушки,

которая использует динамические электрические поля для улавливания заряженных частиц.

На рисунке 3 изображено поле радиочастотной квадрупольной ионной ловушки на стержнях [5].

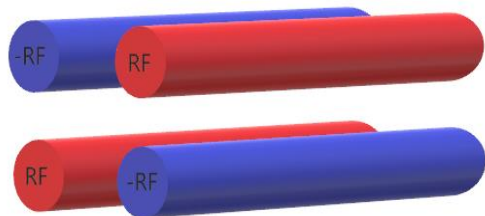


Рис. 2. Схематическое изображение радиочастотной квадрупольной ионной ловушки

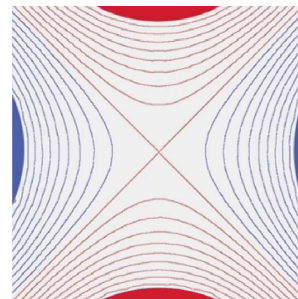


Рис. 3. Поле ловушки на стержнях

В первую очередь нужно загрузить ионную ловушку. Для этого используются атомный испаритель и электронная пушка. Атомные испарители нужны для получения пучка нейтральных атомов. Для ионизации потока атомов используется электронная пушка. Ионизация в данном случае происходит методом электронного удара.

Удержание ионов происходит в радиочастотной квадрупольной ионной ловушке. Если ион имеет массу m и заряд e , а параметры ловушки и поля: r_0 – радиус поля; V_{ac} – амплитуда радиочастотного напряжения; $\omega_{рч}$ – радиочастота, то псевдопотенциал в квадрупольной ловушке будет:

$$U_{pseudo} = \frac{m\Omega_{сек}^2}{2}(x^2 + y^2) \quad (1)$$

Движение одиночного иона в линейной ловушке Пауля может быть разложено на гармоническое движение с частотой $\Omega_{сек} = \frac{\beta \omega_{рч}}{2}$, где

$$\beta = \sqrt{a + \frac{q^2}{2}}, \quad a = \frac{4eU_{dc}}{m\omega_{рч}^2 r_0^2}, \quad q = \frac{2eV_{ac}}{m\omega_{рч}^2 r_0^2}, \quad U_{dc} - \text{постоянное напряжение прикладываемое к электроду. При } a=0: \Omega_{сек} = \frac{q \omega_{рч}}{2\sqrt{2}}$$

При помощи системы лазеров два произвольных иона в цепочке превращают в квантовый осциллятор, а по схеме Сирака–Цоллера [6] внешнее, колебательное квантовое состояние ионов запутывается с внутренним, электронным.

4. РАБОТА СХЕМЫ СИРАКА-ЦОЛЛЕРА

Рассмотрим подробнее данный механизм. Допустим у нас система 2-х уровней для щелочноземельного иона. Имеется разрешённый переход с основного уровня $|g\rangle$ на возбуждённый $|e_0\rangle$, эту систему и выберем в качестве кубита. Лазер воздействуя на один из ионов провоцирует

переходы между его основным и возбуждённым состоянием. Гамильтониан такой системы в картине взаимодействия:

$$\hat{H}_{n,q} = \frac{\eta}{\sqrt{N}} \frac{\Omega}{2} [|e_q\rangle_n \langle g| a e^{-i\varphi} + |g\rangle_n \langle e_q| a^\dagger e^{i\varphi}] \quad (2)$$

φ - фаза лазера, Ω - частота Раби, a и a^\dagger -операторы рождения и уничтожения для колебательных состояний ионов в ловушке, N -число ионов, $\eta = \sqrt{\frac{\hbar k_\theta^2}{2 M \nu_x}}$, $k_\theta = k \cos(\theta)$, θ - угол между осью X и направлением распространением лазера, ν_x - частота гармонического потенциала вдоль оси X . Если лазер включён на определённое время $t = \frac{k \pi \sqrt{N}}{\Omega 2}$, временная эволюция системы будет описываться унитарным оператором:

$$\hat{U}_n^{k,q} = e^{-i k \frac{\pi}{2} (|e_q\rangle_n \langle g| a e^{-i\varphi} + H.c)} \quad (3)$$

q – поляризация лазерного импульса.

Лазер перестроен в красную область относительно энергии электронного перехода на частоту колебаний ионов в ловушке. Операция двухкубитного вентиля будет выглядеть следующим образом:

$$\hat{U}_{m,n} \equiv \hat{U}_m^{1,0} \hat{U}_n^{2,1} \hat{U}_m^{1,0} \quad (4)$$

Это трёхэтапный процесс. В начале π -импульс с $q=0$ и $\varphi = 0$ действует на m -й ион, далее 2π -импульс с $q=1$ и $\varphi = 0$ действует на n -й ион, потом повторяем первый этап.

Схема Сирака–Цоллера эквивалента оператору C-NOT. Обозначим $|\pm\rangle = \frac{|g\rangle \pm |e_0\rangle}{\sqrt{2}}$, тогда процедура будет выглядеть как $|g\rangle_m |\pm\rangle_n \rightarrow |g\rangle_m |\pm\rangle_n$, $|e_0\rangle_m |\pm\rangle_n \rightarrow |e_0\rangle_m |\mp\rangle_n$. То есть меняется знак состояния второго иона только тогда, когда первый ион находится в возбуждённом состоянии.

Для однокубитной операции лазер может настроен в частоту резонанса перехода. В этом случае гамильтониан будет равен:

$$\hat{H}_n = \frac{\Omega}{2} [|e_0\rangle_n \langle g| e^{-i\varphi} + |g\rangle_n \langle e_0| e^{i\varphi}] \quad (5)$$

Время взаимодействия иона с лазером будет $t = \frac{k \pi}{\Omega}$. Используется $k \pi$ импульс. Унитарный оператор будет выглядеть как:

$$\hat{V}_n^k = e^{-i k \frac{\pi}{2} (|e_0\rangle_n \langle g| e^{-i\varphi} + H.c)} \quad (6)$$

5. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОДНОКУБИТНОЙ ОПЕРАЦИИ В ПРОГРАММНОМ ПАКЕТЕ QuTip

QuTip - это программный пакет с открытым исходным кодом для моделирования динамики квантовых систем [7].

Для численного моделирования однокубитной операции в QuTip был задан Гамильтониан показанный в уравнении (5) умноженный на функцию Хевисайда $H(L - t)$, где L - длительность возбуждающего импульса лазерного и микроволнового излучения находящегося в резонансе с энергией перехода двухуровневой системы. Частота Раби Ω была принята за 1. Начальное состояние двухуровневой системы было определено как $\psi_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, т.е. в момент времени $t = 0$ кубит находился в основном состоянии. Численное интегрирование временно́зависимого уравнения Шредингера для Гамильтониана (5) производилось в интервале t от 0 до 10 с шагом 100 в единицах времени обратных частоте Раби. В результате временного интегрирования была получена волновая функция кубита для всех значений временной сетки. Для визуализации волновой функции вычислялось математическое ожидание оператора $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ и были построены графики временной зависимости населенности верхнего уровня кубита рассчитанной как $0.5 * (1 - \langle \sigma_z \rangle)$, где значение 0 соответствует 0% населенности верхнего уровня, а 1 – 100% населенности верхнего уровня.

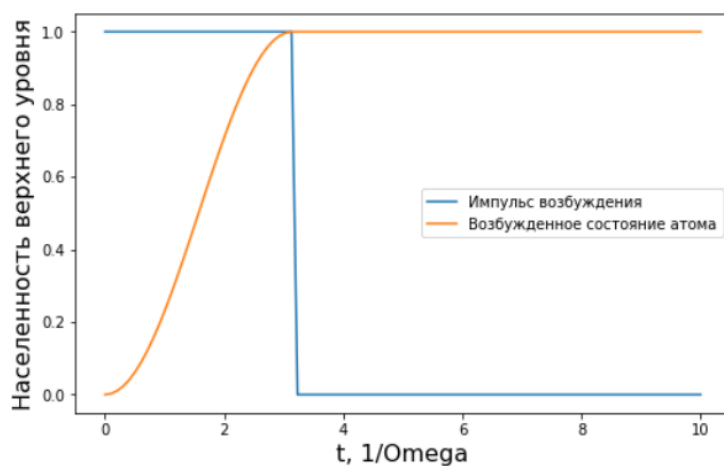


Рис. 4. Населённость уровней при воздействии π -импульса

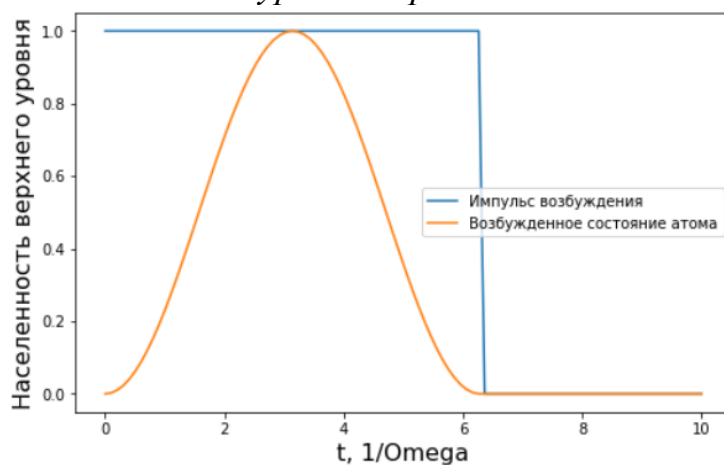


Рис. 5. Населённость уровней при воздействии 2π -импульса

Давайте посмотрим как будет выглядеть населённость уровней нашей двухуровневой системы на которую воздействуют возбуждающие импульсы длительностью π (Рис.4) и 2π (Рис.5)

В случае π -импульса происходит только население возбуждённого состояния, а случае 2π -импульса система возвращается в основное состояние. Таким образом, численное моделирование однокубитной операции в QuTip позволяет проследить временную эволюцию волновой функции двухуровневой системы в заданном временном интервале.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрен случай и приведены результаты моделирования решения однокубитного гамильтониана для ионного кубита. В дальнейшем планируется построение математической модели решения двухкубитного гамильтониана для ионного кубита. Так же планируется рассмотреть случай с микроволновыми вентилями electric-field gradient gates (EFGs) [8] для ионного кубита в радиочастотной квадрупольной ионной ловушке.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Квантовые технологии. Модуль 4. — Текст : электронный // N + 1 Интернет-издание : [сайт]. — URL: <https://nplus1.ru/material/2020/02/06/course-quantum-technology-chapter4> (дата обращения: 15.10.2022).
2. Квантовый компьютер с захваченными ионами. — Текст : электронный // Wikipedia : [сайт]. — URL: https://translated.turbopages.org/proxy_u/en-ru.ru.27308f13-634ab840-6ee52e74-74722d776562/https/en.wikipedia.org/wiki/Ion-trap_quantum_computing (дата обращения: 15.10.2022).
3. Колачевский Н. Н. Ионный квантовый вычислитель / Н. Н. Колачевский. — Текст : электронный // www.issp.ac.ru : [сайт]. — URL: http://www.issp.ac.ru/conf/issp_qtech_2017/N%20H%20Колачевский.pdf (дата обращения: 15.10.2022).
4. Семериков И. А. Квантовый компьютер на ионных кубитах / И. А. Семериков. — Текст : электронный // <https://docviewer.yandex.ru> : [сайт]. — URL: <https://mobz.cc/caj> (дата обращения: 15.10.2022).
5. Е.А. Батракова, И.О. Антонов, ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ РАДИОЧАСТОТНЫХ КВАДРУПОЛЬНЫХ ИОННЫХ ЛОВУШЕК (готовится к публикации).
6. Cirac, J. I. Quantum Computations with Cold Trapped Ions / J. I. Cirac, P. Zoller. — Текст : непосредственный // PHYSICAL REVIEW LETTERS. — 1995. — № 20. — С. 4091-4094.
7. QuTip Quantum Toolbox in Python. — Текст : электронный // <https://qutip.org/> : [сайт]. — URL: <https://qutip.org/> (дата обращения: 15.10.2022).

8. Eric R. Hudson, Wesley C. Campbell. Laserless quantum gates for electric dipoles in thermal motion / Eric R. Hudson, Wesley C. Campbell. — Текст : электронный // arxiv.org : [сайт]. — URL: <https://arxiv.org/pdf/2011.08330.pdf> (дата обращения: 15.10.2022).

**NNUMERICAL SIMULATION OF THE INTERACTION OF A
MOLECULAR-ION QUBIT WITH A RADIO FREQUENCY
ELECTROMAGNETIC FIELD**

S.O. Tuchin^{1,2}, I.O. Antonov^{1,2}

*¹Lebedev Physical Institute, Samara Branch
(Novo-Sadovaya str., 221, Samara, Russia, 443011)*

*²Samara National Research University,
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)
e-mail: serezhenka.tuchin@mail.ru*

In this paper, the Hamiltonian for a molecular-ion microwave qubit in a quadrupole ion trap is derived. In the future, it is planned to build a numerical model in the Qutip software package and analyze the interaction of a molecular-ion qubit with a radio-frequency electromagnetic field in dipole and quadrupole approximations.

Keywords: quantum computer, molecular-ion qubit, quadrupole ion trap.

ФОРМИРОВАНИЕ ВИХРЕВЫХ ПОЛЕЙ ДЛЯ ОПТИЧЕСКОЙ МАНИПУЛЯЦИИ

В.К. Урюпина^{1,2*}, К.А. Целогородцев^{1,2}, Е.В. Разуева¹, Н.Н. Лосевский¹

¹Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук

(443011, Российская Федерация, Самара, ул. Ново-Садовая, д. 22)

²Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева

(443086, Российская Федерация, Самара, Московское шоссе, д. 34)

email: lerauryupina07@gmail.com

В данной работе продемонстрированы метод формирования спиральных пучков заданной конфигурации, в том числе произвольной формы, для лазерной манипуляции, а также способ улучшения точности фазового распределения для формирования сложного распределения интенсивности. С использованием пакета Wolfram Mathematica теоретически построены интенсивности и фазы спиральных пучков в виде замкнутых кривых по известным формулам, разработаны методы задания пучков сложной формы и разработана программа по улучшению точности распределения. Произведен захват микроскопических объектов световыми полями на основе синтезированных пучков.

Ключевые слова: спиральные пучки, вихревые световые поля, пространственный модулятор света, лазерная манипуляция.

1. ВВЕДЕНИЕ

Спиральные пучки - это лазерные световые пучки, которые сохраняют структуру при распространении и фокусировке и могут иметь различные параметры вращения. Простейшим из спиральных пучков является смещенный гауссовый пучок, который имеет вид гауссова пятна, смещенного в некоторую точку. Спиральные пучки применяются для различных задач современной оптики [1], в том числе при расширении функциональных возможностей оптической манипуляции микрообъектами, при кодировании информации за счет использования дополнительных степеней свободы, обусловленных наличием углового момента, и при увеличении разрешающей способности микроскопа в продольном направлении.

На сегодняшний день известны методы формирования спиральных пучков в виде замкнутых кривых [2]. Поиск новых удобных методов формирования пучков является основным направлением исследований. Нами была поставлена задача реализовать метод быстрого формирования спиральных пучков произвольной формы на основе свойства, что линейная комбинация гауссовых пучков тоже является гауссовым пучком, и увеличить качество получаемого изображения.

2. ФОРМИРОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ПУЧКОВ РАЗЛИЧНОЙ КОНФИГУРАЦИИ

Разрабатываемый метод синтеза вихревых полей отличается возможностью создания спирального пучка в виде упорядоченного набора точек. Такие конфигурации в виде произвольного набора точек подходят, например, для оптической манипуляции одновременно несколькими микрообъектами. Нами были теоретически рассчитаны и построены комбинации смещенных гауссовых пучков. Была создана программа для анализа изображений, которая при работе определяет координаты смещенных пучков. Подставляя уже известные координаты в уравнение для смещенного гауссова пучка, задается функция в виде линейной комбинации спиральных пучков. Далее по этой функции строятся распределения интенсивности и фазы спирального пучка. На рисунке 1 приведены примеры построения спиральных пучков в виде набора смещенных гауссовых пучков: слева показаны распределения интенсивности пучка (далее – распределение интенсивности), справа соответствующие фазовые распределения (далее – фазовое распределение). Цвета соответствуют распределению градации серого (0-255).

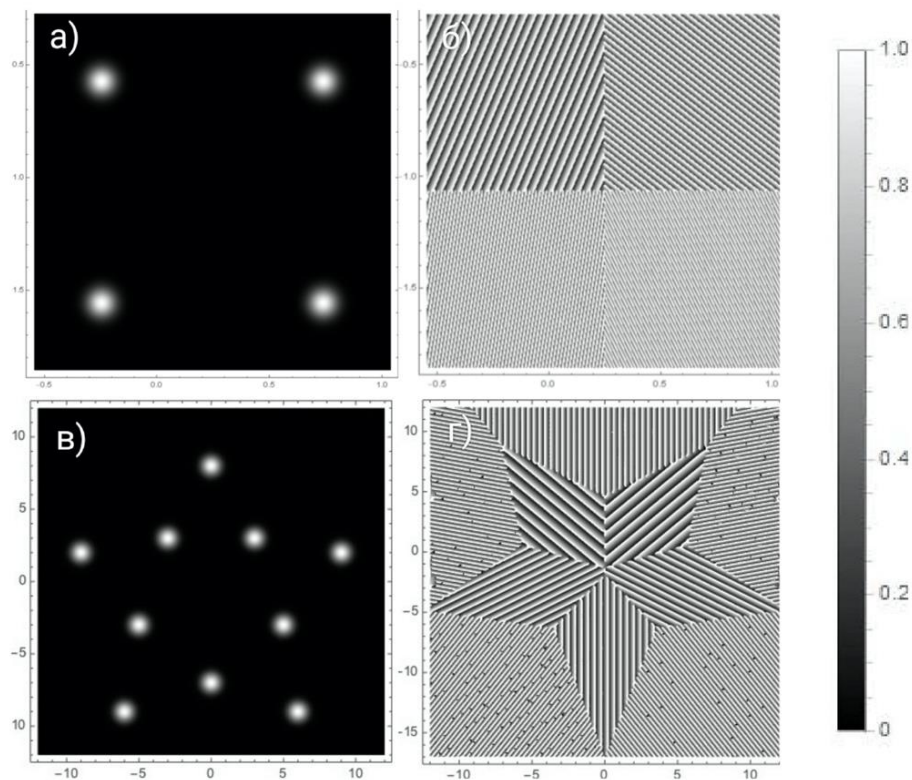


Рис. 1. а, в) распределения интенсивности спиральных пучков в форме вершин фигур квадрата и звезды; б, г) соответствующие распределения фазы

2.1. Повышение точности фазового распределения

Дальнейшая часть исследований посвящена методам повышения точности за счет увеличения числа точек на графике фазового распределения для получения более качественного распределения интенсивности на эксперименте. В доработках программы по расчету комбинаций смещенных гауссовых пучков был выбран способ формирования фазового распределения для модулятора определенного разрешения. За основу выбрано разрешение 1080 на 1080 пикселей размером 8 мкм. В соответствии с этим значением подбирался шаг построения графика, дающий изображение распределения, более соответствующее желаемому, что наблюдалось на эксперименте. На рисунках 3 и 4 представлены результаты экспериментальных картин, полученных голографическим методом на установке для формирования световых полей ПВМС. Такие зависимости качества фазового распределения и итоговой картины будут соответствовать распределению интенсивности в рабочей зоне оптического пинцета.

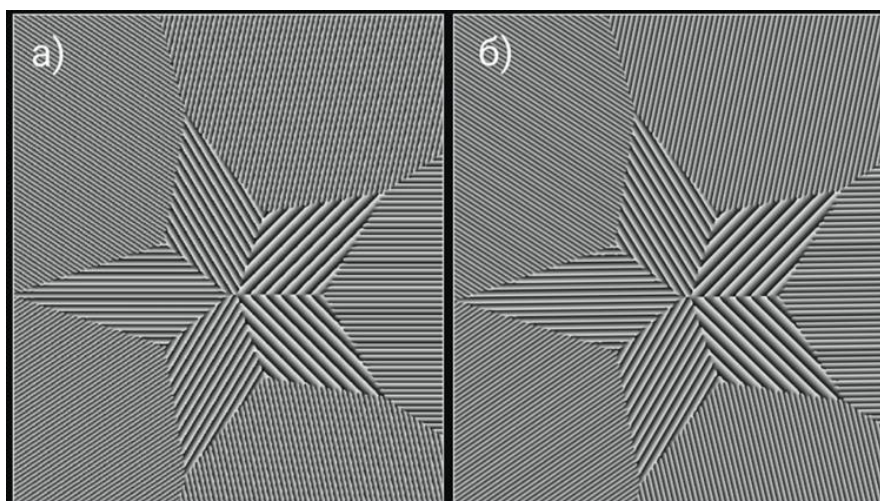


Рис. 2. Фазовое распределение спиральных пучков в виде вершин звезды с точностью шага а) 0.012, б) 0.03515

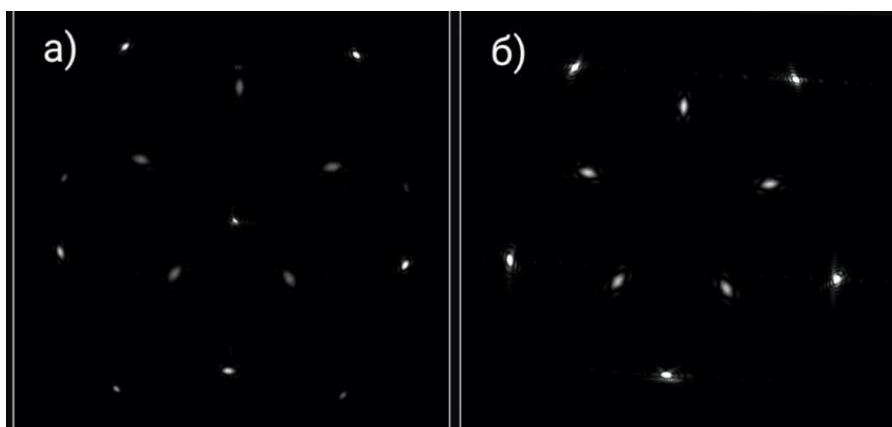


Рис. 3. Экспериментально полученные изображения спиральных пучков с точностью шага а) 0.012, б) 0.03515

Несмотря на то, что шаг на рис. 3.а) и рис. 4.а) выбран меньше по сравнению с 3.б) и 4.б), качество итогового изображения заметно хуже. Это доказывает, что малость шага тоже имеет ограничения, и обусловлено тем, что шаговое значение во втором случае взято не случайно, а рассчитано для разрешения конкретного пространственного модулятора.

2.3. Эксперимент по захвату микрообъектов

Формирование спиральных пучков может быть осуществлено с помощью многоэлементного фазового жидкокристаллического пространственного модулятора света (ПМС). В экспериментах по манипуляции была использована только фазовая часть спирального пучка. Схема установки включала в себя DPSS лазер с мощностью 51 мВт на длине волны 532 нм, систему линз и зеркал, направляющих пучок в объектив микроскопа, ЖК ПМС HOLOEYE PLUTO-2-NIR-011, CD камеру и ПК. На модулятор подавалось

фазовое распределение (Рис. 2.б) для спирального пучка в виде вершин треугольника. Сфокусированный с помощью микрообъектов с 40X увеличением пучок служил для захвата частиц латекса диаметром 4 мкм. На рисунке 2в приведен кадр с захваченными латексными микросферами, При захвате частиц за счет восходящего потока жидкости был произведен захват не одной, а пары частиц, которые были жестко сцеплены, однако можно отчетливо увидеть положения частиц в виде вершин треугольника. Размер изображений (а) и (б) 1024x1024 пикселей, квадратной формы с размером стороны 8 мкм.

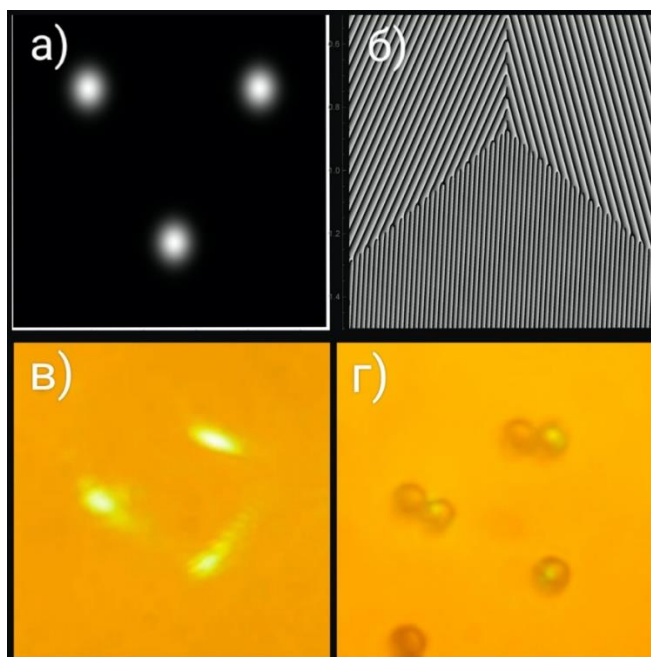


Рис. 4. а) распределение интенсивности спиральных пучков, б) фазовое распределение спиральных пучков, в) распределение интенсивности в рабочей зоне пинцета, г) кадр из эксперимента по захвату латексных сфер (изображение 60 на 60 мкм). Размер изображений (а) и (б) 1024x1024 пикселей, ширина одного пикселя 8 мкм

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе создана программа по формированию спиральных пучков в виде линейной комбинаций одиночных гауссовых пучков и увеличена точность построения фазового распределения. Рассчитанные пучки сформированы экспериментально. Программа апробирована при манипулировании микроскопическими объектами в оптическом пинцете. Она позволила значительно упростить и ускорить процесс создания оптических ловушек для ансамбля микрообъектов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Abramochkin E., Volostnikov V. // Opt Commun 1996.V. 125.P. 302.
2. Воляр А.В., Абрамочкин Е.Г., Разуева Е.В. и др. // Компьютерная оптика. 2021. Т. 45. № 4. С. 482.
3. Абрамочкин Е.Г., Волостников В.Г. // Компьютерная оптика и обработка изображений, 1999. С. 249.
4. Afanasiev K.N., Abramochkin E.G., Korobtsov A.V. et al. // Proc SPIE 2007. V. 6644. P. 664410.

FORMATION OF VORTEX FIELDS FOR OPTICAL MANIPULATION

V.K. Uryupina^{1,2*}, K.A. Tselogorodtsev^{1,2}, E.V.Razueva¹, N.N. Losevsky¹

¹*Lebedev Physical Institute, Samara Branch
(Novo-Sadovaya str., 221, Samara, Russia, 443011)*

²*Samara National Research University,
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)
email: lerauryupina07@gmail.com*

In this paper, we demonstrate a method for generating spiral beams of a given configuration, including an arbitrary shape, for laser manipulation, as well as a method for improving the accuracy of the phase distribution to form a complex intensity distribution. Using the Wolfram Mathematica package, the intensities and phases of spiral beams are theoretically constructed in the form of closed curves according to known formulas, methods for specifying beams of complex shape are developed, and a program is developed to improve the distribution accuracy. Microscopic objects were captured by light fields based on synthesized beams.

Keywords: spiral beams, vortex light fields, spatial light modulator, laser manipulation.

ЧЕТЫРЕХВОЛНОВОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ НА РЕЗОНАНСНОЙ НЕЛИНЕЙНОСТИ ПРИ НАЛИЧИИ ОБРАТНОЙ СВЯЗИ

А.А. Акимов, В.Д. Фомина

Самарский национальный исследовательский университет имени академика

С. П. Королева,

кафедра оптики и спектроскопии

(443011, г. Самара, ул. Академика Павлова, 1)

e-mail: vasilisa.kotelnikova@mail.ru

Исследовано влияние обратной связи, реализуемой при помощи кольцевого резонатора, на эффективность четырехволнового преобразователя излучения на резонансной нелинейности. Установлено, что выигрыш в эффективности четырехволнового преобразователя выше при наличии обратной связи на сигнальную и объектную волны, чем на одну из этих волн.

Ключевые слова: четырехволновое взаимодействие, резонансная нелинейность, обратная связь.

1. ВВЕДЕНИЕ

Одним из способов повышения эффективности четырехволновых преобразователей излучения является наложение положительной обратной связи на взаимодействующие волны [1]. Например, реализация обратной связи на сигнальную или объектную волны с помощью кольцевого резонатора, позволила увеличить эффективность четырехволнового преобразователя на тепловой нелинейности [2].

В поглощающих средах, моделируемых системой энергетических уровней, наряду с тепловой нелинейностью реализуется и резонансная нелинейность [3]. Механизм резонансной нелинейности связан с насыщением резонансного перехода между энергетическими уровнями среды.

Представляет интерес исследовать влияние обратной связи, реализуемой при помощи кольцевого резонатора, на эффективность четырехволнового преобразователя излучения на резонансной нелинейности.

2. ВЫВОД ОСНОВНЫХ ВЫРАЖЕНИЙ

В нелинейной среде навстречу друг другу распространяются две волны накачки с комплексными амплитудами A_1 и A_2 , сигнальная и объектная волны с комплексными амплитудами A_3 и A_4 .

Дифференциальное уравнение для пространственного спектра объектной волны ($\tilde{A}'_4(\kappa, z)$) будет иметь вид:

$$\frac{d\tilde{A}'_4}{dz} = -\frac{\alpha_0 b \tilde{A}_{10}^0 \tilde{A}_{20}^0 \tilde{A}_3'^* \exp[-2C(z)] \exp[-i\Delta z]}{(1 + bI_0)^2} \quad (1)$$

где α_0 – начальный коэффициент поглощения, b – параметр, представляющий собой комбинацию сечений поглощения и скоростей релаксации между энергетическими состояниями резонансной среды, $\tilde{A}'_3 = \tilde{A}_3 \cdot \exp[C(z)]$,

$$\tilde{A}'_4 = \tilde{A}_4 \cdot \exp[C(\ell) - C(z)], \quad \tilde{A}_{10}^0 = \tilde{A}_1(z=0), \quad \tilde{A}_{20}^0 = \tilde{A}_2(z=\ell),$$

$\Delta = k_{1z} + k_{2z} - k_{3z} - k_{4z}$ – проекция волновой расстройки на ось Z,

$$C(z) = \int_0^z \frac{\alpha_0}{1 + bI_0(z_1)} dz_1.$$

В параксиальном приближении, при условии распространения волн накачки строго вдоль оси Z имеем

$$k_{1z} - k_{3z} = \frac{\kappa^2}{2k}, \quad k_{2z} - k_{4z} = -\frac{\kappa^2}{2k},$$

где κ – пространственная частота.

При расположении нелинейной среды внутри кольцевого резонатора граничные условия на спектры сигнальной и объектной волн есть при наличии обратной связи по двум волнам:

$$\tilde{A}'_3(\kappa, z=0) = \sqrt{1-r_1} \tilde{A}_{30}(\kappa) + \sqrt{r_1 r_2} \exp\left(-ikL + i\frac{\kappa^2}{2k}L\right) \times \exp\{-C(\ell)\} \tilde{A}'_3(\kappa, z=\ell), \quad (2)$$

$$\tilde{A}'_4(\kappa, z=\ell) = \tilde{A}'_4(\kappa, z=0) \sqrt{r_1 r_2} \exp\left(-ikL + i\frac{\kappa^2}{2k}L\right) \times \exp\{-C(\ell)\},$$

при наличии обратной связи по сигнальной волне:

$$\tilde{A}'_3(\kappa, z=0) = \sqrt{1-r_1} \tilde{A}_{30}(\kappa) + \sqrt{r_1 r_2} \exp\left(-ikL + i\frac{\kappa^2}{2k}L\right) \times \exp\{-C(\ell)\} \tilde{A}'_3(\kappa, z=\ell), \quad (3)$$

$$\tilde{A}'_4(\kappa, z=\ell) = 0,$$

при наличии обратной связи по объектной волне:

$$\tilde{A}'_3(\kappa, z=0) = \tilde{A}_{30}(\kappa), \quad (4)$$

$$\tilde{A}'_4(\kappa, z=\ell) = \tilde{A}'_4(\kappa, z=0) \sqrt{r_1 r_2} \exp\left(-ikL + i\frac{\kappa^2}{2k}L\right) \times \exp\{-C(\ell)\}.$$

где r_1 – коэффициент отражения полупрозрачного зеркала связи, r_2 – коэффициент отражения сферических зеркал резонатора, осуществляющих

перенос пространственного распределения поля из плоскости $z=0$ на плоскость, расположенную на расстоянии L – от задней грани нелинейного слоя ($z = \ell$), $\tilde{A}_{30}(\kappa)$ – пространственный спектр сигнальной волны в плоскости $z = 0$ при отсутствии кольцевого резонатора.

Для характеристики эффективности четырехволнового преобразователя излучения введем амплитудный коэффициент отражения: при наличии обратной связи по двум волнам

$$R = \left| \frac{\tilde{A}_4(\kappa \rightarrow 0, z = 0)}{\tilde{A}_{30}^*} \right| \sqrt{1 - r_1}, \quad (5)$$

при наличии обратной связи по сигнальной волне

$$R_s = \left| \frac{\tilde{A}_{4s}(\kappa \rightarrow 0, z = 0)}{\tilde{A}_{30}^*} \right|, \quad (6)$$

при наличии обратной связи по объектной волне

$$R_{ob} = \left| \frac{\tilde{A}_{4ob}(\kappa \rightarrow 0, z = 0)}{\tilde{A}_{30}^*} \right| \sqrt{1 - r_1}. \quad (7)$$

Здесь \tilde{A}_{4s} и \tilde{A}_{4ob} – значения пространственных спектров объектной волны на нулевой пространственной частоте при выполнении граничных условий (3) - (4) соответственно.

В качестве сигнальной волны возьмем волну от точечного источника, расположенного на передней грани нелинейного слоя ($\tilde{A}_{30}(\kappa) = 1$).

Значения амплитудных коэффициентов отражения как при наличии обратной связи по объектной, так и по сигнальной волнам совпадают.

При сопряжении граней нелинейного слоя ($L=0$) выигрыш в эффективности четырехволнового преобразователя имеет вид:

при наличии обратной связи по двум волнам

$$\xi = \frac{R(r_1 \neq 0)}{R(r_1 = 0)} = \frac{1 - r_1}{\left(1 - \sqrt{r_1 r_2} \exp[-C(\ell)]\right)^2}, \quad (8)$$

при наличии обратной связи по сигнальной или объектной волнам

$$\xi_{s,ob} = \frac{R_{s,ob}(r_1 \neq 0)}{R(r_1 = 0)} = \frac{\sqrt{1 - r_1}}{1 - \sqrt{r_1 r_2} \exp[-C(\ell)]}. \quad (9)$$

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

При равных интенсивностях волн накачки $I_{10} = I_{20}$ на рис. 2 приведены зависимости амплитудного коэффициента отражения четырехволнового

преобразователя излучения от нормированной интенсивности волн накачки при наличии обратной связи на сигнальную и объектную волны (кривая 1) и на одну из этих волн (кривая 2). Для сравнения на этом же графике представлена зависимость коэффициента отражения при отсутствии обратной связи (кривая 3).

Для всех случаев с ростом интенсивности волн накачки наблюдается монотонное увеличение, а затем уменьшение коэффициента отражения четырехволнового преобразователя.

Видно, что максимальное значение коэффициента отражения при наличии обратной связи по двум волнам больше, чем при наличии обратной связи по одной из волн или при отсутствии обратной связи. Максимальные значения коэффициента отражения достигаются при различных значениях нормированной интенсивности волн накачки.

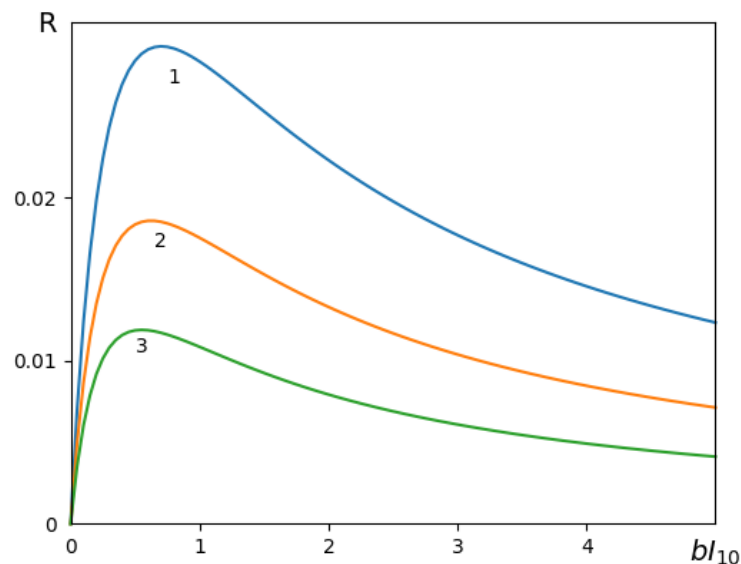


Рис.2. Зависимость амплитудного коэффициента отражения четырехволнового преобразователя излучения от нормированной

интенсивности волн накачки при $\alpha_0 l = 0.1$, $kl = 5 \cdot 10^3$, $L = 0$,

$$r_1 = 0.8(1,2), r_2 = 0.7(1,2), r_1 = r_2 = 0(3)$$

На рис.3. приведен график зависимости выигрыша в эффективности четырехволнового преобразователя при наличии и отсутствии обратной связи от нормированной интенсивности волн накачки. Выигрыш в эффективности четырехволнового преобразователя при наличии обратной связи по двум волнам (кривая 1) выше, чем по одной из волн (кривая 2).

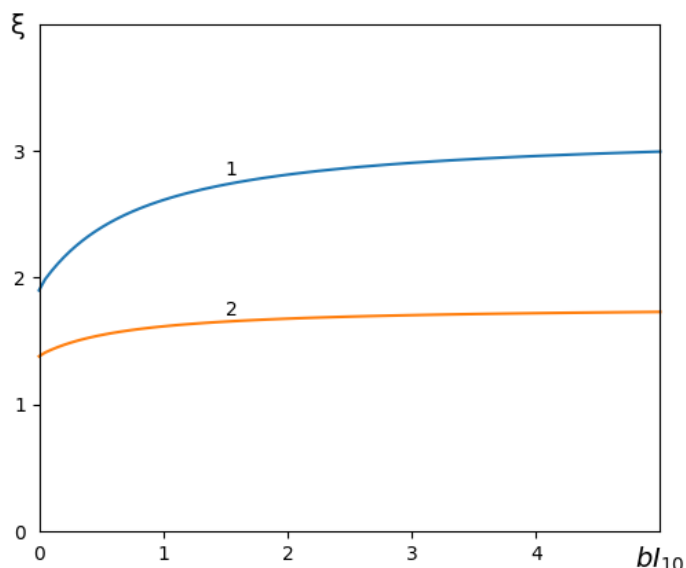


Рис.3. Зависимость выигрыша в эффективности четырехволнового преобразователя при наличии и отсутствии обратной связи от нормированной интенсивности волн накачки при $\alpha_0 \ell = 0.1$, $k \ell = 5 \cdot 10^3$, $r_1 = 0.8$, $r_2 = 0.7$

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Получены выражения для коэффициента отражения четырехволнового преобразователя излучения на резонансной нелинейности, выигрыша в эффективности четырехволнового преобразователя при наличии обратной связи как по сигнальной и объектной волнам, так и по одной из волн;

2. Максимальное значение коэффициента отражения при наличии обратной связи по двум волнам больше, чем при наличии обратной связи по одной из волн или при отсутствии обратной связи;

3. Значения амплитудных коэффициентов отражения как при наличии обратной связи по объектной, так и по сигнальной волнам совпадают.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ивахник, В.В. Обращение волнового фронта при четырехволновом взаимодействии. / В.В. Ивахник. Самара: Самарский университет. 2010. 246 с.
2. А.А. Акимов, С.А. Гузаиров, В.В. Ивахник, Четырехволновое взаимодействие на тепловой нелинейности при наличии обратной связи на сигнальную или объектную волны. // Физика волновых процессов и радиотехнические системы, 2022, Т.25, № 3, с. 9-15.

3. A.S. Rubanov, A.L. Tolstik, S.M. Karpuk, O. Ormachea, Nonlinear formation of dynamic holograms and multiwave mixing in resonant media. // Optics Communications, 2000, V.181, №1-3, p. 183-190.

FOUR-WAVE MIXING ON RESONANT NONLINEARITY WITH FEEDBACK

A.A. Akimov, V.D. Fomina

*Samara National Research University,
Optics and Spectroscopy department
(Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086)
e-mail: vasilisa.kotelnikova@mail.ru*

The influence of feedback realized using a ring resonator on the efficiency of a four-wave radiation converter on resonant nonlinearity has been studied. It was found, that the gain in the efficiency of the four-wave converter with feedback for both signal and object waves is higher than on one of these waves.

Keywords: four-wave mixing, resonant nonlinearity, feedback.