XVIII Всероссийский молодежный Самарский конкурс – конференция научных работ по оптике и лазерной физике



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

XVIII Всероссийский молодежный Самарский конкурс – конференция научных работ по оптике и лазерной физике

10-14 ноября 2020 года

Сборник трудов конференции

УДК 535+535: 621.373.826

XVIII Всероссийский молодежный Самарский конкурс-конференция научных работ по оптике и лазерной физике: сборник трудов конференции, (Самара, 10–14 ноября 2020 г.). – Москва: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук, 2020. – 448 с.

ISBN 978-5-902622-44-4

В сборнике представлены работы участников XVIII Всероссийского молодежного Самарского конкурса-конференции научных работ по оптике и лазерной физике, 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 нанофотоники.

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

СОДЕРЖАНИЕ

ЛЕКЦИИ ВЕДУЩИХ УЧЁНЫХ И ПРИГЛАШЁННЫЕ ДОКЛАДЫ. АННОТАЦИИ

И.А. Братченко

Оптическая неинвазивная диагностика социально значимых заболеваний......13

Э.А. Генина

Оптическое	просветление	биологических	тканей:	традиционные	И
инновационн	ые подходы				14

Е.В. Губарькова, А.А. Плеханов, А.А. Советский, М.А. Сироткина, С.С. Кузнецов, Д.А. Воронцов, Л.А. Матвеев, А.Л. Матвеев, В.Ю. Зайцев, Н.Д. Гладкова

И.Н. Завестовская, А.В. Кабашин, В.М. Петриев

Ю.Н. Кульчин

В.Э.Пожар

И.Ю. Янина, Е.А. Козлова, В.И. Кочубей

Наночастицы CuInS₂ в качестве нанотермометров: *ex vivo* исследования.......26

СЕКЦИЯ АСПИРАНТОВ И МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ

Д.О. Акатьев, Д.А. Турайханов, А.В. Васильев, Ф.М. Аблаев, А.А. Калачев

Функция хеширования на основе орбитального углового момента света28

А.Ф. Алыкова, И.Н. Завестовская, В.Ю. Тимошенко

С.А. Белов, Н.Е. Молевич, Д.И. Завершинский

Я. В. Белоусов

Л.А. Братченко, И.А. Братченко

Рамановская	спектроскопия	кожи	пациентов	c	почечной
недостаточность	ю				55

В.О. Винокуров, И.А. Матвеева, О.О. Мякинин

Нейросетевой	классификатор	гиперспектральных	снимков	кожных
патологий				62

К.А. Ганичкина, Д.Р. Суюндукова, Н.В. Латухина

М.О. Гуслянникова, З.В. Кусаева, Е.К. Башкиров

Влияние	атомной	когерентности	на	динамику	перепутывания	кубитов	В
резонатор	ре без пот	ерь	•••••				76

И. М. Жильцов, Н.В. Латухина, А. Д. Кузьмин, М. В. Степихова

Оптоэлектронные	свойства	структур	c	пористым	кремнем,	допированным
эрбием			••••			

М.О. Жукова, М.В. Мельник, Е.Н. Опарин, С. Лю, А.Н. Цыпкин, С.А. Козлов

В.Д. Зайцев

С.М. Зайцев, А.Н. Башкатов, У. Блондель, М. Амуру, В.В. Тучин, Э.А. Генина

Р.К. Захаров, А. Осман, Е.К. Башкиров

Перепутывание	кубитов в	некоторых	моделях	квантовой	электродинамики
резонаторов с ке	рровской в	нелинейност	ЪЮ		

К.Ю. Кандурова, В.В. Шуплецов, Е.В. Потапова, Е.А. Жеребцов

Изучение	интенсивности	И	времени	жизни	флуоресценции	перевитой
гепатоцелл	пюлярной карцин	[OM]	ы мышей			

Д.Р. Капизов, В.И. Никонов

Четырехволновое взаимодействие	е в параболических волноводах с керровской
и тепловой нелинейностями	

А.Д. Кожина, Л.Н. Андреев, Е.А. Цыганок, Е.Б. Сошникова, А.В. Уварова

В.С. Красноухов, М.В. Загидуллин, В.Н. Азязов, А.М. Мебель

А.А. Лыкина, О.А. Кислова, В.Г. Булгакова, Д.В. Королев

Разработка	таблеток	для	исследования	биологических	объектов	В
терагерцовои	м диапазоне	е часто	ОТ			144

Ф. А. Мартыненко, А. Е. Дорохов, А. П. Мартыненко

Электронный	лэмбовский	сдвиг (2Р-2S)	В	мюонных	ионах	(µeLi),	(µeBe),
(µeB)							150

А.А. Першин, К.А. Романюк, А.П. Торбин

Роль	рекомбинационного	процесса О+О+М в гибели	O ₃ 157
	1		5

А.А. Подлесных, О.Т. Каменев, Ю.С. Петров, В.А. Колчинский

Е.А. Рассолов, А.Б. Черепахин

Расчет	резонансных	колебаний	кантилеверов	В	воздушной и жидкой
среде					

А.А. Савельева, Е.С. Козлова

Моделирование	фокусировки	оптического	вихря	зонной	пластинкой
Френеля					

А.А. Советский, А.Л. Матвеев, Л.А. Матвеев, Г.В. Геликонов, А.А. Зыков, В.Ю. Зайцев

Г.И. Толстов, Я.А. Медведков, Д.П. Порфирьев, М.В. Загидуллин, А.М. Мебель, В.Н. Азязов

С.О. Усталков, А.А. Скапцов, А.Х.М. Мохаммед, А.М. Захаревич, А.А. Козырев, Е.А. Сагайдачная, В.И. Кочубей

Я.В. Федотова, В.И. Кукушкин, Е.Н. Морозова, В.Е. Кирпичев, В.В. Соловьев, И.В. Кукушкин

М.Е. Федянина, А.А. Дедкова, А.О. Якубов

Влияния	термообработки	на ог	птические	свойства	тонких	пленок	$Ge_2Sb_2Te_5$
для мног	оуровневых устро	ойств	нанофотог	ники			212

П.А. Хорин

Формирование	бездифракционных	пучков с	заданным	распределением	на
основе интеграл	а Уиттекера				219

Е.А. Ярунова, А.А. Кренц, Н.Е. Молевич

Подавление	модуляционной	неустойчивости	в широкоа	пертурных	лазерах с	;
помощью ин	эжекции внешнег	го оптического из	влучения			j

СТУДЕНЧЕСКАЯ СЕКЦИЯ

О.А. Васильева, Н.В. Васильев, О.М. Алыкова, В.В. Смирнов

Эффект	воздействия	лазерного	излучения	на	всхожесть	семян
пасленовь	JX					

В.В. Веретенников, М.П. Смаев, Ю.В. Воробьев

Особенности	формирования	периодических	структур	В	тонких	пленках
материала фаз	вовой памяти Ge	$_2Sb_2Te_5$				241

Н.В. Голубова, Д.Д. Ставцев, В.В. Шуплецов, Е.В. Потапова, В.В. Дремин

Мультимодальная	визуализация	В	задачах	лапароскопических
исследований		•••••		

Ю.Д. Гудова, А.А. Скапцов

В.В. Евстифорова, Д.Н. Артемьев

Анализ	спектров	комбинационного	рассеяния, и	их харкатеристик	и качества
сигнало	в от объен	стов различных кла	ссов		

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

А.В. Кошелева, Е.А. Бобков

Исследование	тепл	ювых	свой	СТВ	суспена	вий	наноч	аст	ИЦ	под	дейс	твие	M
электромагнит	ных	излуч	ений	раз	личной	час	стоты	И	при	имене	ние	ИХ	В
биомедицински	их це.	лях		•••••				•••••	•••••			2	70

Л.И. Крикунова, А. Николаев, А.М. Мебель

А.А. Кузьминых, В.В. Семин

Динамика	перепутанных	квантовых	состояний	В	системе	трех
взаимодейст	вующих кубитов,	управляемых	лазерным п	олем		284

А.А. Лактионов, О.М. Алыкова

Д.А. Мишин, Д.И. Проворченко, А.А. Головизин, Е.С. Федорова, Д.О. Трегубов, К.Ю. Хабарова, В.Н. Сорокин, Н.Н. Колачевский

Л.Я. Набиева, Р.Х. Гайнутдинов, А.И. Гарифуллин, А.А. Мутыгуллина

А.А. Николаев, В.Н. Азязов, А.М. Мебель

Поверхность	потенциальной	энергии	реакции	метилидинового	радикала с
1,2-бутадиенс	ЭМ				

Г.А. Плешаков, В.Н. Гришанов, И.В. Малов, Х. Хаммари

К.В. Рогова, Е.Р. Герок, А.В. Неупокоева

Исследование	процессов	релаксации	структуры	белкового	раствора	после
лазерного возд	ействия				•••••	326

Н.А. Роденко, В.А. Жукова, Т.И. Васильева, В.С. Блинов

С.К. Сергунин, С.В. Краснов

И.А. Серебрякова, Ю.И. Сурков, Э.А. Генина, А.Н. Башкатов, В.В. Тучин, В.П. Жаров

Н.И. Смирнова, С.В. Смирнов, Э.Э. Мусаев, О.М. Алыкова, В.В. Смирнов

Д.А. Татаринов, С.Р. Сокольникова

Г.П. Тихомирова, О.О. Фролов, Е.В. Тимченко, П.Е. Тимченко, Е.В. Писарева

Т.П. Ткаченко, Е.П. Пожидаев, С.И. Торгова, Е.М. Будынина, А.В. Кузнецов, В.А. Барбашов

З.Р. Утебаева, Е.Ю. Степанович, С.В. Стрелков

А.О. Фролов

Моделирование	распространения	вихревых	лазерных	пучков	c
использованием и	нтеграла Коллинза				. 398

К.Б. Черный-Ткач, Е.В. Тимченко, П.Е. Тимченко, М.А. Зыбин, О.О. Фролов, М.А. Ивлиев

М.О. Шарикова, В.И. Батшев, А.С. Мачихин, В.Э. Пожар, С.В. Боритко

А.А. Шацкая, Д.Н. Артемьев

Е.Ф. Ягофарова, О.О. Фролов, Е.В. Тимченко, П.Е. Тимченко, Л.Т. Волова

Спектральный анализ биоимплантатов для лечения рецессии десны......428

А.С. Якутин А.В. Неупокоева, Д.А. Гаврилов

В.Б. Глухенькая

Исследование многослойных тонкопленочных структу	р Ge ₂ Sb ₂ Te ₅ /ITO/Al для
создания оптических отражающих дисплеев	

ЛЕКЦИИ ВЕДУЩИХ УЧЕНЫХ И ПРИГЛАШЁННЫЕ ДОКЛАДЫ. АННОТАЦИИ

ОПТИЧЕСКАЯ НЕИНВАЗИВНАЯ ДИАГНОСТИКА СОЦИАЛЬНО ЗНАЧИМЫХ ЗАБОЛЕВАНИЙ

И.А. Братченко

Самарский университет

В презентации описывается применение спектроскопических методов на основе комбинационного рассеяния света и флуоресценции для оптического анализа и скрининга злокачественных и доброкачественных тканей кожи, а также патологий почек. Описано проведение исследования оптических свойств кожи с применением рамановской и флуоресцентной спектроскопии, а также описаны возможности и диагностические точности каждого из методов. Описание мультимодальных объединяющих подходов, спектроскопию комбинационного рассеяния и флуоресцентный анализ, предназначено для освещения будущих перспектив оптической биопсии на комбинационного рассеяния. В работе основе представлены данные оптических свойств кожи людей с различными социально значимыми заболеваниями и здоровых индивидов. Описана методика оптического анализа кожи человека с целью выявления заболеваний.

ОПТИЧЕСКОЕ ПРОСВЕТЛЕНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИХ ТКАНЕЙ: ТРАДИЦИОННЫЕ И ИННОВАЦИОННЫЕ ПОДХОДЫ

Э.А. Генина

Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского Национальный исследовательский Томский государственный университет eagenina@yandex.ru

В настоящее время «оптическое просветление тканей» (ОПТ) является подтвержденным и признанным методом управления рассеивающими свойствами биологических тканей. Проблема повышения точности методов оптической диагностики, с которыми встречаются ученые, успешно решается за счет использования хорошо разработанной техники оптического просветления с использованием оптических просветляющих агентов (ОПА) и методов их внедрения в биологические ткани.

Конечная цель методов ОПТ - согласование показателя преломления по всей глубине ткани для удаления оптических неоднородностей, вызывающих рассеяние света. Однако подходы к этой проблеме могут существенно различаться в зависимости от объекта исследования и используемого ОПА. В настоящее время термин ОПА включает не только вещество (или комбинацию нескольких веществ), но и технологию применения (так называемый протокол ОПТ).

Протоколы оптического просветления включают в себя несколько подходов в зависимости от научных задач: 1) простая иммерсия с липофильных ΟΠΑ использованием гиперосмотических или В виде однокомпонентных или многокомпонентных растворов с различными химическими и/или физическими усилителями; 2) иммерсия с предварительной дегидратацией и делипидацией (т.е. растворением липидов) с использованием органических растворителей; 3) гипергидратация с использованием делипидации и частичной денатурации тканевых белков; и 4) внедрение гидрогеля с использованием фиксации и сшивания. Некоторые протоколы ОПТ предусматривают одновременное обесцвечивание тканей. Первый из перечисленных подходов полезен для ОПТ in vitro, ex vivo и in vivo, а остальные применяются только для исследования изолированных образцов тканей и мелких животных in vitro [1-4].

ОПТ *in vitro* реализуются с использованием сложных растворов, включающих сахара, спирты, кислоты с различными детергентами. Протокол оптического просветления обеспечивается пассивной диффузией и завершается после полной замены внутритканевой жидкости просветляющим агентом, поэтому время просветления варьируется от одного дня до нескольких недель, как, например, при использовании FocusClear, FRUIT и др. [5, 6].

Методы просветления на основе растворителей чаще всего состоят из двух этапов: 1) дегидратация с растворением липидов и 2) дополнительное растворение липидов и просветление за счет согласования показателей преломления агента и оставшейся обезвоженной ткани. Для этого подхода разработан ряд протоколов ОПТ: Adipo-Clear, 3DISCO, PEGASOS и др. [7-9]. Методы ОПТ на основе растворителей надежны и эффективны для большого количества различных типов тканей. Однако токсическая природа многих способность растворителей, ИХ растворять клеи, используемые при изготовлении линз объектива, существенное сжатие ткани во время обезвоживания (до 50%) и подавление эмиссии флуоресцентных белков снижают их полезность.

Альтернативный подход (гипергидратация) заключается в удалении липидов и снижении показателя преломления образцов ткани во время процесса просветления. Стратегия удаления липидов, но без гидрофобных растворителей, заключается в интенсивной инкубации продолжительностью от нескольких дней до месяцев с детергентом и многократной сменой раствора. В то же время используется мочевина для улучшения проницаемости тканей и частичной денатурации и, таким образом, гидратации даже гидрофобных участков белков с высоким показателем преломления. Гипергидратация снижает общий показатель преломления до ~1.38. В качестве характерных примеров ОПА можно назвать Scale (4M мочевина, глицерин) и CUBIC (4M мочевина/сахароза) [6, 10].

Методы, в которых используются агрессивные растворители или высокие концентрации детергентов, создают риск удаления большого процента протеина из ткани. Методы CLARITY и PACT/PARS решают эти проблемы, встраивая в ткань гидрогель. После внедрения гидрогеля липиды удаляются пассивно путем инкубации в течение нескольких недель в детергенте или быстро (дни) посредством электрофореза [11, 12].

Все перечисленные подходы - фиксация ткани, делипидация, денатурация и др. - совершенно неприменимы для использования *in vivo*. В данном случае

необходимость существенно сократить время просветления (не более десятков минут) и использовать только биологически совместимые ОПА также осложняется необходимостью учитывать физиологический ответ живой ткани на действие агента и его перераспределение (вымывание) с возможным быстрым выходом из области интереса, что в совокупности затрудняет достижение эффективного оптического просветления. Эти проблемы решаются с помощью физических усилителей проницаемости ткани, таких как сонофорез, лазерное воздействие, микроперфорация, а также биосовместимых химических усилителей диффузии ОПА (ДМСО, тиазон, этанол и др.) [13-15].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Richardson, D. S., and J. W. Lichtman. 2015. Clarifying tissue clearing. *Cell* 162:246-57.

2. Yu, T., Y. Qi, H. Gong, Q. Luo, and D. Zhu. 2018. Optical clearing for multiscale biological tissues. *J Biophotonics* 11:e201700187.

3. Matryba, P., L. Kaczmarek, and J. Gołąb. 2019. Advances in ex situ tissue optical clearing. *Laser Photon Rev* 13:1800292.

4. Gómez-Gaviro, M. V., D. Sanderson, J. Ripoll, and M. Desco. 2020. Biomedical applications of tissue clearing and three-dimensional imaging in health and disease. *iScience* 23:101432.

5. Hou, B., D. Zhang, S. Zhao, et al. 2015. Scalable and DiI-compatible optical clearance of the mammalian brain. *Front Neuroanat* 9:19.

6. Moy, A. J., B. V. Capulong, R. B. Saager, et al. 2015. Optical properties of mouse brain tissue after optical clearing with FocusClearTM. *J Biomed Opt* 20:095010.

7. Chi, J., Z. Wu, C. H. J. Choi, et al. 2018. Three-dimensional adipose tissue imaging reveals regional variation in beige fat biogenesis and PRDM16-dependent sympathetic neurite density. *Cell metab* 27:226-36.e223.

8. Ertürk, A., K. Becker, N. Jährling, et al. 2012. Three-dimensional imaging of solvent-cleared organs using 3DISCO. *Nat Protoc* 7:1983-95.

9. Jing, D., S. Zhang, W. Luo, et al. 2018. Tissue clearing of both hard and soft tissue organs with the PEGASOS method. *Cell Res* 28:803-18.

10. Hama, H., H. Kurokawa, H. Kawano, et al. 2011. Scale: a chemical approach for fluorescence imaging and reconstruction of transparent mouse brain. *Nat Neurosci* 14:1-10.

11. Tomer, R., L. Ye, B. Hsueh, and K. Deisseroth. 2014. Advanced CLARITY for rapid and high-resolution imaging of intact tissues. *Nat Protoc* 9:1682-97.

12. Yang, B., J. B. Treweek, R. P. Kulkarni, et al. 2014. Single-cell phenotyping within transparent intact tissue through whole-body clearing. *Cell* 158:945-58.

13. Costantini, I., R. Cicchi, L. Silvestri, F. Vanzi, and F. S. Pavone. 2019. Invivo and ex-vivo optical clearing methods for biological tissues: review. *Biomed Opt Express* 10:5251-67.

14. Wang, J., Y. Zhang, T. Xu, Q. Luo, and D. Zhu. 2012. An innovative transparent cranial window based on skull optical clearing. *Laser Phys Lett* 9:469-73.

15. Genina, E. A., Yu. I. Surkov, I. A. Serebryakova, A. N. Bashkatov, V. V. Tuchin, and V. P. Zharov. 2020. Rapid ultrasound optical clearing of human light and dark skin. IEEE *Trans Med Imaging* 39:3198-206.

МОРФОЛОГИЧЕСКОЕ СЕГМЕНТИРОВАНИЕ ОПУХОЛЕЙ МЕТОДОМ ОПТИЧЕСКОЙ КОГЕРЕНТНОЙ ЭЛАСТОГРАФИИ ДЛЯ ДИАГНОСТИКИ И МОНИТОРИНГА ЭФФЕКТИВНОСТИ ЛЕЧЕНИЯ

<u>Е.В. Губарькова</u>¹, А.А. Плеханов¹, А.А. Советский², М.А. Сироткина¹, С.С. Кузнецов¹, Д.А. Воронцов³, Л.А. Матвеев², А.Л. Матвеев², В.Ю. Зайцев², Н.Д. Гладкова²

¹ФГБОУ ВО "Приволжский исследовательский медицинский университет" Минздрава России, г. Нижний Новгород ²Институт Прикладной Физики РАН, г. Нижний Новгород ³ ГБУЗ НО «НОКОД», г. Нижний Новгород

(ОКЭ) Метод оптической когерентной эластографии открывает качественно новые диагностические возможности для количественной оценки упругих свойств биоткани, со степенью детализации ~30-50 микрон (масштаба порядка десятка клеток). Путем прицельного сопоставления ОКЭизображений, получаемых *in vivo* или на свежих послеоперационных образцах, с соответствующими гистологическими изображениями были найдены характерные диапазоны значений модуля упругости (модуля Юнга) различных морфологических компонентов ткани. Это позволило без контрастных применения веществ реализовать автоматизированное сегментирование ОКЭ-изображений на соответствующие этим компонентам зоны, которые по топологии, проценту занимаемой площади и точности сегментирования показали высокую корреляцию с результатами традиционного гистологического сегментирования (r=0.95-0.98). Методом ОКЭ на послеоперационных образцах опухолевой ткани молочной железы шесть было сегментировано основных морфологических человека компонентов ткани (жировая ткань, соединительная ткань, фиброзная строма, гиалинизированная строма, лимфогистиоцитарное воспаление, кластеры опухолевых клеток). В экспериментах на опухолевых моделях животных ОКЭ были разработанным методом выделены жизнеспособные, дистрофические и некротизированные опухолевые клетки, зоны воспаления и отека. Такие возможности новой технологии открывают перспективы ее использования для широкого круга биомедицинских И клинических применений (в т.ч. интраоперационно).

Работа по определению диапазонов жёсткости морфологических структур рака молочной железы выполнена при поддержке гранта РНФ № 18-75-10068; работа по определению жёсткости инициированных терапией морфологических изменений опухоли выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-315-90087.

ЛАЗЕРНО-АБЛИРОВАННЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ В ПЕРСПЕКТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ ЯДЕРНОЙ НАНОМЕДИЦИНЫ И РАДИОТЕРАПИИ

<u>И.Н. Завестовская^{1,2}</u>, А.В. Кабашин^{3,1}, В.М. Петриев^{4,1}

¹Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ ²Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН ³Университет Марселя, Франция ⁴НМИЦ радиологии МЗ РФ

Представлены не имеющее аналогов в мире результаты в области ядерной наномедицины, позволяющее создавать новые радиофармпрепараты и технологии лучевой диагностики и терапии на основе использования биодеградируемых наночастиц и систем на их основе в качестве агентов доставки радионуклидов и сенсибилизаторов терапий онкологических и других социально значимых заболеваний.

В качестве носителя для радионуклидов был выбран нанокремний, синтезированный с применением лазерных технологий абляции в жидкости, позволяющий получать коллоидные растворы наночастиц кремния со стабильными размерами с узким распределением и контролируемыми биофотонными свойствами. Уникальность наночастиц кремния связана с их биодеградируемостью, что позволяет быстрое выведение их из организма в течение нескольких дней (даже в случае достаточно больших частиц с размером 30-80 нм) при полном отсутствии каких-либо токсических последствий.

Наночастицы кремния были протестированы в качестве носителей для перспективных для медицинских применений радионуклидов Re188, Ga68. Продемонстрирована возможность быстрой ПЭГилизации в течение часа и конъюгации лазерно-синтезированных кремниевых наночастиц с радионуклидами Re188. Было показано, что наноконъюгаты эффективно доставляют радионуклиды с потоком крови в опухоль и эффективно удерживают радионуклиды в опухоли. Это позволяет получать максимальный терапевтический эффект, что было показано на крысах. Выживаемость крыс составила 72% по сравнению с контрольной группой.

Работа выполнена при поддержке МОН (соглашение от 26.11.2018 № 075-02-2018-097), уникальный индетификационный номер RFMEFI57518X0174) и ГК «Росатом» (договор от 05.09.2019 № 313/1655-Д).

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ И МИКРОСКОПИЯ ГЛИОМ ГОЛОВНОГО МОЗГА ЧЕЛОВЕКА WHO GRADE I-IV И МОДЕЛИ ГЛИОМЫ 101.8 В ТЕРАГЕРЦОВОМ ДИАПАЗОНЕ

<u>К.И. Зайцев</u>^{1,2,*}, Н.В. Черномырдин^{1,2}, И.Н. Долганова^{2,3}, А.А. Гавдуш¹, Ш.–И.Т. Бешплав⁴, П.В. Никитин⁴, А.И. Алексеева⁵, Г.А. Командин¹, Г.М. Катыба^{1,3}, В.Н. Курлов³, А.А. Потапов⁴, И.В. Решетов², В.В. Тучин⁶

> ¹ИОФ РАН, Россия ²Сеченовский университет, Россия ³ИФТТ РАН, Россия ⁴НМИЦ нейрохирургии им. акад. Н.Н. Бурденко, Россия ⁵НИИ морфологии человека, Россия ⁶СГУ им. Н.Г. Чернышевского, Россия *E-mail: kirzay@gmail.com

В этом докладе рассматриваются последние результаты исследований, направленных на диагностику глиомы головного мозга с помощью терагерцовой спектроскопии и микроскопии. Сначала, мы изучили терагерцовые диэлектрические свойства глиом головного мозга человека WHO GRADE I-IV ex vivo с использованием импульсной терагерцовой спектроскопии. Выявлены статистические различия между терагерговыми диэлектрическими свойствами глиом и интактных тканей. Далее, мы изучили модель глиомы 101.8 в головном мозге крысы *ex vivo* с использованием как импульсной терагерцовой спектроскопии, так и иммерсионной терагерцовой микроскопии с пространственным разрешением 0,15λ, где λ - длина волны. Подтверждена способность терагерцовых технологий различать интактные ткани и ткани глиомы. Кроме того, с их помощью выявлен гетерогенный характер тканей мозга в терагерцовом диапазоне.

Ключевые слова: терагерцовая технология, терагерцовая импульсная спектроскопия, иммерсионная микроскопия терагерцового диапазона, глиома головного мозга человека, модель глиомы 101.8, интраоперационная нейродиагностика

Глиома – самый распространенный тип первичных опухолей головного мозга [1]. Среди прогностических факторов лечения глиомы решающим фактором для снижения вероятности рецидива опухоли и увеличения выживаемости пациентов является выполнение общей тотальной резекции. Глиомы обычно имеют нечеткие края, что затрудняет их резекцию. Существующие методы, применяемые для дифференциации здоровых тканей и глиом, не обеспечивают удовлетворительной чувствительности и специфичности диагностики, особенно для глиом низкой степени злокачественности [2]. Терагерцовая (ТГц) спектроскопия и микроскопия [3,4] представляют собой многообещающие методы интраоперационной нейродиагностики [5,6].

В нашей работе мы изучали оптические свойства глиом головного мозга человека WHO GRADE I-IV *ex vivo* в терагерцовом диапазоне, а также перифокальных областей, состоящих из интактных и отечных тканей [7]. Образцы тканей были охарактеризованы с использованием импульсной терагерцовой спектроскопии в режиме отражения и гистологии. Заливка тканей желатином позволяла поддерживать сигнал неизменным в течение нескольких часов по сравнению с таковыми сразу после резекции. Мы наблюдали статистическую разницу между интактными тканями и глиомами WHO GRADE I-IV [8,9].

Затем мы изучили модель глиомы 101.8 в свежевырезанном мозге крысы *ex vivo* с использованием терагерцовой импульсной спектроскопии и иммерсионной терагерцовой микроскопии [10–12]. Наблюдаемые результаты подтверждают возможность дифференциации интактных тканей и глиом. Кроме того, выявлен неоднородный характер тканей мозга в масштабе, создаваемом длинами волн терагерцового диапазона.

Сравнивая сигнал от тканей сразу после резекции и полностью дегидратированных (залитых парафином) тканей мозга крысы *ex vivo*, мы продемонстрировали, что вода (а именно ее содержание в здоровых и патологических тканях) образует доминирующий эндогенный маркер глиом в терагерцовом диапазоне, в то время как вклад других факторов остается почти незначительным.

Наконец, мы обсуждаем возможность переноса терагерцовой технологии в клиническую практику и ее интеграцию в современный нейрохирургический рабочий процесс, опираясь на наши недавние разработки жестких волноводов, гибких волокон и пучков волокон [13–21].

Результаты данного исследования позволяют объективно раскрыть сильные стороны терагерцовой технологии в интраоперационной диагностике опухолей головного мозга человека.

Работа И.В. Решетова (медицинские аспекты исследования) поддержаны Российским фондом фундаментальных исследований (РФФИ), 18-29-02060-мк. Работа Г.А. проект № Командина (терагерцовая диэлектрическая спектроскопия тканей) поддержана Российским научным фондом (РНФ), проект № 18-12-00328. Работа К.И. Зайцева (терагерцовая микроскопия тканей) поддержана проектом РНФ № 17-79-20346.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Q. Ostrom et al., *Neuro-Oncology* **20**(Suppl. 4), iv1 (2018).
- 2. T. Garzon-Muvdi et al., *Future Oncology* **13**(19), 1731 (2017).
- 3. O.A. Smolyanskaya et al., *Progress in Quantum Electronics* **62**, 1 (2018).
- 4. K.I. Zaytsev et al., *Journal of Optics* **22**(1), 013001 (2020).
- 5. S.J. Oh et al., *Biomedical Optics Express* **5**(8), 2837 (2014).
- 6. Y.B. Ji et al., *Scientific Reports* **6**, 36040 (2016).
- 7. A.A. Gavdush et al., *Journal of Biomedical Optics* **24**(2), 027001 (2019).

8. A.A. Gavdush et al. "Terahertz dielectric spectroscopy of human brain gliomas and intact tissues ex vivo: Double-Debye and double-overdamped-oscillator models of dielectric response," *Biomedical Optics Express* (2020), Under Review.

9. I.N. Dolganoca et al., *Biomedical Optics Express* **11**(11), 6780 (2020).

- 10. N.V. Chernomyrdin et al., *Applied Physics Letters* **110**(220, 221109 (2017).
- 11. N.V. Chernomyrdin et al., *Applied Physics Letters* **113**(11), 111102 (2018).
- 12. N.V. Chernomyrdin et al., *Optical Engineering* **59**(6), 061605 (2019).

13. K.I. Zaytsev et al., *IEEE Transactions on Terahertz Science & Technology* **6**(4), 576 (2016).

14. G.M. Katyba et al., *Advanced Optical Materials* **6**(22), 201800573 (2018).

15. G.M. Katyba et al., *Progress in Crystal Growth & Characterization of Materials* **64**(4), 133 (2018).

16. I.V. Minin et al., *Applied Physics Letters* **114**(3), 031105 (2019).

17. G.M. Katyba et al., "Sapphire waveguides and fibers for terahertz applications," *Progress in Crystal Growth & Characterization of Materials* (2020), Under Review.

18. V.E. Ulitko et al., *Optical Materials Express* **10**(9), 2100 (2020).

19. K.I. Zaytsev et al., Advanced Optical Materials (2020), DOI:

10.1002/adom.202000307.

20. A.A. Gavdush et al., *Optics Express* **28**(18), 26228 (2020).

21. G.R. Musina et al., *Journal of Biophotonics* (2020), DOI:

10.1002/jbio.202000297.

THZ DIELECTRIC SPECTROSCOPY AND THZ SOLID IMMERSION MICROSCOPY OF WHO GRADE I–IV GLIOMAS FROM THE HUMAN BRAIN AND 101.8 GLIOMA MODEL FROM RATS

<u>K.I. Zaytsev</u>^{1,2,*}, N.V. Chernomyrdin^{1,2}, I.N. Dolganova^{2,3}, A.A. Gavdush¹,
Sh.-I.T. Beshplav⁴, P.V. Nikitin⁴, A.I. Alekseeva⁵, G.A. Komandin¹,
G.M. Katyba^{1,3}, V.N. Kurlov³, A.A. Potapov⁴, I.V. Reshetov², V.V. Tuchin⁶

¹Prokhorov General Physics Institute of the Russian Academy of Sciences, Russia

²Sechenov University, Russia ³Institute of Solid State Physics of the Russian Academy of Sciences, Russia ⁴Burdenko Neurosurgery Institute, Russia ⁵Research Institute of Human Morphology, Russia ⁶Saratov State University, Russia *E-mail: kirzay@gmail.com

In this talk, resent results of studying an ability to diagnose gliomas of the brain using THz spectroscopy and imaging are considered. First, we studied the THz dielectric properties of human brain gliomas *ex vivo* featuring different WHO grades using the THz pulsed spectroscopy. This study revealed statistical differences between the THz dielectric properties of gliomas and intact tissues. Next, we studied glioma model 101.8 in rat brain *ex vivo* using both the THz pulsed spectroscopy and the THz solid immersion microscopy with the spatial resolution of 0.15λ ; here, λ is an electromagnetic wavelength. The observed results confirmed an ability for differentiation between intact tissues and gliomas using the THz technology, and, furthermore, they revealed heterogeneous character of brain tissues at the scale posed by the THz wavelengths.

Key words: terahertz technology, terahertz pulsed spectroscopy, terahertz solid immersion microscopy, human brain gliomas, glioma model 101.8, intraoperative neurodiagnosis

ФОТОНИКА В ИЗУЧЕНИИ ОКЕАНА

Ю.Н. Кульчин

ФГБУН Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН, г. Владивосток

Представлены результаты лидарных исследований, позволившие выявить особености процесов взаимодействия океана и атмосферы в условиях определяющих особенности распределения перехода континент-океан, атмосферного аэрозоля, малых газовых составляющих атмосферы и ее оптических характеристик. Рассмотрены методы и средства совместного оптического и лазерно-флуоресцентного мониторинга поверхности океана. Особое внимание уделено результатам исследований дистанционных методов и средств лазерно-искрового и лазерно-флуоресцентного экологического мониторинга океана В реальном времени, включающих разработку специальных волоконно-оптических зондов и мобильных подводных робототехнических комплексов. Приведены результаты по разработке и исследованию высокочувствительных и помехозащищенных волоконносейсмо-акустических оптических гидро-И сенсоров дистанционного мониторинга океана.

АКУСТООПТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ И СРЕДСТВА ОПТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ

В.Э. Пожар^{1,2}

¹Научно-технологический центр уникального приборостроения РАН (117342, г. Москва, ул. Бутлерова, 15) ²Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана (105005, г. Москва, ул. 2-я Бауманская, 5с1)

Лекция посвящена современным задачам в области оптического спектрального исследования объектов с использованием акустооптических (AO) перестраиваемых фильтров. Выделены и проиллюстрированы особые свойства этих спектральных устройств. Перечислены базовые принципы акустооптики и основные типы AO устройств. Представлено семейство разработанных спектральных аналитических устройств и систем и дана их классификация. Сформулированы особенности и перспективы AO методов исследований и анализа.

НАНОЧАСТИЦЫ CuInS₂ В КАЧЕСТВЕ НАНОТЕРМОМЕТРОВ: EX VIVO ИССЛЕДОВАНИЯ

<u>И.Ю. Янина^{1,2}, Е.А. Козлова¹, В.И. Кочубей^{1,2}</u>

¹ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского» (410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83)
²Национальный исследовательский Томский государственный университет (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36) е-mail: irina-yanina@yandex.ru

Использование наночастиц в качестве термометров для точного бесконтактного определения температуры с микронным пространственным разрешением в реальном времени является важным для многих практических применений как в лазерной медицине, так и в биологии. Частицы CuInS₂ можно использовать в качестве биосенсоров для контроля температуры биоткани. Целью работы являлась исследование влияния оптических параметров образца на точность измерения температуры наночастиц, помещенных в биологическую ткань.

СЕКЦИЯ АСПИРАНТОВ И МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ

ФУНКЦИЯ ХЕШИРОВАНИЯ НА ОСНОВЕ ОРБИТАЛЬНОГО УГЛОВОГО МОМЕНТА СВЕТА

<u>Д.О. Акатьев</u>¹, Д.А. Турайханов¹, А.В. Васильев^{1,2}, Ф.М. Аблаев^{1,2} А.А. Калачев^{1,2}

¹Казанский физико-технический институт им. Е.К.Завойского ФИЦ Каз РАН (420029, Казань, ул. Сибирский тракт, д. 10/7) ²Казанский (Приволжский) федеральный университет, (42000, Казань, ул. Кремлевская, 18) e-mail: akatevdmitrijj@gmail.com

В работе рассматривается квантово-классическая реализация хешфункции на основе орбитального углового момента света. В процессе спонтанного параметрического рассеяния света в базисе орбитального углового момента света были получены кубиты и на их основе построена хешфункция. Были проведены исследования вероятности ошибочного измерения функции хеширования в зависимости от числа используемых кубитов.

Ключевые слова: спонтанное параметрическое рассеяние, орбитальный момент света, функция хеширования.

1. ВВЕДЕНИЕ

Неклассические состояния, такие как однофотонные, перепутанные пары фотонов и т.п., широко используются для реализации различных приложений квантовой оптики и квантовой информатики [1-3]. Как правило, для реализации таких состояний используют различные нелинейные процессы (параметрическое рассеяние, спонтанное четырех волновое смешение и д.р.), излучение одиночных квантовых объектов (квантовые точки, одиночные атомы) и т.д. В нашей работе будет рассмотрен процесс спонтанного параметрического рассеяния света (СПР) как источник неклассических состояний света (одиночных фотонов, двумерных И многомерных однофотонных состояний) [3, 4].

Стоит отметить, что в процессе СПР можно управлять не только частотными, но и пространственными степенями свободы. Например, возможно задавать угловой момент фотонов рассеянного поля с помощью накачки, обладающей ненулевым угловым моментом [5, 6]. Использование пространственных степеней свободы позволяет увеличить емкость квантовых носителей (одиночных фотонов с ОУМ), то есть появляется возможность

записывать на один квантовый бит (кубит) более одного бита классической информации [4,6], это позволяет существо увеличить скорость работы криптографических протоколов и нивелировать некоторые ограничения, например, скорость работы однофотонных детекторов. Кроме того развитие квантовых технологий предполагает перенос различных протоколов и приложений с классической реализации на квантовый уровень. Использование пространственных степеней расширяет возможные диапазон применения одиночных фотонов и позволяет строить новые криптографические примитивы на их основе. В нашей работе будет рассмотрена возможность переноса протокола хеширования на квантовую основу [7, 8]. Хеш-функция будет реализована на одиночных кубитах с помощью орбитального момента света.

2. РЕАЛИЗАЦИЯ ФУНКЦИИ ХЕШИРОВАНИЯ НА ОСНОВЕ ОРБИТАЛЬНОГО МОМЕНТА СВЕТА

2.1. Кубиты на основе орбитального момента света и томография его состояния

Для реализации состояний, способных хранить более одного бита классической информации, обычно используют суперпозицию различных степеней свободы: временную, пространственную, частотную и др. В нашей работе мы подробно остановимся на пространственных степенях свободы в базисе орбитального углового момента. В случае использования накачки с ОУМ было показано, что происходит сохранения орбитального момента света $l_{pump} = l_s + l_i$ нелинейных процессах, в частности СПР [9], где l_{pump} – значение ОУМ фотона накачки, l_s и l_i – значения ОУМ фотона сигнального и холостого, соответственно. Однако данное условие выполняется лишь в коллинеарном режиме синхронизма. Как правило, пучки с ОУМ описывают с помощью функций, являющихся решением волнового уравнения в различных системах координат: Лаггера-Гаусса LG_p^l цилиндрическом базисе, Бессель-Гаусса BG_p^l и т.д.. Для генерации пучков с орбитальным угловым моментом мы использовали жидкокристаллический пространственный модуляторы света (SLM – spatial light modulator). Принципиальная схема установки по генерации однофотонных состояний с орбитальным угловым моментом представлена на рисунке 1. Для детектирования фотонов с орбитальным моментом нами был использован компенсационный метод.



Рисунок 1. Экспериментальная установка для генерации однофотонных состояний с орбитальным угловым моментом.

Наиболее интересными, точки зрения реализации с различных криптографических протоколов, являются суперпозиционные состояний: двумерные (кубиты) и многомерные (кудиты) состояния. Для реализации двумерных состояний нами были выбраны состояний с *l* по модулю равными 1 и 2. На основе этих состояний с орбитальным угловым моментом были построены кубиты $|\Psi_1\rangle = (|1\rangle + |-1\rangle)/\sqrt{2}$ и $|\Psi_1\rangle = (|2\rangle + |-2\rangle)/\sqrt{2}$. Для проверки реализации кубитов нами были проведены проекционные измерения. На рисунке 2 представление результаты проекционных измерений. Из данного графика видно, что счет совпадений становится близким к нулю, когда происходит проекционное измерение на ортогональное состояние (когда фазовый сдвиг равен $\phi = \pi$) и не зависит от значения орбитального углового момента. Кроме того, чтобы полностью характеризовать генерируемое состояние была произведена квантовая томография. Результаты томографии приведены на рисунке 3.



Рисунок 2. Результаты проекционных измерений |< $\Psi_i |\Psi_i(\phi)>|^2$: красные треугольники - результаты проекционного измерения для | Ψ_1 >, черные ромбы - результаты проекционного измерения для | Ψ_2 >



Рисунок 3. Результаты восстановленной матрицы плотности: а) для кубита |Ψ₁> слева реальная часть, справа мнимая; б) для кубита |Ψ₂> слева реальная часть, справа мнимая.

2.1. Функция хеширования на основе одиночных кубитов в базисе орбитального углового момента света

Функция хеширования представляет собой однонаправленную функцию свертки, которая позволяет перевести слово произвольной длины х в последовательность фиксированной длины [7, 8]. В нашей работе мы рассматривали реализацию квантово-классической хеш-функции (далее квантовая хеш-функция), основанной на одиночных фотонах, с кодированием исходного сообщения с помощью орбитального углового момента света. Входная строка х кодируется в некоторое квантовое состояние $|\Psi(X)>$, которое состоит из последовательности изолированных кубитов. Последовательность кубитов целиком будет определяться с помощью всего входного сообщения X. Квантовая хеш-функция реализуется путем прямого произведения состояний кубита:

$$|\Psi(X)\rangle = |\Psi_1(X)\rangle \otimes |\Psi_2(X)\rangle \otimes \ldots \otimes |\Psi_s(X)\rangle$$
(11)

Где $|\Psi_j(X)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|i\rangle + e^{i\frac{2\pi b_j X}{q}}|-i\rangle)$, где $|i\rangle$ – состояние с ОУМ равным i = 1или 2, X – целое положительно число {0, 1, ..., q-1}, q – определяет длины входного сообщения, b_i – числовой параметр, который обеспечивает устойчивость к коллизиям, s – равно количеству используемых кубитов в квантовой хеш-функции. Стоим отметить, что основным свойством хеширования является максимальное отличие хеш-сумм (максимальная видность) при минимальном отличии входного сообщения. Для получения максимальной видности (вероятность ошибки сравнения) между двумя близкими входными сообщениями необходимо подбирать числовые параметры b_i таким образом, чтобы $|\langle \Psi_i(x)|\Psi_i(y)\rangle|^2$ было минимально. Целью нашей работы являлась оценка вероятности ошибки реализации протокола хеширования на основе кубитов с орбитальным моментом света. Для этого нами были подобраны х и у таким образом, чтобы произведение двух хешфункций было близко к единице, то есть эти функции максимально похожи. Данные измерения проводились для разного количества кубитов, лежавших в основе хеш-функции. Результаты измерения представлены на рисунке 4. За ошибочное измерение принималось реализация хеш-функции, при которой хотя бы один из измеряемых кубитов давал неверный ответ на проекционное измерение.



Рисунок 9. Вероятность ошибки проекционного измерения $|\langle \Psi_i(x)|\Psi_i(y)\rangle|^2$ в зависимости от количества кубит S при реализации протокола хеширования

Из графика видно, что экспериментальные данные хорошо согласуются с теоретическими расчётами.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Были реализованы кубиты на основе орбитального углового момента света. На основе этих кубитов была реализована квантово-классическая хешфункция и проведены измерения ошибки распознавания двух близких хеш-Было показано, что с увеличением числа кубитов, ошибка функций. необходимо измерения уменьшается, однако найти баланс между однонаправленностью δ и вероятностью коллизий. На наш ВЗГЛЯД. оптимальным количеством кубит для реализации хеш-функции S = 5, при этом вероятность обращения составила $\delta = 1/16$ и вероятность коллизий составила 0.31. Дальнейшим развитием данной реализации функции хеширования является мультиплексирование и реализация протокола хеширования на многомерных однофотонных состояниях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Kok, P. Photonic quantum information processing // Contemporary Physics, 2016, v. 57, iss. 4, p. 526-544.
- I.A. Walmsley, Quantum optics: Science and technology in a new light [Текст] / I.A. Walmsley // Science., 2015, v. 348, iss. 6234, p. 525-530.
- A. Vaziri, G. Weihs, A. Zeilinger, Experimental two-photon, three-dimensional entanglement for quantum communication // Physical Review Letters, 2002, v. 89, iss. 24, p. 240401.
- 4. S.A. Castelletto, R.E. Scholten, Heralded single photon sources: a route towards quantum communication technology and photon standards // The European Physical Journal Applied Physics, 2008, v.41, iss. 3, p. 181-194.
- 5. A.V. Shkalikov et al., On the development of controllable sources of singlephoton states with an orbital angular momentum on the basis of spontaneous parametric down-conversion of light // Bulletin of the Lebedev Physics Institute, 2018., v.45, iss. 3, p. 79-82.
- 6. Y. Zhang et al., Simultaneous entanglement swapping of multiple orbital angular momentum states of light // Nature communications, 2017, v.8, iss. 1, p. 1-7.
- 7. F.M. Ablayev, A.V. Vasiliev, Cryptographic quantum hashing // Laser Physics Letters, 2013, v.11, iss. 2, p. 025202.
- 8. F. Ablayev, M. Ablayev, A. Vasilie, On the balanced quantum hashing // Journal of Physics: Conference Series, 2016, V.681, Iss. 1, p. 012019.
- 9. A. Mair et al., Entanglement of the orbital angular momentum states of photons // Nature, 2001, v.412, iss. 6844, p. 313-316.

THE QUANTUM HASH-FUNCTION VIA ORBITAL ANGULAR MOMENTUM

D.O. Akat'ev¹, D.A. Turaykhanov¹, A.V. Vasil'ev^{1,2}, F.M. Ablayev^{1,2}, A.A. Kalachev^{1,2}

 ¹ Kazan E. K. Zavoisky Physical-Technical Institute, (Sibirsky tract, 10/7, Kazan, Russia, 420029)
² Kazan Federal University, (Kremlyovskaya street, 18, Kazan, Russia, 420008) e-mail: akatevdmitrijj@gmail.com

In this thesis we consider at the quantum-classical hash function implementation via an orbital angular momentum of light. We produced single photon qubits based on orbital angular momentum and studied their qualities. Quantum hash-function was compared and probability of wrong measurement spotted between two alike hash-functions.

Keywords: quantum hashing, SPDC, single photon, orbital angular momentum.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТЕЙ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА ДЛЯ ТЕМПЕРАТУРНОГО КОНТРОЛЯ ПРИ ФОТОГИПЕРТЕРМИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КРЕМНИЕВЫХ НАНОСТРУКТУР

<u>А.Ф. Алыкова¹, И.Н. Завестовская^{1,3}, В.Ю. Тимошенко^{1,2,3}</u>

¹Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (115409, Москва, Каширское ш., 31) ²Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, (119991, Москва, Ленинские горы, д. 1) ³Физический институт имени П. Н. Лебедева Российской академии наук (119333г. Москва, Ленинский проспект, д. 53) e-mail: waiste15@bk.ru

Исследовано влияние комбинированного эффекта ограничения размеров локального лазерного нагрева (фотогипертермия) на спектр И комбинационного рассеяния (КРС) кремниевых нанокристаллов (Si). полученных различными методами и помещенных в водную среду. Повышение локальной температуры нанокристаллов Si за счет лазерного излучения с максимальной интенсивностью на образце не более 100 Bt/cm² оценивалось по соотношению интенсивностей стоксовых / антистоксовых пиков. Для кремниевых нанокристаллов нитевидной формы (нанонитей) с поперечными размерами менее 10 нм реализуется так называемый квантовый размерный эффект для носителей заряда (электронов и дырок), который приводит к росту ширины запрещенной зоны и сдвигу края оптического область. поглощения В высокоэнергетическую Оптические свойства кремниевых наноструктур с большими поперечными размерами будут эффектов, существенно зависеть OT связанных с пространственным распределением локальных электрических полей, и обуславливаться рассеянием света как отдельными нанообъектами, так и их ансамблями. Изучение таких эффектов в наноструктурах в виде ансамблей кремниевых нанонитей (КНН) и мезопористого кремния (mPSi) особенно актуально, быть задействованы поскольку они могут легко В устройствах микроэлектроники и сенсорики, а также, получении новых материалов для биофотоники и биомедицины.

Ключевые слова: комбинационное рассеяние света, наночастицы, нанонити, фотогипертермия.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы интенсивно исследуются различные ВИДЫ наноструктурных форм кристаллического кремния (Si) для использования в технике и биомедицине, в том числе для диагностики и терапии различных заболеваний [1,2]. Кремниевые нанонити [9], и получаемые из них наночастицы (НЧ) [5], обладают колоссальным набором уникальных физикохимических свойств, которые рекомендуется использовать как в терапии опухолей [1,2,5,6], так и в качестве контрастных агентов при оптической биовизуализации [4,5,9]. Разработано несколько способов получения порошков и стабильных водных суспензий НЧ Si [1-8]. А работах [5,10] продемонстрировано, что процессы накопления и выведения НЧ кремния в биосистемах можно диагностировать методом рамановской спектроскопии. В данных структурах наблюдается сильное рассеяние и локализация света в широком диапазоне спектра, вследствие чего полученные образцы обладают чрезвычайно низким полным отражением света (единицы процентов) как в УФ так и в видимой области спектра; также в таких наноструктурах наблюдается увеличение интенсивности межзонной фотолюминесценции кремния (1.12 эВ) и комбинационного рассеяния света по сравнению с исходными подложками кристаллического кремния; помимо прочего, получаемые нанонити обладают также эффективной фотолюминесценцией в диапазоне 500-1100 нм. В работе [11] показано, что локальный лазерный нагрев образца может вносить существенный вклад в смягчение и уширение фононов, что, в свою очередь, приводит к переоценке эффекта размерного квантования.

В данной работе методом спектроскопии комбинационного (рамановского) рассеяния света проведено сравнительное исследование температурного контроля с помощью стоксовых и антистоксовых пиков на кремниевых наноструктурах.

2. МАТЕРИАЛЫ

Эксперименты проводились с образцами кристаллических нанонитей кремния (SiNWs), наночастицами мезопористого кремния (mesoPSi).

Образцы SiNWs были сформированы методом металлстимулированного химического травления (MCXT). Этот метод основан на селективном химическом растворении монокристаллических пластин кремния (c-Si) р-типа проводимости в растворах плавиковой кислоты (HF). В качестве катализатора применяются наночастицы благородных металлов, в нашем случае – серебра (Ag). Удельное сопротивление 1-10 Ом×см и ориентация поверхности (100).
Использовался 2-х ступенчатый вариант метода. Образцы mesoPSi формировались с помощью стандартного метода электрохимического травления пластин с-Si p-типа проводимости с ориентацией поверхности (100) и удельным сопротивлением 1-5 мОм×см в растворе плавиковой кислоты и этанола (HF(50%): C2H5OH=1:1). Плотность тока травления 60 мА/см². Травление проводилось в течение 1 часа. Затем пленки mesoPSi отделялись от кремниевой подложки кратковременным повышением плотности тока до 600 мА/см². Следующим действием было получение водных суспензий наночастиц. Это осуществлялось механическим измельчением пленок mesoPSi в планетарной шаровой мельнице FRITSCH "Pulverisette 7" в течение 5 мин при скорости вращения 800 об/мин и диаметре использованных шаров оксида циркония 3 мм с четырехкратным повторением во избежание большого выделения водорода. Помол проводили в водной среде (порядка 5 мл в сумме).

3. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Измерения КРС были выполнены на образцах мезопористого кремния и кремниевых нанонитей. Спектры КРС полученных образцов снимались на спектрометре ДФС52 (рис.1) в 90-градусной геометрии рассеяния. Приемником служил работающий в режиме счета фотонов охлаждаемый фотоэлектронный умножитель ФЭУ-79. В качестве источника возбуждающего излучения использовался аргоновый лазер с длиной волны λ =514.5 нм и максимальной интенсивностью на образце не более 100 Вт/см². Для оценки температуры в образце измерения проводились в областях как меньшей, так и большей длин волн (стоксов и антистоксов рассеяние)



Рис.1. Схема экспериментальной установки ДФС-52

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ИЗМЕРЕНИЙ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рисунках 2 и 3 показаны типичные стоксовы и антистоксовы спектры комбинационного рассеяния исследованных SiNWs и mPSi, измеренные при различной плотности мощности возбуждения.



Рис. 2. Спектры КРС образцов SiNWs (стокс и антистокс компоненты)

Локальную температуру исследуемых нанокристаллов *Si* в области возбуждения оценили по соотношению интегральных стоксовых и антистоксовых интенсивностей (*I_S* / *I_A*) согласно соотношению

$$\frac{I_s}{I_{AS}} = \left(\frac{\omega_l + \omega_s}{\omega_l - \omega_s}\right)^4 \exp\left(\frac{-\hbar\omega_s}{kT}\right)$$
(1)

где ω_l , ω_s и ω_{AS} – частоты возбуждающих фотонов, стоксовой и антистоксовой фононных компонент соответственно, k – постоянная Больцмана, T – температура.



Рис. 3. Спектры КРС образцов тРSi (стокс и антистокс компоненты)

При повышении температуры фононная линия уширяется и смещается. Такое существенное изменение фононных спектров при относительно низких температурах весьма необычно и может быть объяснено только при наличии дополнительных механизмов распада фононов и тепловыделением в нанокристаллах Si.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом спектроскопии рамановского рассеяния были исследованы образцы нанокристаллического кремния различных размеров и морфологии, а именно: нанонити и мезопористые наночастицы, полученные методом MCXT при локальном нагреве. Установлена линейная зависимость локальной температуры нанокристаллов Si от плотности мощности возбуждающего излучения. Наблюдаемое сильное смягчение и уширение стоксовой и антистоксовой составляющих с увеличением плотности мощности возбуждения связано с эффектом лазерного нагрева. Следующим этапом запланировано выяснить (уточнить) роль конфаймента, т.к. результаты, полученные в данной работе, требуют дополнительной проверки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- A.A. Ischenko, G.V. Fetisov, L.A. Aslanov, Nanosilicon: Properties, Synthesis, Applications, Methods of Analysis and Control, CRC Press, Taylor& Francis Group, Boca Raton, London, New York, 2015.
- A. V. Kabashin, V. Yu. Timoshenko. What theranostic applications could ultrapure laser-synthesized Si nanoparticles have in cancer? Nanomedicine, 11 (17), 2247-2250 (2016).
- M. B. Gongalsky, A. Pereira, A. A. Manankov, A. A. Fedorenko, A.N. Vasiliev, V.V.Soloviev, A. A. Kaudryavtsev, M. Sentis, A. V. Kabashin, V. Yu. Timoshenko. Laser-synthesized oxide-passivated bright Si quantum dots for bioimaging, Sci. Rep., 6, 24732 (2016).
- 4. L.A. Osminkina, V. Yu. Timoshenko. Porous silicon as a sensitizer for biomedical applications: Mini-review. Mesopor. Biomat. 3, 39–48 (2016).
- E. Tolstik, L.A. Osminkina, C. Matthäus, M. Burkhardt, K.E. Tsurikov, U.A. Natashina, V.Yu. Timoshenko, R. Heintzmann, J. Popp, V. Sivakov. Studies of silicon nanoparticles uptake and biodegradation in cancer cells by Raman spectroscopy, Nanomedicine: Nanotechnol., Biol. & Medic., 12, № 7, 1931-1940 (2016).
- L.A. Osminkina, A.L. Nikolaev, A.P. Sviridov, N.V. Andronova, K.P. Tamarov, M.B.Gongalsky, A.A.Kudryavtsev, H.M. Treshalina, V. Yu. Timoshenko. Porous silicon nanoparticles as efficient sensitizers for sonodynamic therapy of cancer, Micropor. Mesopor. Mat., 210, 169-175 (2015).

- A.P. Sviridov, L.A. Osminkina, A. Yu. Kharin, M.B. Gongansky, J.V. Kargina, A.A. Kudryavtsev, Yu. I. Bezsudnova, T.S. Perova, A. Geloen, V. Lysenko, V. Yu. Timoshenko. Cytotoxicity control of silicon nanoparticles by biopolymer coating and ultrasound irradiation for cancer theranostic applications, Nanotechnol., 28 (10) 105102 (2017).
- V.Yu. Timoshenko, A.A. Kudryavtsev, L.A. Osminkina, A.S. Vorontsov, Yu.V. Ryabchikov, I.A. Belogorokhov, D. Kovalev, P.K. Kashkarov. Silicon nanocrystals as photosensitizers of active oxygen for biomedical applications, JETP Lett., 83(9), 423-426 (2006).
- K.P. Tamarov, L.A. Osminkina, S.V. Zinovyev, K.A. Maximova, J.V. Kargina, M.B.Gongalsky, Yu. Ryabchikov, A.Al-Kattan, A.P. Sviridov, M. Sentis, A.V. Ivanov, V.N. Nikiforov, A.V. Kabashin, V. Yu. Timoshenko. Radio frequency radiation-induced hyperthermia using Si nanoparticle-based sensitizers for mild cancer therapy, Sci. Rep., 4, 7034 (2014).
- 10.A. F. Alykova, I. N. Zavestovskaya, V. G. Yakunin, V. Yu. Timoshenko Raman diagnostics of silicon nanocrystals dissolution in aqueous medium. Journal of Physics: Conference Series. Vol. 945. P. 012002 (2018).
- A.S. Nikolenko Laser heating effect on Raman spectra of Si nanocrystals embedded into SiOx matrix. Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics, 2013. V. 16, N 1. P. 86-90.

STUDY ON POSSIBILITIES OF RAMAN SPECTROSCOPY FOR TEMPERATURE CONTROL OF PHOTOHYPERTHERMIA WITH SILICON NANOSTRUCTURES

A.F. Alykova¹, I.N Zavestovskaya^{1,3}, V.Yu. Timoshenko^{1,2,3}

¹National Research Nuclear University MEPhI, (Kashirskoe hwy, 31, Moscow, Russia, 115409) ² Lomonosov Moscow State University, (Leninskie Gory 1, Moscow, Russia, 119991) P.N.Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences (Leninskiy Prospekt, 53, Moscow, Russia, 119333) e-mail: waiste15@bk.ru

The effect of the combined effect of size restriction and local laser heating (photohyperthermia) on the Raman spectrum of silicon nanocrystals (Si) obtained by various methods and placed in an aqueous medium is studied. The increase in the local temperature of Si nanocrystals due to laser radiation with a maximum intensity of no more than 100 W cm² on the sample was estimated from the ratio of the Stokes and anti-Stokes peak intensities. The so-called quantum size effect for charge carriers (electrons and holes) is realized for silicon nanocrystals of filamentous shape (nanofilaments) with transverse dimensions less than 10 nm, which leads to an increase in the band gap and a shift of the optical absorption edge to the high-energy region. The optical properties of silicon nano-structures with large transverse dimensions will significantly depend on the effects associated with the spatial distribution of local electric fields, and are caused by light scattering by individual nanoobjects and their ensembles. The study of such effects in nano-structures in the form of ensembles of silicon nanowires (SiNWs) and mesoporous silicon (mPSi) is particularly relevant, since they can be easily used in microelectronics and sensor devices, as well as in the development of new materials for Biophotonics and Biomedicine.

Keywords: Raman spectroscopy, nanoparticles, nanowires, photohyperthermia.

ВЛИЯНИЕ ТЕПЛОВОГО ДИСБАЛАНСА НА НЕЛИНЕЙНЫЕ АЛЬФВЕНОВСКИЕ ВОЛНЫ

<u>С.А. Белов^{1,2}, Н.Е. Молевич^{1,2}, Д.И. Завершинский^{1,2}</u>

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: mr_beloff@mail.ru

В работе показано, что самовоздействие альфвеновских волн в полностью ионизованной вязкой, конечно проводящей и теплопроводной плазме с тепловым дисбалансом может быть описано системой укороченных уравнений. Численное решение полученной системы для параметров верхней хромосферы показывает, что в данных условиях тепловой дисбаланс может приводить к более быстрому укручению профиля альфвеновской волны, что может способствовать быстрому нагреву плазмы.

Ключевые слова: альфвеновские волны, тепловой дисбаланс, Солнце.

1. ВВЕДЕНИЕ

Альфвеновские волны [1,2] длительное время вызывают большой интерес, поскольку они являются возможным источником энергии для нагрева солнечной короны и ускорения солнечного ветра [3,4] Однако для нагрева альфвеновскими волнами необходимы механизмы преобразования энергии волны в энергию плазмы. В качестве таких механизмов, например, могут выступать фазовое перемешивание [5], нелинейные взаимодействия волнаволна [6-8] и формирование ударно-волновых фронтов в линейно поляризованных альфвеновских волнах большой амплитуды [9-12]

Последний механизм вызывает наибольшей интерес, потому что в настоящее время существует наблюдение диссипации альфвеновских волн в хромосфере из-за формирования ударно-волновых фронтов на границе тени солнечного пятна [13]. Данная диссипация объясняется, в частности, появлением токовых слоев, вызванных укручением профиля альфвеновской волны [10,12]. Причиной данного укручения является взаимодействие альфвеновской волны с вызванным ею продольным возмущением плазмы. Для подобного взаимодействия «самовоздействие». используют термин Самовозлействие слабо нелинейных эллиптически поляризованных

альфвеновских волн может быть описано уравнением Коэна-Кулсруда [14], самовоздействие линейно поляризованных плоских [15] и сферических [11] альфвеновских волн, а также крутильных альфвеновских волн [16] может быть описано скалярным уравнением Коэна-Кулсруда.

В то же время, дисбаланс между процессами нагрева и радиационного охлаждения в солнечной атмосфере может воздействовать на динамику МГДволн и проявлять себя в виде тепловых неустойчивостей: изохорической, изобарической изоэнтропической. Например, И изоэнтропическая неустойчивость формированию может привести к медленных магнитоакустических квазипериодических волновых пакетов [17]. Кроме того, в изоэнтропически неустойчивой плазме возможно возникнование автоволн [18,19] и автоволновых солитонных акустических/магнитоакустических импульсов [20,21]. В то же самое время изоэнтропическая устойчивость плазмы может быть использована, чтобы объяснить поведение SUMER колебаний [22].

Воздействие теплового дисбаланса на альфвеновские волны возможно только в нелинейном режиме. Так, параметрическое взаимодействие изоэнтропически неустойчивых магнитоакустических волн с альфвеновскими волнами приводит к би-экспоненциальному усилению последних [23-25]. Самовоздействие альфвеновских волн в плазме с тепловым дисбалансом может приводить к изменению скорости укручения волн и изменению их амплитуды по мере распространения [26].

В данной работе рассматривается влияние теплового дисбаланса на самовоздействие альфвеновских В конечно проводящей, вязкой И теплопроводной плазме. Подобное исследование может быть полезно в контексте определения методов наблюдательного детектирования альфвеновских волн в короне и источника альфвеновских волн, наблюдаемых в солнечном ветре.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Рассмотрим систему МГД-уравнений, описывающую процессы в вязкой, конечной проводящей и теплопроводной полностью ионизованной плазме, в которой также присутствует дисбаланс между процессами нагрева и радиационного охлаждения:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \vec{v}\right) = 0, \quad \rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v}\right) = -\nabla P - \frac{1}{4\pi} \vec{B} \times \left(\nabla \times \vec{B}\right) + \vec{F}_{v}, \quad (1)$$

$$\begin{split} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} &= \nabla \times \left(\vec{v} \times \vec{B} \right) + \frac{c^2}{4\pi\sigma} \Delta \vec{B} , \quad \nabla \cdot \vec{B} = 0 , \quad P = \frac{k_B}{m} \rho T , \quad \vec{j} = \frac{c}{4\pi} \nabla \times \vec{B} , \\ C_{\nu \infty} \rho \left(\frac{\partial T}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) T \right) - \frac{k_b T}{m} \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla) \rho \right) = -\rho Q(\rho, T) + \frac{j^2}{\sigma} + \kappa \Delta T + H_{\nu} , \\ \vec{F}_{\nu} &= \rho \upsilon \left(\Delta \vec{v} + \frac{1}{3} \nabla \left(\nabla \cdot \vec{v} \right) \right) , \quad H_{\nu} = \rho \upsilon \left(e_{ij} e_{ij} - \frac{2}{3} \left(\nabla \cdot \vec{v} \right)^2 \right) , \quad e_{ij} = \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) . \end{split}$$

В системе (1) ρ , T, P – плотность, температура и давление плазмы, соответственно; \vec{v} , \vec{B} , \vec{j} – вектора скорости плазмы, магнитного поля и плотности электрического тока; v – коэффициент вязкости, \vec{F}_v и H_v – сила вязкости и мощность вязкой диссипации; *с* – скорость света в вакууме; *σ* – коэффициент электрической коэффициент проводимости; κ теплопроводности; k_B – постоянная Больцмана; $C_{V\infty}$ – высокочастотная теплоемкость при постоянно объеме; m – средняя масса частицы. $Q(\rho,T)$ = $L(\rho,T) - H(\rho,T)$ – обобщенная функция тепловых потерь; $L(\rho,T)$ и $H(\rho,T)$ – функции охлаждения и нагрева, соответственно. Данная функция равна нулю в стационарных условиях: $Q(\rho_0, T_0) = L(\rho_0, T_0) - H(\rho_0, T_0) = L_0 - H_0 = 0$. Поскольку нагрев и охлаждение зависят от температуры и плотности среды, возмущения этих величин в волне приводят к тепловому дисбалансу, который, в свою очередь, может влиять на динамику данной волны.

Рассмотрим линейно поляризованную вдоль направлению оси x альфвеновскую волны, бегущую вдоль внешнего магнитного полня $\vec{B}_0 = B_0 \vec{e}_z$. Далее используем теорию возмущений и ограничимся рассмотрением величин вплоть до третьего порядка малости по параметру $\alpha \ll 1$, представляющему из себя относительную амплитуду возмущения в волне. Для этого рассмотрим величины в системе уравнений (1) в следующем виде: $\rho = \rho_0 + \alpha \rho_1 + \alpha^2 \rho_2 + \alpha^3 \rho_3$, $B_x = B_{x1} + \alpha^2 B_{x2} + \alpha^3 B_{x3}$, и будем также считать, что $\eta, \upsilon, \kappa \sim \alpha$. Тогда система уравнений (1) переходит в два связанных уравнения, описывающих эволюцию и взаимодействие альфвеновских волн и акустических возмущений:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial t^2} - c_{\infty}^2 \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial z \partial t} \frac{B_x^2}{8\pi\rho_0} \right) + \frac{1}{\tau_v} \left(\frac{\partial^2 v_z}{\partial t^2} - c_0^2 \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} + \frac{\partial^2}{\partial z \partial t} \frac{B_x^2}{8\pi\rho_0} \right) = 0, \qquad (2)$$

$$\frac{\partial^2 B_x}{\partial t^2} - c_a^2 \frac{\partial^2 B_x}{\partial z^2} = -\frac{\partial^2 v_z B_x}{\partial z \partial t} + (\eta + \upsilon) \frac{\partial^3 B_x}{\partial z^2 \partial t} - \eta \upsilon \frac{\partial^4 B_x}{\partial z^4}.$$
(3)

В полученных уравнениях $c_{\infty}^2 = C_{p_{\infty}}k_BT_0/C_{v_{\infty}}m$ – квадрат высокочастотной ($\omega \tau_V \gg 1$) скорости звука (совпадает со значением скорости звука в плазме без процессов нагрева и охлаждения); $c_0^2 = C_{p_0}k_BT_0/C_{v_0}m$ – квадрат низкочастотной ($\omega \tau_V \ll 1$) скорости звука, возникающий при наличии в среде теплового дисбаланса (скорость звука в данной среде становится частотно зависимой и изменяется в пределах между c_0 и c_{∞} ; см. [27, 17]); $c_a^2 = B_0^2/4\pi\rho_0$ - квадрат альфвеновской скорости; $C_{v_0} = k_BT_0Q_{0T}/mH_0$ – низкочастотная теплоемкость при постоянном объеме; $C_{p_0} = k_B(Q_{0T}T_0 - Q_{0\rho}\rho_0)/mH_0$ и $C_{p_{\infty}} = C_{v_{\infty}} + k_B/m$ – низко- и высокочастотные теплоемкости при постоянном давлении; $\tau_V = C_{v_{\infty}}/Q_{0T}$ – характерное время; $Q_{0T} = \partial Q/\partial T|_{\rho_0T_0}$, $Q_{0\rho} = \partial Q/\partial \rho|_{\rho_0T_0}$.

Из уравнения (2) видно, что альфвеновская волна индуцирует продольные движения плазмы, благодаря градиенту магнитного давления $B_x^2/8\pi$. В то же время уравнение (3) показывает, что это индуцированное движение воздействует на альфвеновскую волну. В результате такое взаимодействие ведет к медленному искажению профиля альфвеновской волны по мере ее распространения. Это искажение можно учесть, использовав метод медленно меняющегося профиля (см., например, [28]) т.е. перейдя к «медленному», времени $\tau = \alpha^2 t$ и сопутствующей системе координат $\xi = z - c_a t$. Применяя данный метод к уравнениям (2), (3) и отбрасывая слагаемые с порядком малости выше третьего, получим два укороченных уравнения:

$$\frac{\partial}{\partial\xi} \left(c_a \left(c_{\infty}^2 - c_a^2 \right) v_z + \frac{c_a^4}{2B_0^2} B_x^2 \right) + \frac{1}{\tau_v} \left(\left(c_a^2 - c_0^2 \right) v_z - \frac{c_a^3}{2B_0^2} B_x^2 \right) = 0, \qquad (4)$$

$$\frac{\partial B_x}{\partial \tau} + \frac{1}{2} \frac{\partial v_z B_x}{\partial \xi} - \frac{(\eta + \upsilon)}{2} \frac{\partial^2 B_x}{\partial \xi^2} - \frac{\eta \upsilon}{2c_a} \frac{\partial^3 B_x}{\partial \xi^3} = 0.$$
(5)

Полученная система (4), (5) укороченных уравнений описывает самовоздействие альфвеновских волн в диссипативной полностью ионизованной плазме в присутствии теплового дисбаланса.



Рис. 1. Эволюция профиля альфвеновской волны в плазме с тепловым дисбалансом и сравнение с плазмой без теплового дисбаланса для условий верхней хромосферы и температур а) 28000К, б) 29000К

3. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ СИСТЕМЫ УКОРОЧЕННЫХ УРАВНЕНИЙ

Чтобы проиллюстрировать влияние теплового дисбаланса на самовоздействие альфвеновских волн в условиях солнечной атмосферы, полученная система (4), (5) была решена численно для периодических граничных условий для следующих параметров верхней хромосферы: бета плазмы $\beta = 0.8$, концентрация частиц $n_0 = 10^{14} c M^{-3}$, температур $T_0 = 28000 K$ и $T_0 = 29000 K$ для периода альфвеновской волны $P_0 = 300 c$. При решении функция радиационных потерь была получена с помощью базы данных Chianti, а в качестве механизма нагрева был использован постоянный нагрев на единицу объема (см. [29, 30] для дополнительных деталей об алгоритме решения и используемых параметрах).

На рисунке 1 показаны результаты численного моделирования самовоздействия альфвеновских волн в плазме с тепловым дисбалансом для указанных выше параметров и сравнения полученных результатов со случаем плазмы без теплового дисбаланса. Из рисунка видно, что тепловой дисбаланс может приводить к быстрому укручению по направлению распространения волны (рисунок 1а) и быстрому укручению против распространения волны (рисунок 1б). Быстрое укручение альфвеновских волн приводит к более быстрой потере энергии волной и дальнейшему нагреву плазмы.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрено влияние теплового дисбаланса на самовоздействие альфвеновских волн в полностью ионизованной вязкой, конечно проводящей и теплопроводной плазме. Показано, что данное самовоздействие может быть описано системой укороченных уравнений. Из численного решения полученной системы для параметров верхней хромосферы следует, что в данных условиях тепловой дисбаланс может приводить к более быстрому укручению профиля альфвеновской волны по направлению распространения волны или против него. Подобное быстрое укручение может приводить к ускорению диссипации альфвеновских волн и нагреву плазмы.

Работа частично поддержана Министерством образования и науки РФ в рамках государственного задания вузам и научным организациям (проект FSSS-2020-0014) и поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-32-90018.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- H. Alfvén, Existence of Electromagnetic-Hydrodynamic Waves. // Nature, 1942, v. 150(3805), p. 405.
- 2. H. Alfvén, On the Existence of Electromagnetic-Hydrodynamic Waves. // Arkiv for Matematik, Astronomi och Fysik, v. 29B.
- 3. H. Alfvén, B. Lindblad, Granulation, magneto-hydrodynamic waves, and the heating of the solar corona. // MNRAS, 1947, v. 107(2), p. 211.
- 4. D.E. Osterbrock, The Heating of the Solar Chromosphere, Plages, and Corona by Magnetohydrodynamic Waves. // Astrophys. J., 1961, v. 134, p. 347.
- 5. J. Heyvaerts, E.R. Priest, Coronal heating by phase-mixed shear Alfven waves. // Astron. Astrophys., 1983, v. 117, p. 220.
- D.G. Wentzel, Coronal heating by Alfvén waves. // Solar Phys., 1974, v. 39(1), p. 129.
- D.G. Wentzel, Coronal heating by Alfvén waves. ii. // Solar Phys., 1976, v. 50(2), p. 343.
- G. Brodin, L. Stenflo, Three-wave coupling coefficients for mhd plasmas. // Journal of Plasma Physics, 1988, v. 39(2).
- J.V. Hollweg, S. Jackson, D. Galloway, Alfven Waves in the Solar Atmospheres

 Part Three Nonlinear Waves on Open Flux Tubes. // Solar Phys, 1982, v. 75(1-2), p. 35.

- G.C. Boynton, U. Torkelsson, Dissipation of non-linear Alfven waves. //A&A., 1996, v. 308, p. 299.
- 11. V.M. Nakariakov, L. Ofman, T.D. Arber, Nonlinear dissipative spherical Alfvén waves in solar coronal holes. // A&A., 2000, v. 353, p. 741.
- J. Zheng, Y. Chen, M. Yu, Nonlinear Alfvén wave propagating in ideal MHD plasmas. // Physica Scripta, 2015, v. 91(1), p. 015601
- S.D.T. Grant, et al., Alfvén wave dissipation in the solar chromosphere. // Nature Physics, 2018, v. 14(5), p. 480.
- 14. R.H. Cohen, R.M. Kulsrud, Nonlinear evolution of parallel-propagating hydromagnetic waves. // Physics of Fluids, 1974, v. 17, p. 2215.
- 15. E. Verwichte, V.M. Nakariakov, A.W. Longbottom, On the evolution of a nonlinear Alfvén pulse. // Journal of Plasma Physics, 1999, v. 62(2).
- V. Farahani, et al., Nonlinear evolution of torsional Alfvén waves. // A&A., 2012, v.544.
- D.I. Zavershinskii et al., Formation of quasi-periodic slow magnetoacoustic wave trains by the heating/cooling misbalance. // Physics of Plasmas, 2019, v.26(8), p. 082113.
- V.M. Nakariakov, B. Roberts, Solitary autowaves in magnetic flux tubes. // Physics Letters, 1999, v. A 254(6), p. 314.
- 19. R. Chin, et. al., Self-organization of magnetoacoustic waves in a thermally unstable environment. // Physics of Plasmas, 2010, v.17(3), p. 032107.
- 20. N.E. Molevich, et al., Traveling selfsustained structures in interstellar clouds with the isentropic instability. // Astrophys. Space Sci., 2011, v. 334, p. 35.
- 21. D.I. Zavershinsky, N.E. Molevich, A magnetoacoustic autowave pulse in a heatreleasing ionized gaseous medium. // Tech. Phys. Lett, 2013, v. 39(8), p. 676.
- 22. D.Y. Kolotkov, V.M. Nakariakov, D.I. Zavershinskii, Damping of slow magnetoacoustic oscillations by the misbalance between heating and cooling processes in the solar corona. // A&A., 2019, v. 628, p. A133.
- 23. D.I. Zavershinskiy, N.E. Molevich, Parametrical amplification of Alfvén waves in heat-releasing ionized media with magnetoacoustic instability. // Astrophys Space Sci., 2015, v. 358, p. 22.
- 24. S.A. Belov, N.E. Molevich, D.I. Zavershinskii, Amplification of Alfvén Waves due to Nonlinear Interaction with a Fast Magnetoacoustic Wave in Acoustically Active Conductive Media. // Tech. Phys. Lett., 2018, v. 44(3), p. 199.
- 25. S.A. Belov, N.E. Molevich, D.I. Zavershinskii, Alfvén Wave Amplification as a Result of Parametric Quasi-Resonant Interaction with Magnetoacoustic Waves

in Heat-Releasing Isentropically Unstable Plasma. // Russian Physics Journal, 2019, v.126.

- 26. S.A. Belov, N.E. Molevich, D.I. Zavershinskii, Propagation of nonlinear Alfvén waves in heat-releasing plasma. // Phys. Scr., 2019, v. 94(10), p. 105605.
- N.E. Molevich, A.N. Oraevskii, Second viscosity in thermodynamically nonequilibrium media. // Zh. Eksp. Teor. Fiz, 1988, v. 94, p. 128. [J. Exp. Theor. Phys. v. 67, p. 504 (1988)].
- 28. S.A. Akhmanov, REVIEWS OF TOPICAL PROBLEMS: Khokhlov's method in the theory of nonlinear waves. // Soviet Physics Uspekhi, 1986, v. 29(7), p. 589
- 29. С.А. Белов, Н.Е. Молевич, Д.И. Завершинский, Самовоздействие альфвеновских волн в плазме с тепловым дисбалансом // Изв. вузов. Радиофизика, 2020 [в печати].
- 30. S.A. Belov, N.E. Molevich, D.I. Zavershinskii, Thermal misbalance influence on the nonlinear shear Alfvén waves under the solar atmosphere conditions // Solar phys., 2020 [in press]

THERMAL MISBLANCE INFLUENCE ON NONLINEAR ALFVEN WAVES

S.A. Belov^{1,2}, N.E Molevich^{1,2}, D.I Zavershinskii^{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: vorontsoven@fian.smr.ru

It is shown that the self-interaction of Alfvén waves in a fully ionized viscous, finitely conducting and heat-conducting plasma with a thermal misbalance can be described by a system of shortened equations. The numerical solution of the obtained system for the parameters of the upper chromosphere shows that, under these conditions, the thermal misbalance can lead to a faster steepening of the Alfvén wave profile, which can lead to rapid heating of the plasma.

Keywords: Alfven waves, thermal misbalance, Sun.

НЭМ-ПЕРЕКЛЮЧАТЕЛЬ В МЕТОДЕ АССОЦИАТИВНЫХ АЛГЕБР

Белоусов Я.В.

Самарский национальный исследовательский университет им. Академика С.П. Королева, кафедра общей и теоретической физики (443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34) e-mail: evro120@yandex.ru

Использование механических переключателей в компьютерах - не новая концепция. В середине 1900-х годов их полностью сменили интегральные микросхемы. Однако современное развитие планарных технологий позволяет сегодня изготавливать миниатюрные реле и интегрировать их в чип. Важным достоинством интегральных схем является низкое энергопотребление в состоянии «покоя». Основной расход электроэнергии происходит в моменты переключения схем. В остальное время транзисторы закрыты, но через них протекают «нежелательные» токи утечки. Использование НЭМпереключателя позволяет избавиться от токов утечки.

1. ВВЕДЕНИЕ

Теоретические исследования НМС с каждым годом открывают ряд новых способов и методов изучения этого направления. Как пример, новое и мощное двухполюсное наноразмерное реле, которое является одним из наноэлектромеханических (HOM) переключателей. Работу такого переключателя можно описать в методе ассоциативных алгебр [1], который является максимально удобным методом для описания работы наноустройств баллистическом режиме. Экспериментально такие переключатели В экстремальных условиях, таких как исследование применяются В аэрокосмической обстановки и спасение от ядерных аварий, так как могут работать при сильных ядерных излучениях. НЭМ – переключатели все чаще стали использоваться в интегральных схемах. Современное развитие технологий сегодня изготавливать миниатюрные позволяет реле И интегрировать их в чип, что позволит уменьшить энергопотребление на переключателе из-за отсутствия токов утечки [2].

2. МОДЕЛЬ НЭМ-ПЕРЕКЛЮЧАТЕЛЯ В МЕТОДЕ АССОЦИАТИВНЫХ АЛГЕБР

К описанию работы НЭМ-переключателя в баллистическом режиме применим метод ассоциативных алгебр. Выберем систему координат так, чтобы ось ОҮ была направлена вдоль консоли НЭМ-переключателя (см. рисунок 1).



Рис. 1. Выбор системы координат

Дефект канала моделируется граничным условием в точке у = 0. Ширина канала значительно меньше его длины, поэтому в поперечном направлении в нашей модели частица движется в поле дельта-образного потенциала, построенного в методе ассоциативных алгебр. Ширина канала d определяет ширину волнового пакета (см. рисунок 2).



Рис. 2. Зависимость плотности вероятности от координаты х

Вне канала, в металличесих контактах (резервуарах) электроны описываются волновыми функциями вида:

$$\psi_1 = ae^{iky} + be^{-iky}, \quad y \le -\frac{L}{2}$$
$$\psi_2 = ce^{iky} + de^{-iky}, \quad y \ge \frac{L}{2}$$

где L – длина канала.

На границах канала (в точках у = ± L/2) волновая функция и ее первая производная остаются непрерывными. Условия непрерывности можно представить в матричной записи:

$$\begin{pmatrix} b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & t \\ t' & r' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ d \end{pmatrix}.$$

Коэффициент прохождения (прозрачность) $T = t \cdot t'$.

На рисунке 3 показана плотность распределения $|\psi(x, y)|^2$ носителей заряда в канале НЭМ-переключателя. На графике – состояние замкнутого переключателя, по которому течет ток.



Рис. 3. Плотность распределения носителей заряда в канале НЭМпереключателя, построенная в методе ассоциативных алгебр

3. РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТА ПРОХОЖДЕНИЯ

На рисунке 4 представлен результат расчета зависимости коэффициента прохождения Т от разности потенциалов между истоком и затвором для различных длин канала (без учета гистерезиса). Из графиков видно, что ступенчатая зависимость T(U) не реализуется для коротких каналов. Чем больше длина канала, тем ближе данная характеристика к ступенчатой функции.



Рис. 4. Зависимость коэффициента прохождения T(U) от разности потенциалов между истоком и затвором (без учета гистерезиса) для различных длин канала НЭМ-переключателя

Дополним расчет функции T(U) учетом явления гистерезиса. В работе [3] для решения аналогичной задачи авторы используют уравнение Фоккера-Планка для функции распределения Р:

$$\gamma \frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \theta} \left(P \frac{\partial U(\theta, V_G)}{\partial \theta} \right) + k_B T \frac{\partial^2 P}{\partial \theta^2}$$

Потенциал, входящий в данное уравнение, имеет вид:

$$U[\theta, V_G] = U_0(\theta) + U_{VDW}(\theta) + U_{dip}[\theta, V_G] + U_{cap}[\theta, V_G]$$

Здесь каждое слагаемой имеет определенный физический смысл и проиллюстрировано на рисунке 5.



Рис. 5. Схематическое изображение НЭМ-переключателя с указанием сил, действующих на консоль, и соответствующих потенциальных энергий [3]

Пороговое значение разности потенциалов между истоком и затвором, при котором консоль замыкает цепь, найдено из условия:

$$\frac{\partial U_0}{\partial x} = \left| \frac{\partial}{\partial x} \left(U_{dip} + U_{cap} \right) \right|, \qquad x = \theta L.$$

Пороговое значение разности потенциалов между истоком и затвором, при котором консоль размыкает цепь, в данной работе найдено из условия:

$$\frac{\partial U_0}{\partial x} = \left| \frac{\partial}{\partial x} \left(U_{dip} + U_{cap} + U_{VDW} \right) \right|, \qquad x = \theta L.$$

Результаты расчетов приведены на рисунке 6.



Рис. 6. Зависимость коэффициента прохождения Т от напряжения между истоком и затвором.

На рисунке 7 приведены графики, полученные в работе [3].



Рис. 7. Зависимость коэффициента прохождения от разности потенциалов [3]

Сравним графики на рисунках 6 и 7. Как видно, результат расчета, проведенного в выпускной работе, согласуется с результатом [3].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе метод ассоциативных алгебр применяется к описанию наномеханических систем. Построена модель трехтерминального наноэлектромеханического переключателя в S-матричном подходе в методе алгебр. Проведен расчет ассоциативных зависимости прозрачности (коэффициента прохождения) канала переключателя от длины канала и от потенциала затвора. В построенной модели показано наличие гистерезиса в работе НЭМ-переключателя. Результаты находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными и результатами расчетов в других моделях [3,4].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. «VIII Всероссийский молодежный самарский конкурс-конференция научных работ по оптике и лазерной физике», Сборник конкурсных докладов, Издательство «Самарский университет», 2010г, О.Ф. Кузнецова, стр. 83-89.
- 2. V. Pott, H. Kam, R. Nathanael, J. Jeon, E. Alon, and T.-J. K. Liu, "Mechanical computing redux: Relays for integrated circuit applications," Proceedings of the IEEE, 2012, vol. 98, no. 12, pp. 2076-2094.
- Unluer, D., Ghosh, A. W. (2016). Steep Subthreshold Switching With Nanomechanical FET Relays // IEEE Transactions on Electron Devices. – 2016. – V. 63, №4. - P. 1681–1688.
- 4. See Supplemental Material at: https://nano.stanford.edu/nanoelectronicdevices for Nanoelectronic Devices, supporting figures 1-2 and Videos 1.

РАМАНОВСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ КОЖИ ПАЦИЕНТОВ С ПОЧЕЧНОЙ НЕДОСТАТОЧНОСТЬЮ

<u>Л.А. Братченко¹</u>, И.А. Братченко¹

¹Самарский национальный исследовательский университет (443086, г. Самара, Московское шоссе, 34) e-mail: shamina94@inbox.ru

Целью данной работы является *in vivo* исследование спектральных характеристик кожи пациентов с почечной недостаточностью с помощью рамановской спектроскопии. Применение метода PLS-DA для анализа рамановских спектральных характеристик кожи 85 пожилых пациентов с почечной недостаточностью и 124 здоровых добровольцев позволило классифицировать исследуемых субъектов с чувствительностью 0,99 и специфичностью 0,99, а также выявить информативные спектральные полосы.

Ключевые слова: рамановская спектроскопия, кожа, почечная недостаточность, PLS-DA, VIP.

1. ВВЕДЕНИЕ

Почечная недостаточность приводит к нарушению водного, азотистого, электролитного балансов и другим нарушениям обмена веществ в организме человека [1]. Подобные изменения, а также различные физиологические и патологические характеристики внутренних органов тесно связаны с состоянием кожи и влияют на ее компонентный состав. [2]. Следовательно, анализ изменений в составе различных слоев кожи человека - одно из ведущих направлений терапевтических дисциплин. При исследовании компонентного состава кожи используются различные биохимические и иммунохимические методы лабораторных анализов. Однако эти методы инвазивны и требуют реагентов. Помимо применяемых дополнительных сегодня методов лабораторного анализа, для изучения компонентного состава кожи человека могут успешно применяться различные физические методы [3]. В конце XX начале XXI веков Caspers et al. опубликовал ряд работ, описывающих конфокальной рамановской применение спектроскопии для анализа молекулярного состава, структуры и профилей концентрации молекул в коже, которые нашли множество применений в фундаментальных и прикладных дерматологических исследованиях [4-7]. В настоящее время рамановская спектроскопия используется в анализе кожи для количественной оценки

содержания определенного компонента в коже [8], для анализа проникновения лекарств через кожу [9], для определения биофизических связей между колебательными характеристиками и конкретными композиционными и химическими изменениями, связанными со старением [10], и т.д. Возможности использования рамановской спектроскопии также включают анализ патологических изменений кожи. Например, Feng *et al.* предложили первую биофизическую модель рамановского рассеяния, примененную к данным скрининга рака кожи *in vivo* [11].

В настоящем исследовании изучаются спектральные характеристики рамановского рассеяния кожи человека при почечной недостаточности. Целью данной работы является оптический анализ кожи in vivo у гемодиализных пациентов с почечной недостаточностью помощью рамановской С области ближней инфракрасной спектроскопии В С последующим многомерным анализом полученных спектральных данных.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

2.1. Рамановская спектроскопия для анализа кожи

Исследование спектральных характеристик рамановского рассеяния кожи проводилось с использованием экспериментального стенда, представленном на рисунке 1. Регистрация спектров производилась в спектральном диапазоне 780 – 950 нм, время экспозиции составляло 20 секунд. Выходная мощность лазера составляла 150 мВт. Плотность мощности лазера на исследуемой коже составила 1,56 Вт/см², что не превышает максимально допустимого предела воздействия по ANSI 1,63 Вт/см². Собранный сигнал был разложен на спектр с помощью портативного спектрометра (QE65Pro, Ocean optics, Флорида, США).

2.3. Исследуемые образцы

Выполнен *in vivo* анализ кожи человека. Исследование проводилось на трех группах испытуемых: целевая группа, состоящая из 85 гемодиализных больных с почечной недостаточностью (серия 90 спектров), взрослая контрольная группа, состоящая из 40 здоровых добровольцев (80 спектров) без системных заболеваний, и молодая контрольная группа, состоящая из 84 здоровых добровольца (168 спектров) без системных заболеваний. Возрастной диапазон и средний возраст (в скобках) в исследуемых группах: 36-78 (61) в целевой группе, 36-77 (59) во взрослой контрольной группе, 18-25 (21) в молодой контрольной группе. Протоколы исследования *in vivo* одобрены

этическим комитетом Самарской областной клинической больницы имени В.Д. Середавина.



Рис. 1. Экспериментальный стенд: 1 – лазерный модуль LuxxMaster LML-785.0RB -04 (785 нм); 2,3 - оптоволокна; 4 – рамановский пробник RPB785, L1 и L2 – согласующая линза, L3 – фокусирующая линза; F1 – полосовой фильтр; F2 – широкополосный фильтр; DM – дихроичное зеркало; M1, M2, M3 - зеркала; 5 - образец; 6 –спектрометр Ocean optics QE65Pro, G – дифракционная решетка

Анализ экспериментальных данных выполнен отдельно ДЛЯ необработанных спектров («Full»), компонента автофлуоресценции («AF») и компонента рамановского рассеяния («Raman»). Для выделения из исходных спектров автофлуоресцентной составляющей и рамановского сигнала полученные исходные спектры обрабатывали полиномиальным методом [12]. Обработка экспериментальных данных проводилась с помощью дискриминантного анализа с проекцией на латентые структуры (PLS-DA). Полученные наборы данных (Full, AF, Raman) были подвергнуты многомерному анализу с целью построения следующих моделей:

• Группа молодых здоровых VS группа здоровых взрослых: дискриминация молодых здоровых добровольцев и взрослых здоровых добровольцев.

• Почечная недостаточность VS всей здоровой группы: выявление пациентов с почечной недостаточностью среди всех исследованных здоровых добровольцев.

Анализ экспериментальных данных выполнен с помощью регрессионного анализа. Определение информативных полос спектра при

построении регрессионной модели реализовано с помощью анализа pacпределения variable importance in projection (VIP). Многомерный анализ данных осуществлен с использованием mdatools package [13].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Ряд изменений кожи, возникающих при развитии патологии почек, таких кожи, сухость кожи, нефрогенный системный фиброз, как ксероз приобретенный перфорирующий дерматоз и накопление конечных продуктов гликирования, ассоциирован не только с почечной недостаточностью. Например, ксероз кожи является одним из наиболее частых основных симптомов многих дерматологических, внутренних и неврологических заболеваний, а накопление конечных продуктов гликирования характерно для курильщиков, пожилых людей, диабетиков. Возраст - один из важнейших факторов, влияющих на состояние кожи. Некоторые возрастные деструктивно-дегенеративные процессы в коже вызывают различные структурные и биохимические изменения. Поэтому первым этапом нашего исследования стал анализ специфичности выявления метаболических изменений кожи при почечной недостаточности в том случае, когда группа исследуемых лиц неоднородна по возрасту. С этой целью сначала была построена регрессионная модель дискриминации между молодой здоровой группой и взрослой здоровой группой. Специфичность, чувствительность и точность построенной регрессии представлены в таблице 1. Затем была построена регрессионная модель дискриминации группы пациентов с почечной недостаточностью и группы здоровых людей, включающая всех исследованных взрослых И молодых добровольцев. Характеристики построенной модели представлены в таблице 1.

Как видно из полученных результатов, точность выделения группы пациентов с почечной недостаточностью при анализе необработанного спектра ниже, чем при анализе отдельно автофлуоресцентной и рамановской составляющих. Следовательно, предварительная обработка необработанного спектра и разделение рамановской и автофлуоресцентной составляющих рекомендуется для минимизации шумового воздействия на рамановский сигнал и выявления пациентов с почечной недостаточностью при изучении спектральных характеристик кожи.

PLS-DA модель		Специфичность	Чувствительность	Точность
Группа	Full	0.91	0.99	0.96
молодых	AF	0.90	0.99	0.96
здоровых VS				
группа	Rama	0.93	0.99	0.97
здоровых	n			
пожилых				
Почечная	Full	0.71	0.96	0.89
недостаточно	AF	0.87	1.0	0.96
сть VS всей				
здоровой	Rama	0.99	1.0	0.99
группы	n			

Таблица 1. Характеристики построенных регрессионных моделей

На следующем этапе анализировалась рамановская составляющая. Следует отметить, что коэффициент корреляции между оценками VIP модели «почечная недостаточность VS вся здоровая группа» и оценками VIP модели «молодая здоровая группа VS взрослая здоровая группа» составил 0,033, значимая корреляция отсутствует. Следовательно, многомерный анализ рамановской компоненты спектра кожи специфичен для выявления спектральных особенностей, связанных с метаболическими изменениями в коже при почечной недостаточности, и возрастной фактор не оказывает значительного влияния на анализ. Кроме того, компонент рамановского рассеяния является наиболее информативным для выявления пациентов с почечной недостаточностью при многомерном анализе спектральных характеристик кожи. Точность, чувствительность и специфичность анализа рамановской составляющей достаточны для клинических условий.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В этой статье мы проанализировали возможность использования рамановской спектроскопии в анализе кожи, чтобы определить наличие почечной недостаточности. Более того, многомерный анализ рамановского компонента спектра кожи оказался специфичным для выявления спектральных особенностей, связанных с метаболическими изменениями в

коже при почечной недостаточности, в то время как возрастной фактор не оказывает значимого влияния на анализ. Следующим этапом нашего метаболических будет определение изменений, исследования соответствующих выявленным информативным рамановским полосам. В целом, проведенное исследование демонстрирует, что для анализа кожи in vivo обычная рамановская спектроскопия, реализуемая с помощью портативной установки, может обеспечить основу для экономичного скрининга и точного выявления почечной недостаточности. Более того, сочетание рамановской спектроскопии с другими оптическими методами в одном портативном устройстве позволяет расширить анализ и, в перспективе, позволит идентифицировать различные патологические состояния человеческого организма.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- A.D Slee, Exploring metabolic dysfunction in chronic kidney disease. // Nutr. Metab., 2012, v. 9, p. 36. DOI:10.1186/1743-7075-9-36
- A.G. Franks, Skin Manifestations of Internal Disease. // Med. Clin. N. Am., 2009, v. 93, p. 1265. DOI:10.1016/j.mcna.2009.08.010
- K. Cal, D. Zakowiecki, J. Stefanowska, Advanced tools for in vivo skin analysis. // Int. J. Dermatol., 2010, v. 49, p. 492. DOI:10.1111/j.1365-4632.2010.04355.x
- Peter J. Caspers, Hajo A. Bruining, Gerwin J. Puppels, Gerald W. Lucassen, Elizabeth A. Carter, In Vivo Confocal Raman Microspectroscopy of the Skin: Noninvasive Determination of Molecular Concentration Profiles. // J. Invest. Dermatol., 2001, v. 116, p. 434. DOI:10.1046/j.1523-1747.2001.01258.x
- P.J. Caspers, G.W. Lucassen, G.J. Puppels, Combined In Vivo Confocal Raman Spectroscopy and Confocal Microscopy of Human Skin. // Biophys. J., 2003, v. 85, p. 572. DOI:10.1016/S0006-3495(03)74501-9
- P.J. Caspers, G.W. Lucassen, R. Wolthuis, H.A. Bruining, G.J. Puppels, In vitro and in vivo Raman spectroscopy of human skin. // Biospectroscopy, 1998, v. 4(S5), p. S31. DOI:10.1002/(SICI)1520-6343(1998)4:5+<S31::AID-BSPY4>3.0.CO;2-M
- P.J. Caspers, G.W. Lucassen, H.A. Bruining, G.J. Puppels, Automated depthscanning confocal Raman microspectrometer for rapid in vivo determination of water concentration profiles in human skin. // J. Raman Spectrosc., 2000, v. 31(8-9), p. 813. DOI:10.1002/1097-4555(200008/09)31:8/9<813::AID-JRS573>3.0.CO;2-7

- L. Franzen, J. Anderski, M. Windbergs, Quantitative detection of caffeine in human skin by confocal Raman spectroscopy – A systematic in vitro validation study. // Eur. J. Pharm. Biopharm., 2015, v. 95, p. 110. DOI:10.1016/j.ejpb.2015.03.026
- N. Jung, B. Vukosavljevic, M. Windbergs, Raman Spectroscopy in Skin Research and Dermal Drug Delivery. // Book Chapter published in Confocal Raman Microscopy, 2018, p. 421. DOI: 10.1007/978-3-319-75380-5_17
- 10.G. Pezzotti, M. Boffelli, D. Miyamori, T. Uemura, Y. Marunaka, W. Zhu, H. Ikegaya, Raman spectroscopy of human skin: looking for a quantitative algorithm to reliably estimate human age. // J. Biomed. Opt., 2015, v. 20, p. 065008. DOI:10.1117/1.JBO.20.6.065008
- 11.X. Feng, A.J. Moy, H.T. M. Nguyen, J. Zhang, M.C. Fox, K.R. Sebastian, J.S. Reichenberg, M.K. Markey, J.W. Tunnell, Raman active components of skin cancer. // Biomed. Opt. Express, 2017, v. 8(6), p. 2835. DOI:10.1364/BOE.8.002835
- 12.J. Zhao, H. Lui, D.I. McLean, H. Zeng, Automated Autofluorescence Background Subtraction Algorithm for Biomedical Raman Spectroscopy. // Appl. Spectrosc., 2007, v. 61(11), p. 1225. DOI:10.1366/000370207782597003
- 13.S. Kucheryavskiy, "mdatools": Multivariate Data Analysis for Chemometrics, R Package Version (2019) 0.9.4

RAMAN SPECTROSCOPY OF THE SKIN OF PATIENTS WITH NEPHROLOGICAL DISEASES

L.A. Bratchenko¹, I.A. Bratchenko¹

¹Samara National Research University, (Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086) e-mail: shamina94@inbox.ru

The aim of this work is *in vivo* study of the skin spectral characteristics of patients with kidney failure by means of Raman spectroscopy. The utilizing the PLS-DA method for analyzing the Raman spectral characteristics of the skin of 85 elderly patients with kidney failure and 124 healthy volunteers made it possible to classify the studied subjects with a sensitivity of 0.99 and a specificity of 0.99, as well as to reveal informative spectral bands.

Keywords: Raman spectroscopy, skin, kidney failure, PLS-DA, VIP.

НЕЙРОСЕТЕВОЙ КЛАССИФИКАТОР ГИПЕРСПЕКТРАЛЬНЫХ СНИМКОВ КОЖНЫХ ПАТОЛОГИЙ

В.О. Винокуров¹, И.А. Матвеева¹, О.О. Мякинин¹

¹Самарский национальный исследовательский университет, (443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34) e-mail: HarisYork@outlook.com

В работе представлены результаты применения нейросетевого классификатора ДЛЯ анализа снимков злокачественных кожных новообразований, полученных с помощью гиперспектральной камеры. Исследована зависимость широты спектра включаемых в обучающий набор двумерных изображений на итоговую точность классификации образцов. Полученные результаты позволяют судить о значительных перспективах применения нейросетевых алгоритмов обработки гиперспектральных данных для классификации кожных патологий.

Ключевые слова: гиперспектральная визуализация, нейросетевой классификатор, меланин, гемоглобин, онкопатология, меланома, базальноклеточная карцинома.

1. ВВЕДЕНИЕ

Рак кожи является наиболее часто диагностируемой злокачественной опухолью [1]. Международное агентство по исследованию рака к 2025 году прогнозирует ежегодное увеличение выявления новых случаев до 19,3 миллионов, что почти на 30% выше показателя 2012 года (14,1 миллион) [1-2]. В России, за 2018 год, по данным Московского научно-исследовательского онкологического института имени П.А. Герцена, было выявлено 89958 злокачественных кожных патологии, а в США зафиксировано 104350 новых случая в течении 2019 года [3-4].

Хотя меланома встречается реже прочих злокачественных новообразований (3% от общего числа), за счёт высокой вероятности метастазирования, смертность от меланомы составляет, порядка 74% [5-6]. Среди немеланомных злокачественных новообразований, 75% составляет базальноклеточная карцинома – базалиома (ВСС) [7].

Первичным средством диагностики служит визуальный осмотр врачадерматолога, поскольку, обнаружение новообразований на раннем этапе существенно повышает выживаемость [8]. Поскольку, перерождение диспластичекого невуса в меланому происходит на клеточном уровне, отличить их *in situ* считается невозможным [9].

Наиболее полную клиническую картину даёт хирургическое вмешательство, предусматривающее забор образца новообразования и дальнейшее его гистологическое исследование специалистомпатомарфологом, не применяющееся из-за «агрессивного» поведения и высоких рисков метастазирования злокачественного новообразования [10-11].

Оптические как гиперспектральная методы диагностики, такие визуализация (HSI) позволяют исследовать как форму опухоли, так и её компонентный основываясь наборе состав, на пространственноупорядоченных спектральных сигналов, где каждая компонента соответствует электромагнитному взаимодействию света с анализируемым материалом в определенной части образца [12-13]. Данные HSI представляют собой гиперкуб, состоящий из двумерных изображений, построенных на основе значений, измеренных при определённых длинах волн [14].

Одна из последних работ в области обнаружения опухолей кожи по гиперспектральным данным, использует подход, описываемый как непараметрическая, многомерная оценка плотности вероятности [15]. Его точность метода составляет 80%, что позитивно стимулирует разработку новых подходов для оптической *in vivo* диагностики с применением HSI.

В данной работе рассматривается дифференцирование гиперспектральных изображений - меланомы, базальноклеточной карциномы и папилломы, с использованием нейросети, обученной на наборе данных специально собранных для проводимого исследования и расширяемом, по мере обработки данных. Действенность метода по определению типа злокачественного кожного новообразования, на основании двумерных изображений, экструдированных из HSI данных образца, была ранее доказана обработку Шерендак, реализовывавшей изображений вручную [16]. Результаты проведённого исследования позволяют судить о том, что даже без дополнительной обработки обучающей выборки и при малом количестве образцов, нейросетевому классификатору удаётся с высокой точностью производить дифференцирование злокачественных новообразований.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

2.1. Набор данных

Как показано в таблице 1, для формирования набора данных, собиралось несколько образцов для каждого из видов кожных аномалий. Таблица 1. Состав набора данных.

N⁰	Диагноз	Количество образцов	Количество изображений
1	Меланома	31	124
2	Папиллома	13	52
3	Базалиома	23	92

Извлечение двумерных изображений осуществляется с использованием встроенного ПО. Диапазон длин волн, изображения на которых использовались для обучения классификатора, выбирался исходя из: а) наибольшего поглощения гемоглобина и меланина – 600-606 нм; б) высокой контрастности изображений, облегчающей анализ геометрии объектов интереса.

С целью аугментации данных, производился поворот изображений на 90°, 180° и 270°. Итоговый набор насчитывал 268 изображения в формате .tif, с разрешением 1360 на 1024 пикселя.

2.2. Нейросетевой классификатор

В основе архитектуры нейросетевого классификатора лежит сеть VGG, принимающая на вход изображения RGB (224х224 px). По результатам предшествующих исследований, решено было остановиться на трёхблочной структуре VGG, представленной на рисунке 1.



Рис. 1. Структура нейросетевого классификатора

Тренировка нейросетевого классификатора, строящегося по представленной выше схеме, производилась на ноутбуке Huawei D15, укомплектованном процессором Ryzen 5 3500, 8 GB. Метрики, получаемые в процессе 20 эпох обучения (188 сек.) представлены на рисунке 2.



Рис. 2. Метрика точности валидации(слева) и потерь(справа)

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Точность классификации гиперспектральных изображений при разделении их на 3 класса и обучающем наборе данных, насчитывающих 194 изображения, составляет 84,6%. Традиционно, нейросетевые классификаторы, используемые для решения похожих задач, используют в качестве обучающей выборки в десятки раз большие объёмы данных, что наталкивает на предположение высокой эффективности выбранного 0 алгоритма И наглядности используемых для обучения данных.

Предложенный механизм обучения нейросети и формирования набора обучающих данных нуждается в оптимизации и доработке, однако,

полученные результаты говорят о существовании потенциала дальнейшего развития. Благодаря унификации разрабатываемого алгоритма подготовки обучающего набора, расширение списка классов, которыми может оперировать нейросеть, не представляет сложности и заключается лишь в получении гиперспектральных изображений нескольких образцов новообразований кожи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. P. Boyle, D. Parkin, World cancer report 2008 // Lyon: International Agency for Research on Cancer, 2008, 511 p.
- R. Siegel, D. Naishadham, A. Jemal, Cancer statistics, 2012 // J. Cancer, 2012, v. 62, p. 10-29.
- R.L. Siegel, K.D. Miller, A. Jemal, Cancer statistics, 2019 // J. Cancer, 2019, v. 69, p. 8-10.
- А.Д. Каприн, В.В. Старинский, Г.В. Петрова, Злокачественные новообразования в России в 2018 году (заболеваемость и смертность). // М.: МНИОИ им. П.А. Герцена – филиал ФГБУ «НМИРЦ» Минздрава России, 2019. 250 с.
- 5. V.L.D. Almeida, A. Leitao, L.D.C.B. Reina, Câncer e agentes antineoplásicos ciclo-celular específicos e ciclo-celular nãoespecíficos que interagem com o dna: uma introdução // Quim., 2005, v. 28, p. 118-129.
- G.C. Carvalho, F. Alves, Principais marcadores moleculares para os canceresdepele e mama // NBC-Periodico Científico do Nucleo de Biociencias., 2014, v. 4, p. 11-17.
- L.C. Figueiredo, L.N. Cordeiro, A.P. Arruda, Cancer de pele: estudo dos principais marcadores molecularesdo melanoma cutaneo // Rev Bras de Cancerologia, 2003, v. 49, p. 179-183.
- 8. И.А. Братченко, М.В. Алонова, О.О. Мякинин, А.А. Морятов, Гиперспектральная визуализация патологий кожи в видимой области // Компьютерная оптика, 2016, т. 40, № 2, с. 240-248.
- W.H. Clark, R.R. Reimer, M. Greene, Origin of Familial Malignant Melanomas from Heritable Melanocytic Lesions. The B-K mole Syndrom // Archives of Dermatology, 1978, v. 114, p. 732-739.
- 10.D.E. Elder, J. Leonardi, J. Goldman, Displastic nevus syndrome. A pfenotypic association of sporadic cutaneous melanoma // J. Cancer, 1980, v. 46, p. 1787-1794.

- 11.О.А. Романова, Н.Г. Артемьева, М.Г. Солохина, Клинический случай крупного прогрессирующего диспластического невуса с переходом в меланому // Клиническая дерматология и венерология, 2018, № 17, с. 34-37.
- 12.P.E. Gross, K. Strasser-Weippl, BL. LeeBychkovsky, Challenges to effective cancer control in China, India, and Russia // The Lancet Oncology, 2014, v. 15, p. 489-538.
- 13.P. Carli, V. De Giorgi, H. Soyer, Dermatoscopy in the diagnosis of pigmented skin lesions: a new semiology for the dermatologist // J. Eur. Acad. Dermatol. Venereol., 2000, v. 14, p. 353-369.
- 14.L. Lim, B. Nichols, M. Migden, Clinical study of noninvasive in vivo melanoma and nonmelanoma skin cancers using multimodal spectral diagnosis // Journal of Biomedical Optics, 2014, v. 19.
- 15.B. Pan, Z. Shi, X. Xu, R-VCANet: a new deep-learning-based hyperspectral image classification method // IEEE J. Sel. Top. Appl. Earth Obs. Remote Sens., 2017, v. 10, p. 1975–1986.
- 16.В.П. Шерендак, И.А. Братченко, О.О. Мякинин, П.Н. Вольхин, Ю.А. Христофорова, Гиперспектральный in vivo анализ хромофоров нормальной кожи и визуализация онкологических патологий // Компьютерная оптика., 2019, т. 43, № 4, с. 661-670.

NEURAL NETWORK CLASSIFIER FOR HYPERSPECTRAL SKIN PATHOLOGIES

V.O. Vinokurov¹, I.A Matveeva¹, O.O. Myakinin¹

¹Samara National Research University, (Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086) e-mail: HarisYork@outlook.com

The paper presents the results of using a neural network classifier to analyze images of malignant skin lesions obtained using a hyperspectral camera. The dependence of the spectrum latitude of the two-dimensional images included in the training set on the final classification accuracy of the samples was investigated. The results obtained make it possible to judge the significant prospects for the use of neural network algorithms for processing hyperspectral data for the classification of skin pathologies.

Keywords: hyperspectral imaging, neural network classifier, melanin, hemoglobin, oncopathology, melanoma, basal cell carcinoma.

ИК-СПЕКРОСКОПИЯ БИОМАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ

К.А. Ганичкина¹, Д.Р. Суюндукова¹, Н.В. Латухина¹

¹Самарский национальный исследовательский университет имени С.П. Королева, кафедра физики твёрдого тела и неравновесных систем (443086, г. Самара, Московское шоссе, 34) e-mail: ganichkina.k@mail.ru natalat@yandex.ru

Было проведено исследование поверхностей, сколов, порошков и коллоидных растворов пористого кремния и нанокомпозитов ПК+ГАП, ПК+глюкоза методами ИК-спектроскопии. Исследования проводились на ФСМ 2201 с помощью приставки диффузного отражения.

Ключевые слова: пористый кремний (ПК, por-Si), кремний (К), глюкоза, гидроксиаппатит (ГАП), нанокомпозит, биосенсор, остеопластика.

1. ВВЕДЕНИЕ

Одним из перспективных наноматериалов биомедицинского направления для разнообразных применений является пористый кремний, который представляет собой систему нанокристаллов различных размеров и формы, а также нанокомпозиты пористого кремния с различными биологическими и неорганическими веществами [1].

Характерной чертой пористого кремния является большая суммарная площадь его внутренней поверхности. В зависимости от величины пористости и геометрии пор она может составлять для макропористого кремния от 10 до 100 м²/см³. Наличие развитой химически активной поверхности определяет возможность использования пористого кремния в качестве чувствительного элемента биосенсоров и подложки для роста различных биологических тканей, от кожной и костной до ткани мозга [2]. Показаны преимущества использования ПК в материалах на основе полимеров для остеопластики. ПК, насыщенный ГАП, может служить основой для создания транспортных частиц для доставки гидроксиаппатита к пораженным участкам кости при каких-либо травмах или заболеваниях, например, остеопорозе [3]. При этом важно, чтобы при насыщении пор ГАП на происходило химического взаимодействия веществ с образованием нежелательных нерастворимых в крови соединений типа силикатов или силицидов, поскольку это ухудшит растворение

транспортных частиц и уменьшит долю полезного «строительного материала». В связи с этим исследование ИК – спектров нанокомпозита ПК+ГАП приобретает особое значение.

Перспективно направление использования ΠК как материала чувствительного элемента биосенсора, сочетающего все необходимые качества. При относительной простоте изготовления и доступности исходного материала (кремний — один из самых распространенных элементов земной обладает высокой адсорбционной способностью коры) OH И чувствительностью по отношению к биологическим и органическим молекулам. Принцип действия таких датчиков основан на влиянии внешних молекул на электронное состояние поверхности. В случае пористого кремния за счет высокой удельной поверхности это влияние становится очень эффективным и сенсоры обладают высокой чувствительностью[4]. В данной работе исследовалась возможность использования пористого кремния как материала биосенсора глюкозы. Исследовалось изменение электрических и оптических свойств ПК при насыщении пор водными растворами глюкозы различной концентрации, а также растворами глюкозы в слезной жидкости и в физ.растворе NaCl (9%).

2. МЕТОДЫ СОЗДАНИЯ И ИССЛЕДОВАНИЯ НАНОКОМПОЗИТОВ С ПК

2.1. Создание образцов и нанокомпозитов

Для получения образцов пористого кремния использовался метод горизонтального электрохимического травления. Использовались пластины с тремя различными типами поверхности: шлифованной, текстурированной и Травление проводилось в водно-спиртовых растворах полированной. плавиковой кислоты в течение 20-30-минут при плотности анодного тока 10 мА/см². При таких режимах травление по глубине идет достаточно равномерно, образуя систему вертикальных параллельных пор глубиной в десятки микрометров. Для создания нанокомпозитов использовался порошок глюкозы ($C_6H_{12}O_6$), а также порошок гидрокспианатита (ГАП). Порошок ГАП получали путем осаждения минерального компонента кости ИЗ деминерализующего раствора. Осаждение ГАП на подложку проводилось из суспензии порошка ГАП в этиловом спирте или воде. Время осаждения составляло 30 минут до полного высыхания образца. Порошок нанокомпозита изготавливался путем механического отделения слоя пористого кремния от

подложки и его измельчением. На основе порошков пористого кремния и нанокомпозита ПК + ГАП были изготовлены коллоидные водные растворы, измерение их ИК спектров проводилось через полгода после их изготовления.

2.2. Метод ИК-спектроскопии

Инфракрасная (ИК) спектроскопия является одним основных методов органических соединений. Современная ИК-спектроскопия анализа представляет собой экспресс-метод установления структурных особенностей органических соединений. С помощью ИК-спектроскопии быстро и надёжно идентифицируются разнообразные функциональные группы: карбонильная, гидроксильная, карбоксильная, амидная, амино, циано и др.; а также различные непредельные фрагменты: двойные и тройные углерод углеродные связи, ароматические или гетероароматические системы. Методами ИКспектроскопии изучают внутри- и межмолекулярные взаимодействия, например, образование водородных связей. В химии древесины и химии природных соединений с помощью ИК-спектроскопии исследуют структуры углеводов, лигнинов, аминокислот, терпенов, стероидов и многих других веществ.

Для того чтобы исследовать состав нанокомпозита был использован метод ИК-спектроскопии. С помощью метода ИК-спектроскопии можно выяснить химическое строение молекул различных органических веществ, а также выявить примеси в изучаемом образце. Качественный анализ позволяет судить о природе вещества, а количестве вещества - количественный анализ[5].

Данная работа заключалась в проведении качественного анализа ИКспектров. ИК-спектры были сняты на ФСМ 2201 с помощью приставки диффузного отражения. Для измерения ИК-спектров растворы наносились непосредственно на подложку кремния или на пористый слой, созданный на ее поверхности.

3. АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

Для анализа методом ИК-спектроскопии для нанокомпозита NaCl (9%)+глюкоза (различной концентрации) и глюкоза (различной концентрации)+Слезин выбраны пластинки текстурированной поверхности: К и Р.

На рисунках представлены сравнительные ИК-спектры, измеренные на спектрометре ФСМ-2201, для глюкозы, контрольного образца пластинки,

образцов с 3%, 6% и 12% растворов глюкозы в слезе на пористом кремнии (Рис.1) и ИК-спектры образцов нанокомпозитов ПК+3%, 6%, 12% растворов глюкозы+9% раствор NaCl (Рис. 2).



Рис. 1. (а) ИК - спектры для К-пластинки с текстурированной поверхностью и для пластинки с добавлением 3% раствора глюкозы+слеза; (б) ИК - спектры для К-пластинки с текстурированной поверхностью и для пластинки с добавлением 6% раствора глюкозы+слеза; (в) ИК - спектры для К-пластинки с текстурированной поверхностью и для пластинки с добавлением 12% раствора глюкозы+слеза; (г) ИК - спектры для К-пластинки с текстурированной поверхностью и для пластинок с добавлением глюкозы разной концентрации+слеза (общий график)

Расшифровываем ИК-спектр с области от 2500 нм до 4000 нм. В спектрах в этой области находятся два сильных пика, отражающих два типа связей между атомом водорода и углерода, водорода и кислорода, в виде валентных колебаний атомов Н–С и Н–О.

На 3500 наблюдаются кремнийорганические соединения Si-H. Наличие С-Н связей в спектре глюкозы обусловлено наличием полосы пропускания 3085 нм. Полосы, отвечающие за наличие в глюкозе валентных колебаний О-Н: 3085 нм, 3500 нм.



Рис. 2 (а) ИК - спектры для P-пластинки кремния с текстурированной поверхностью (контрольный образец), кремний + глюкоза(3%) + NaCl(9%), кремний + глюкоза(6%) + NaCl(9%), кремний + глюкоза(12%) + NaCl(9%). (б) ИК - спектры для P-пластинки пористого кремния с текстурированной поверхностью (контрольный образец), пористый кремний + глюкоза(3%) + NaCl(9%), пористый кремний + глюкоза(6%) + NaCl(9%), пористый кремний + глюкоза(12%) + NaCl(9%)

По рисункам видно, что благодаря наличию глюкозы и NaCl возникают новые полосы пропускания. Чем больше концентрация глюкозы, тем больше возникают новые пики. Отчетливо заметно появление на 4000 нм, 4700 нм, и на 3200 нм.

Для кремния возникновение новых полос на 3050 нм и 3500 нм.
Однако количественную оценку содержания глюкозы в растворе по ИКспектрам сделать сложно, явной зависимости коэффициента пропускания от содержания глюкозы в растворе не прослеживается.

Для разработки материала на основе ПК для использования в биосенсоре глюкозы, более подходящим методом оказывается электрический, где зависимость электрического сопротивления пористого кремния от содержания глюкозы в порах выражена более явно [6].

На рис. 3 приведены ИК-спектры коллоидных растворов ПК и нанокомпозита ПК с ГАП, суспензии ГАП в воде и порошка ГАП, нанесенных на кремниевую пластинку.



Рис. 3. ИК - спектры коллоидных растворов, нанесенных на пластинки кремния: порошок(1) и водная суспензия(2) ГАП на кремнии, коллоидные растворы ПК (3) и нанокомпозита ПК с ГАП(4) на кремнии

Анализ спектров показывает, что все они содержат ряд идентично расположенных пиков, обусловленных, по-видимому влиянием одинаковой для всех образцов кремниевой подложки. Но есть и некоторые важные особенности. На спектрах коллоидных растворов ПК и ПК с ГАП практически не видны некоторые пики, характерные для ПК, например, полоса поглощения 3316 см⁻¹, соответствующая колебаниям О-Н группы или в области 900 - 1000 см⁻¹, обычно отчетливо видимые на спектрах ПК [7]. Это косвенно подтверждает установленный экспериментально факт растворимости наночастиц пористого кремния в воде [8]. Из этого факта следует вывод о перспективности использования наночастиц ПК как био-вектора для доставки ГАП к пораженным участкам кости. В то же время никаких новых полос поглощения по сравнению со спектрами отдельно взятых пористого кремния и гидроксиаппатита в спектре коллоидного раствора нанокомпозита не появляется, поэтому можно сделать вывод, что химического взаимодействия между ними не происходит.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Метод ИК-спектроскопии выявил, что химического взаимодействия между веществами гидроксиапатита и пористого кремния не происходит. На ИК-спектрах всех образцов ПК с ГАП присутствуют только пики, соответствующие связям в ПК или ГАП. Исследование ИК спектроскопией нанокомпозитов ПК+глюкоза показывает, что наличие глюкозы в порах заметно изменяет спектры пропускания образцов. Отсюда можно сделать общий вывод, что пористый кремний является перспективным материалом для создания биосенсора глюкозы и полученные образцы коллоидных растворов ПК + ГАП пригодны для изготовления биоматериала для костных имплантатов и лекарственных препаратов для лечения остеопороза.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ксенофонтова О. И. и др. Пористый кремний и его применение в биологии и медицине / О.И. Ксенофонтова//Журнал технической физики. - 2014. - Т. 84. - №.1. - С. 67-78.

2. Fan D., Akkaraju G.R., Couch E.F. et al. // Nanoscale, 2011, 10; 354-61

3. Nielsen, F.H. «Ultratrace elements of possible importance for human health: An update». Essential and Toxic Trace Elements in Human Health and Disease: An Update: 355-76. New York: Wiley-Liss, 1993;

4. Базаев Н. А., Маслобоев Ю. П., Селищев С. В. Оптические методы неинвазивного определения уровня глюкозы в крови /Н.А. Базаев //Медицинская техника. – 2011. – №. 6. – С. 270

5. Васильев А. В. и др. Инфракрасная спектроскопия органических и природных соединений //СПб.: СПбГЛТА. – 2007. – С. 54-72.

6. Ganichkina K.A., Latukhina N.V.: Electrical Properties of Porous Silicon as a Biosensor Material //Journal of Biomedical Photonics & Engineering VOL 6, NO 1 (2020) DOI: 10.18287/JBPE20.06.010306

7. Берлова Е.В., Жукова В.А., Латухина Н.В., Писаренко Г.А. Спектральные исследования нанокомпозитов на основе пористого кремния //Вестник Самарского государственного университета. 2013. № 3 (104). С. 75-84

8. Алыкова А.Ф. Оптические методы диагностики наночастиц кремния для применения в биомедицине// Сборник трудов XVI Всероссийского молодежного Самарского конкурса – конференции научных работ по оптике и лазерной физике 13-17 ноября 2018 года. Москва 2018г. С.41 - 49

INFRARED SPECTROSCOPY OF BIOMATERIALS BASED ON POROUS SILICON

K.A. Ganichkina¹, D.R. Suyundukova¹, N.V. Latukhina¹

Samara National Research University named after S.P. Koroleva department of Solid State Physics and Nonequilibrium Systems (34, Moskovskoe shosse, Samara, 443086) e-mail: ganichkina.k@mail.ru, natalat@yandex.ru

The study of surfaces, chips, powders and colloidal solutions of porous silicon and nanocomposites PC + HAP, PC + glucose was carried out by IR spectroscopy. The studies were carried out on an FSM 2201 using a diffuse reflection attachment.

Key words: porous silicon (PC, por-Si), silicon (K), glucose, hydroxyapatite (HAP), nanocomposite, biosensor, osteoplasty.

ВЛИЯНИЕ АТОМНОЙ КОГЕРЕНТНОСТИ НА ДИНАМИКУ ПЕРЕПУТЫВАНИЯ КУБИТОВ В РЕЗОНАТОРЕ БЕЗ ПОТЕРЬ

М.О. Гуслянникова¹, З.В. Кусаева¹, Е.К. Башкиров¹

¹Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева (443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34) e-mail: bash@ssau.ru

В настоящей работе мы исследовали динамику перепутывания двух дипольно связанных естественных или искусственных двухуровневых атомов (кубитов), нерезонансно взаимодействующих с интенсивным одномодовым тепловым полем резонатора при наличии начальной когерентности состояний кубитов. Результаты исследований показали, что наличие начальной атомной когерентности приводит к существенному уменьшению максимальной степени перепутывания кубитов в случае нерезонансного взаимодействия кубитов с полем, в отличие от модели с резонансным взаимодействием между кубитами и полем.

Ключевые слова: идентичные двухуровневые атомы, расстройка, диполь-дипольное взаимодействие, тепловое поле, атомная когерентность, перепутывание атомов, управление перепутыванием

1. ВВЕДЕНИЕ

В ряду наиболее актуальных задач современной физики квантовых вычислений являтся описание динамики кубитов, взаимодействующих с электромагнитными полями [1]. Такие системы активно изучаются как с теоретической, так и с экспериментальной точек зрения в одноатомных И лазерах, ионах в резонаторах И магнитных мазерах ловушках, сверхпроводящих системах на джозефсоновских переходах, квантовых точках [2]. Исследования таких физических систем позволили создать прообразы квантовых компьютеров, работающих пока на десятках кубитах. Развитие в данной области заключается в поиске наиболее оптимальных режимов работы новых физических устройств, которые можно использовать в качестве логических элементов квантовых компьютеров, в том числе наиболее эффективных схем генерации и контроля перепутывания состояний кубитов, а также особенностей их релаксации. Для приложений в физике квантовых вычислений нужны максимально перепутанные чистые состояния с

76

достаточно большим временем жизни, однако в реальных условиях квантовые системы всегда взаимодействуют с окружением. Такое взаимодействие обычно приводит к декогерентности, так что исследуемая система эволюционирует в смешанное неперепутанное (сепарабельное) состояние, которое оказывается непригодным для целей квантовых вычислений. Основная задача при получении и использовании атомных перепутанных состояний заключается в минимизировании влияния шума. В некоторых случаях диссипация и шум могут, напротив, являться источником перепутывания. В частности, была показана возможность генерации перепутывания атомных систем в резонаторах, индуцированных тепловым шумом [3-6].

Одномодовый тепловой шум может индуцировать атом-атомное перепутывание в системе двух двухуровневых атомов видеальном резонаторе [3]. Позднее аналогичное поведение было обнаружено и для атомов с [4]. Также многофотонными переходами было выявлено,что при взаимодействии двухфотонном атомов с тепловым полем степень перепутывания атомных состояний может значительно превосходить соответствующую величину для однофотонного взаимодействия. В дальнейших исследованиях было показано, что степень перепутывания атомов сильно зависит от их начального состояния [5]. При наличии атомной когерентности степень атомного перепутывания может заметно возрастать. Было также показано, что степенью атомного перепутывания можно управлять, изменяя относительные фазы и амплитуды поляризованных атомов. Кроме того определено, ЧТО наличие диполь-дипольного взаимодействия кубитов может существенно увеличить степень ИХ перепутывания [6, 7].

В данной работе мы исследуем влияние начальной атомной когерентности и диполь-дипольного взаимодействия на перепутывание двух кубитов, нерезонансно взаимодействующих с тепловым полем резонатора.

2. МОДЕЛЬ И ЕЕ ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ

Возьмем два идентичных кубита (ридберговские атомы, сверхппроводящие кубиты с джозефсоновскими переходами, примесные атомные или ядернве спины, квантовые точки и т.д.) с частотой перехода ω_0 , нерезонансно взаимодействующих с выделенной модой электромагнитного поля идеального резонатора с частотой ω . Учтем также прямое дипольдипольное взаимодействие между кубитами. Тогда в системе отсчета,

77

вращающейся с частотой моды поля ω гамильтониан такой системы можно представить в виде:

$$H = \hbar \delta \sigma_1^z + \hbar \delta \sigma_2^z + \hbar g \sum_{i=1,2} (\sigma_i^+ a + a^+ \sigma_i^-) + \hbar J (\sigma_1^+ \sigma_2^- + \sigma_1^- \sigma_2^+).$$
(1)

где σ_i^z – оператор инверсии для i (i = 1, 2), $\sigma_i^+ = |+\rangle_{ii} \langle -|$ и $\sigma_i^- = |-\rangle_{ii} \langle +|$ – операторы перехода между возбужденным $|+\rangle_i$ и невозбужденным $|-\rangle_i$ состояниями i-го кубита (i=1,2), a^+ и a – операторы рождения и уничтожения фотонов резонаторной моды, g – константа кубит-фотонного взаимодействия, δ – параметр расстройки, равный $\delta = \omega_0 - \omega$ и J – параметр прямого дипольдипольного взаимодействия кубитов.

В качестве начальных состояний атомов выберем когерентные состояниях вида

$$|\Psi_1(0)\rangle = \cos\theta_1 |+\rangle + \sin\theta_1 |-\rangle,$$

$$|\Psi_{2}(0)\rangle = \cos\theta_{2}|+\rangle + \sin\theta_{2}|-\rangle,$$

 $\theta_1 \, \mathrm{u} \, \theta_2 - \mathrm{параметры}, \, \mathrm{определяющие} \, \mathrm{начальную} \, \mathrm{поляризацию} \, \mathrm{кубитов}. \, \mathrm{B}$ качестве начального состояния поля резонатора выберем одномодовое тепловое состояние $\rho_F(0) = \sum p_n |n\rangle \langle n|.$

Здесь $p_n = \overline{n}^n (1+\overline{n})^{n+1}$, где \overline{n} – среднее число тепловых фотонов в резонаторной моде, определяеямое формулой Бозе-Эйнштейна $\overline{n} = (exp[\hbar\omega_i / k_B T] - 1)^{-1}, k_B -$ постоянная Больцмана, T – температура резонатора.

Найдем точную динамику представленной модели. Начнем исследование для случая, когда резонаторное поле приготовлено в состоянии с определенным числом фотонов, а затем обобщим полученные результаты на случай теплового поля резонатора. Для фоковского состояния поля и чистых начальных состояний атомов состояние всей системы определяется во все последующие моменты времени волновой функций. Решение временного уравнения Шредингера для рассматриваемых начальных состояний можно представить в виде разложения по собственным функциям гамильтниана (1) (представление "одетых состояния"). Пусть число элементарных возбуждений в системе с гамильтонианом (1) есть $n (n \ge 0)$. Тогда собственные функции гамильтониана (1) в базисе $|-,-,n+2\rangle$, $|+,-,n+1\rangle$, $|-,+,n+1\rangle$, $|+,+,n\rangle$ могут быть представлены в виде

$$|\Psi_{in}\rangle = w_{in}(X_{i1n} | -, -, n+2\rangle + X_{i2n} | +, -, n+1\rangle + X_{i3n} | -, +, n+1\rangle + X_{i4n} | +, +, n\rangle), \quad (2)$$

где $w_{in} = 1/\sqrt{|X_{i1n}|^2 + |X_{i2n}|^2 + |X_{i3n}|^2 + |X_{i4n}|^2}.$

Явный вид коэффициентов X_{iin} не приведен ввиду их громозкого вида.

Для рассматриваемой модели с гамильтонианом (1) нам удалось найти точное решение уравнения Шредингера для волновой функции в представлении одетых состояний (2). Используя полученное выражение, мы можем найти явный вид матрицы плотности полной системы $\rho_{Fock}(t) = |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)|$. Используя выражение для матрицы плотности в случае фоковского начального состояния поля, легко получить явный вид матрицы плотности полной системы для теплового поля $\rho_{Thermal}(t)$. Выполняя усреднение полной матрицы плотности по переменным резонаторного поля, мы можем получить редуцированную матрицу плотности подсистемы кубитов $\rho_A(t) = Tr_F \rho_{Thermal}(t)$. Наконец, атомная матрица плотности может быть использована для вычисления параметра перепутывания кубитов.

3. ВЫЧИСЛЕНИЕ ПАРАМЕТРА ПЕРЕПУТЫВАНИЯ КУБИТОВ

В качестве параметра перепутывания кубитов мы воспользуемся параметром Переса-Хородецких или отрицательностью, которая может быть представлена в терминах отрицательных собственных значений μ_i^- частично транспонированной по переменным одного кубита атомной матрицы плотности $(\rho_A^{T_1})$

$$\varepsilon = -2\sum_{i}\mu_{i}^{-}.$$
 (3)

Значения параметра (3), удовлетворяющие неравенству $\varepsilon > 0$, соответствуют перепутанному состоянию кубитов, в то время как значение $\varepsilon = 0$ соответствует сепарабельным состояниям кубитов.

Для когерентных сепарабельных начальных состояний кубитов частично транспонированная по переменным одного кубита атомная матрица плотности $\rho_A^{T_1}(t)$ в двукубитном базисе $|-,-\rangle$, $|+,-\rangle$, $|-,+\rangle$, $|+,+\rangle$ имеет вид

$$\rho_{A}^{T_{1}}(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13}^{*} & \rho_{23}^{*} \\ \rho_{12}^{*} & \rho_{22} & \rho_{14}^{*} & \rho_{24}^{*} \\ \rho_{13} & \rho_{14} & \rho_{33} & \rho_{34} \\ \rho_{23} & \rho_{24} & \rho_{34}^{*} & \rho_{44} \end{pmatrix} ..$$

$$(4)$$

Все четыре собственных значения матрицы (4) могут принимать отрицательные значения, поэтому вносят вклад в отрицательность. Матричные элементы (4) и её собственные значения имею чрезвычайно громозкий вид и поэтому не приводятся в настоящей статье.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ОТРИЦАТЕЛЬНОСТИ

Результаты численного моделирования временной зависимости параметра перепутывания кубитов приведены на Рис. 1 для моделей с резонансным и нерезонансным кубит-полевым взаимодействие в случае интенсивного теплового поля резонатора.

На рис. 1(а) представлена отрицательность как функция безрамерного времени gt для модели с резонансным взаимодействие между кубитами и полем в присутствии диполь диполь-дипольного взаимодействия кубитов. При этом сплошная кривая соответствует когерентному начальному состоянию кубитов вида $|\Psi_1(0)\rangle = (1/\sqrt{2})(|+\rangle_1 + |-\rangle_1), |\Psi_2(0)\rangle = (1/\sqrt{2})(||+\rangle_2 - |-\rangle_2), a$ пунктирная – сепарабельному состоянию кубитов $|\Psi_1(0)\rangle = |+\rangle_1$, $|\Psi_2(0)\rangle = |-\rangle_2$. Из рисунка 1 хорошо видно, что в случае резонансного взаимодействия кубитов с полем резонатора наличие начальной атомной когерентности для определенных амплитуд поляризованных атомов приводит к существенному возрастанию максимальной степени перепутывания. На рис. 1(б) представлена отрицательность как функция безрамерного времени gt для модели с нерезонансным взаимодействие между кубитами и полем в отсутствие дипольдипольного взаимодействия кубитов. При этом как и для предыдущего рисунка сплошная кривая соответствует когерентному начальному состоянию кубитов $|\Psi_1(0)\rangle = (1/\sqrt{2})(|+\rangle_1 + |-\rangle_1), |\Psi_2(0)\rangle = (1/\sqrt{2})(|+\rangle_2 - |-\rangle_2), a$ пунктирная – состоянию $|\Psi_1(0)\rangle = |+\rangle_1, |\Psi_2(0)\rangle = |-\rangle_2.$ сепарабельному В случае нерезонансного атом-полевого взаимодействия характер зависимости степени кубитов перепутывания ОТ начальной когерентности меняется на Для нерезонансного противоположный. взаимодействия максимальная степень перепутывания кубитов для сепарабельного состояния превышает соответствующую величину для когерентного состояния. Можно отметить еще одну интересную особенность в поведении отрицательности в случае нерезонансного взаимодействия. В этом случае осцилляции отрицательности затухают, и на больших временах обращаются в ноль (т.е. за счет расстройки нелокальные квантовые корреляции кубитов исчезают, несмотря на отсутствие диссипации в модели).

80



Рис. 1. Отрицательность как функция безрамерного времени gt для модели без диполь-дипольного взаимодействия в случае когерентного начального состояния кубитов с $\theta_1 = \theta_2 = \pi/4$ (сплошная линия) и сепарабельного состояния с $\theta_1 = 0$, $\theta_2 = \pi$ (б). Среднее число тепловых фотонов в моде $\bar{n} = 20$, расстройка $\delta = 0$ (a) и $\delta = 10g$ (б), параметр диполь-дипольного взаимодействия J/g = 0,1.

4.ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в настоящей статьее мы исследовали влияние атомной когерентности на перепутывание двух дипольно-связанных двухуровневы[естественных или искусственныех атомов (кубитов), взаимодействующие с интенсивным тепловым одномодовым полем резонатора без потерь. Результаты расчетов показывают, что максимальная степень перепутывания кубитов может существенно возрастать при наличии начальной атомной когерентности в случае резонансного взаимодействия кубитов с тепловым полем. При ненулевой расстройке начальная атомная когерентность, напротив, уменьшает степень запутанности атомов. Полученные результаты могут быть использованы при разработке механизмов управления и контроля степени перепутывания кубитов в квантовых компьютерах и квантовых сетях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Georgescu I.M., Ashhab S., Nori F. Quantum simulation // Rev. Mod. Phys. 2014. Vol. 88. P. 153–186. DOI: https://doi.org/10.1103/ RevModPhys.86.153.

2. Buluta I., Ashab S., Nori F. Neutral and artificial atoms for quantum computation // Rep. Prog. Phys. 2011. Vol. 74. P. 104401. DOI: https://doi.org/10.1088/0034-4885/74/10/104401.

3. Kim M.S., Lee J., Ahn D., Knight P.L. Entanglement induced by a singlemode heat environment // Phys. Rev. 2002. Vol. A65. 040101. DOI: 10.1103/PhysRevA.65.040101.

4. Zhou L., Song H.S. Entanglement induced by a single-mode thermal field and criteria for entanglement // J. Opt. 2002. Vol. B4. P. 425–429. DOI: 10.1088/1464-4266/4/6/310.

5. Hu Y-H, Fang M-F, Jiang C-L, Zeng K. Coherence-enhanced entanglement between two atoms at high temperature // Chin. Phys. 2008/ Vol. B17, P. 1784-1790.

6. Aguiar L.S., Munhoz P.P., Vidiella-Barranco A., Roversi J.A. The entanglement of two dipole-dipole coupled in a cavity interacting with a thermal field // J. Opt. 2015. Vol. B7, P. 769–771. DOI: 10.1088/1464-4266/7/12/049.

7. Bashkirov E.K. Entanglement between two dipole-coupled qubits interacting with two independent slightly detuned cavity modes // Intern. J. Theor. Phys. 2019. Vol. 58(7). P. 2346–2356. DOI: 10.1007/s10773-019-04126-3/

ENTANGLEMENT OF ATOMS INDUCED BY THERMAL NOISE IN THE PRESENCE OF INITIAL ATOMIC COHERENCE M.O. Guslyannikova¹, Z.V. Kusaeva¹, E.K. Bashkirov¹

¹Samara National Research University, (Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086) e-mail: bash@ssau.ru

We studied the entanglement properties of the system of two dipole-coupled natural or articial two-level atoms (qubits) not-resonantly interacting with an intensive single-mode thermal fieleld for coherent initial atomic states.

The results show that the entanglement is weaken due to the initial atomic coherence for model with detuning in contrast to the model with resonant qubit-field interaction.

Keywords: identical two-level atoms, detuning, dipole-dipole interaction, thermal field, atomic coherence, atomic entaglement, entanglement/

ОПТОЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА СТРУКТУР С ПОРИСТЫМ КРЕМНЕМ, ДОПИРОВАННЫМ ЭРБИЕМ

Н.В. Латухина¹, <u>И. М. Жильцов</u>¹, А. Д. Кузьмин¹, М. В. Степихова²

¹Самарский университет,

кафедра Физики твердого тела и неравновесных систем (443086, г. Самара, Московское шоссе, 34) ²Институт физики микроструктур РАН (603950 Нижний Новгород, ГСП-105, Россия) e-mail: ivanzp45wm@yandex.ru

Проведена экспериментальная оценка возможности использовать структуры на основе пористого кремния допированного редкоземельным элементом эрбием для ИК-светодиодов. Исследованы вольт-амперные, вольтфарадные и спектральные характеристики фото- и электролюминесценции структур.

Ключевые слова: пористый кремний, ИК-светодиод

1. ВЕДЕНИЕ

В последние годы актуальным признаётся создание на основе пористого эффективных кремния светоизлучающих диодов с возможностью электролюминесценции в нормальных условиях, что подаёт надежды на создание полностью кремниевой оптоэлектроники. Интерес к пористому кремнию (ПК) как материалу оптоэлектроники связан с большой площадью его поверхности и наличием наноразмерных кристаллов в его порах, что делает его пригодным к использованию в люминесцентных структурах. Решение этой проблемы позволит повысить быстродействие, плотность записи информации, помехозащищенность и другие параметры интегральных схем: [1, 2]. В таком материале ионы редкоземельного элемента Er³⁺ находятся в порах в диэлектрическом слое SiO₂ и вблизи нанокристаллов кремния, что позволяет реализовать максимально эффективный механизм передачи энергии накачки в энергию излучения [3], а спектральный максимум излучения иона Er^{3+} приходится на длину волны $\lambda=1,55$ мкм и соответствует "окну прозрачности" волоконных кварцевых волноводов.

2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Исследовались ВАХ, вольт-фарадные и спектральные характеристики люминесценции структур с текстурированной и шлифованной поверхностью, прошедшие стадию электрохимического травления для создания пористого слоя и допированные эрбием.

На рис.1 - 3 приведены ВАХ образцов, в которых пористый слой формировался на подложке р-типа со шлифованной или текстурированной поверхностью, примесь Ег вводилась из сернокислого или азотнокислого диффузанта, температура диффузии 800°С. Сплошная линия - измерения после полугода хранения.

На рис.1 коэффициенты выпрямления: К(5)=1.75, К(6-пунктрир)=9. Напряжение пробоя: 4 В (для 5 и 6-сплошная) и 6 В (для 6-пунктир). Обратные токи: 7 мкА(для 5), 8 мкА(для 6-сплошная) и 5 мкА(для 6-пунктир).



Рис.1. ВАХ шлифованного образца, допированного азотнокислым Er.

На рис.2 коэффициенты выпрямления: К(5-сплошная)=4.75, К(5-пунктрир)=0.66, К(1-пунктир)=2.66. Напряжение пробоя: 7 В(5-сплошная), 4 В(6-пунктир), 8 В (5-пунктир) и 8 В(4-пунктир). Обратные токи: 8 мкА (для 1-сплошная, 6-пунктир, 5-пунктир), менее 5 мкА(для 1-пунктир, 4-пунктир), 9 мкА(для 5-сплошная), 15 мкА(для 6-сплошная).



Рис.2. ВАХ текстурированного образца, допированного сернокислым Er.

На рис.3 коэффициенты выпрямления: К(1-пунктир)=2,К(2пунктрир)=1.25. Напряжение пробоя: 8 В (для 4-пунктир), 4 В(для 2пунктир). Обратные токи: 25 мкА(для 1-пунктир), порядка 40 мкА(для 4пунктир), 20 мкА(для2-пунктир,2-сплошная).



Рис.3 ВАХ шлифованного образца, допированного сернокислым Er.

Таким образом, из анализа ВАХ следует, что все образцы имеют нелинейные характеристики с небольшими коэффициентами выпрямления наибольший имеет образец со шлифованной поверхностью, допированный эрбием из азотнокислого диффузанта.

На рис.4 -5 приведены ВФХ тех образцов, в которых диффузия эрбия проводилась из сернокислого диффузанта. Цифрами 1,2,3 на изображениях обозначены графики C(V)-характеристик структур, имеющих контакты разного диаметра: 1 - 1,1 мм; 2 - 1,6 мм и 3 - 2,2 мм.

Для всех образцов кривые ВФХ не имеют явно выраженных участков насыщения, характерных для структур металл-диэлектрик-полупроводник, заметны токи утечки, то есть слой окисла, образующийся над пористым кремнием, достаточно «рыхлый», и токоперенос через структуру возможен.



Рис.4. С(V)-характеристики образцов с текстурированной поверхностью



Рис.5. C(V)-характеристики образцов со шлифованной поверхностью.

В таблице 1 представлены основные параметры полученных вольтфарадных характеристик.

					Отношение					
		максимальная			максимальной и			Ширина области		
		ёмкость, пФ			минимальной			перегиба, В		
N⁰					ёмкостей					
	d контакта, мм	1,1	1,6	2,2	1,1	1,6	2,2	1,1	1,6	2,2
shlif-20		800	450	150	2,96	2,81	1,5	3	2	3
shlif-40		108	71	56	1,17	1,54	2,19	6	2	1
ТР		400	205	75	1,48	1,2	1,25	3	1	1,2
TP-por		255	178	107	1,4	1,46	1,24	2	2	1

Таблица 1. Анализ ВФХ

Люминесцентные исследования проводились методом Фурьеспектроскопии высокого разрешения на спектрометре BOMEM DA-3. В качестве источника возбуждения использовался Nd:YAG лазер, излучающий на длине волны 532 нм, мощность лазерного пучка на образце составляла 250 мВт с разрешением 4 см⁻¹ в диапазоне волновых чисел от 5000 см⁻¹ до 10000 см⁻¹. Детектирование сигнала осуществлялось при помощи охлаждаемого жидким азотом германиевого фотодетектора модели North-Coast EO-817A (Edinburgh Instruments).

Для полученных спектров (рис.6 - 7) была рассчитана квантовая эффективность, для фотолюминесценции расчет проводился по формуле:

$$\eta_{int} = \frac{P_{\lambda*\lambda_{II3}}}{P_{\Lambda a3epa*\lambda_{\Lambda a3epa}}},$$
(1)

где Р_ λ – мощность излучения, λ _изл – длина волны излучения, Р_лазера – мощность лазера, λ _лазера – длина волны лазера. Мощность излучения образцов оценивалась по излучению тестового образца с известной квантовой эффективностью.



Рис. 6. Спектры фотолюминесценции (ФЛ) исследованных образцов

На рис.6. приведены спектры ФЛ 6 образцов с пористым слоем, допированным эрбием посредством раствора как сернокислого (пометка стар. на рисунке), так и азотнокислого эрбия (пометка «нов» на рисунке под обозначениями #1, #6, #3). Квантовая эффективность (элементы #1, #6, #3) соответственно 2,96 %; 0,59%; 0,5 %. Видно, что максимальное значение эффективности имеют образцы, допированные эрбием из азотнокислого диффузанта.

Для образцов пористого кремния, допированного эрбием, была экспериментально доказана возможность электролюминесценции при комнатной температуре [3]. Спектр электролюминесценции приведен на рис.7. Рассчитана квантовая эффективность по формуле:

$$\eta_{int} = \frac{P_{int}}{I} \frac{e\lambda}{hc},$$
(2)

где P_int – мощность оптического излучения из активной области светодиода; I – ток инжекции; *e* – элементарный заряд; λ – длина волны излучения; h – постоянная Планка; с – скорость света в вакууме.



Рис. 7. ЭЛ-зависимость измеряемого образца

Квантовая эффективность для этого образца 11,64*10^-8 %.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исходя из полученных данных, можно заключить, что на базе образцов пористого кремния возможно создание люминесцентных структур. Исходя из ВАХ и ВФХ полученные структуры имеют нелинейную структуру, а также возможен токоперенос через структуру, однако люминесцентные исследования показывают, что эффективность электролюминесценции мала.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Кашкаров П.К., Каменев Б.В., Лисаченко М.Г. Эффективная люминесценция ионов эрбия в системах кремниевых нанокристаллов / П.К. Кашкаров//ФТТ. 2004. Т. 46-В.1. С. 105-109
- Жигунов Д.М., Латухина Н.В., Степихова М.В., Тимошенко В.Ю. Люминесценция в системах пористого кремния с редкоземельными элементами /Д.М. Жигунов//Сб. трудов 13-й международной научной конференции-школы «Материалы нано-, микро-, оптоэлектроники и волоконной физики: физические свойства и применение» – 2014. – С. 46.
- Степихова М.В. Оптически активные центры ионов эрбия в кремниевых матрицах: дис. на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук: 01.04.07 / Степихова Маргарита Владимировна. – Н.Н., 2006. – 144 с.

OPTICAL AND ELECTRICAL PROPERTIES OF POROUS SILICON DOPED WITH REE

N.V. Latukhina¹, <u>I.M. Zhiltsov</u>¹, A. D. Kuzmin¹, M.V. Stepikhova²

¹Samara University, Department of Solid State Physics and Nonequilibrium Systems (443086, Samara, Moscow highway 34) ²Institute of Physics of Microstructures RAS (603950 Nizhny Novgorod, GSP-105, Russia) Email: ivanzp45wm@yandex.ru

An experimental assessment of the possibility of using structures based on porous silicon doped with rare earth elements (REE) for IR LEDs has been carried out. The current-voltage, capacitance-voltage, and spectral characteristics of the photo- and electroluminescence of the structures have been investigated.

Keywords: porous silicon, IR LED

ФОРМИРОВАНИЕ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ ТЕРАГЕРЦОВЫХ ИМПУЛЬСОВ ДЛЯ СИСТЕМ СВЯЗИ НА МАЛЫЕ РАССТОЯНИЯ

<u>М.О. Жукова</u>¹, М.В. Мельник¹, Е.Н. Опарин¹, С. Лю¹, А.Н. Цыпкин¹, С.А. Козлов¹

¹Университет ИТМО

(197101, г. Санкт-Петербург, Кронверкский проспект, д.49, лит.А) e-mail: mozhukova@itmo.ru

Современные источники широкополосного излучения терагерцового диапазона частот в будущем могут способствовать развитию шестого поколения связи 6G. В данной работе продемонстрирована возможность формирования управляемой последовательности ТГц субимпульсов во временной области и соответствующего квазидискретного спектра за счет интерференции двух ТГц импульсов с нелинейной частотной модуляции (чирпом). Более того, из-за малой временной задержки между импульсами временная и спектральная структуры схожи друг с другом. Такие соотношения позволят производить кодирование и декодирование информации в ТГц диапазоне частот. Рассчитанные метрики для прототипа канала связи на предложенного метода являются конкурентоспособными основе с существующими ТГц каналами связи малого радиуса действия.

Ключевые слова: терагерцовый диапазон, импульсное излучение, интерференция, кодирование, системы связи.

1. ВВЕДЕНИЕ

На сегодняшний день активно развиваются и внедряются технологии связи пятого поколения (5G). Несмотря на это, уже активно зарождаются основы следующего поколения связи - 6G (беспроводные системы 6-го поколения), которое предполагает увеличение скорости передачи информации в 100-1000 раз [1]. Для перспективных систем беспроводной связи необходимо использовать ранее неохваченные спектральные диапазоны, а также передовые решения на физическом уровне. Таким решением может стать терагерцовая беспроводная связь [2].

В системах оптической связи в ИК-диапазоне для высокоскоростной связи на большие расстояния используются оптические частотные гребенки [3]. В ТГц диапазоне частот создать гребенку можно, например, на стадии оптико-ТГц предобразования при накачке генератора последовательностью

фемтосекундных лазерных импульсов [4]. Использование импульсных источников ТГц диапазона ограничено большими потерями в свободном пространстве из-за их широкого спектра. Поэтому для ТГц линий связи было предложено использовать источники непрерывного излучения [5] для больших расстояний, а импульсные источники для связи - на малые расстояния [6]. Квазидискретный ТГц суперконтинуум, полученный посредством спектральной интерференции двух ТГц импульсов, может использоваться для достижения скорости передачи данных 34,1 Гбит/с [7].

В данной работе мы показываем возможность формирования частотной гребенки и соответствующей временной последовательности импульсов в ТГц диапазоне частот. Показана взаимосвязь между возникающими временными и спектральными структурами. Таким образом, изменения в спектре приведут к аналогичным изменениям во временной области. Предложенным методом возможно достижение скорости передачи данных до 225 Мбит/сек при комнатной температуре.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ УСТАНОВКА

На рисунке 1(а) представлена экспериментальная установка ДЛЯ генерации последовательности терагерцовых импульсов при интерференции двух чирпированных терагерцовых импульсов на основе стандартной схемы ТГц спектрометра с разрешением во времени [8]. В качестве накачки используется твердотельный фс-генератор, легированный ионами Yb (центральная длина волны 1050 нм, длительность 100 фс, энергия импульса 70 нДж, частота повторения 75 МГц). ТГц излучение характеризуется центральной частотой 0,3 ТГц, расчетной средней мощностью 30 мкВт и FWHM ~ 2 пс (см. рисунок 1 (б)). В экспериментальной установке Майкельсона, помещенный интерферометр перед ТГц генератором, используется для создания двух последовательных фс импульсов. Одно из зеркал закреплено, а другое расположено на линейной подвижке, что позволяет регулировать временную задержку Δt между фс импульсами. Временная задержка выбрана таким образом, чтобы генерируемые в кристалле InAs ТГц импульсы не интерферировали друг с другом. Эти импульсы проходят через полый металлический волновод [9], где они чирпируются, перекрываются во времени и интерферируют (см. вставку на рисунке 1 (a)). Полый металлический волновод представляет собой трубку из нержавеющей стали с длиной 23 мм, внутренним диаметром 0,89 мм. и внешним 1,43 мм. Как

видно из рисунка 1 (в), чирпирование в металлическом волноводе приводит к увеличению длительности ТГц импульса с 2 пс до 7 пс (на полувысоте).



Рис. 1. (a) – Экспериментальная установка для генерации последовательности ТГц импульсов. СД - светоделитель, 3 - зеркала интерферометра Майкельсона, К - ТГц излучатель - кристалл InAs для оптико-ТГц преобразования, ПМВ - полый металлический волновод, ЭО - электрооптическая система детектирования. (б) и (в) – временные формы исходного и чирпированного импульса, соответственно

В результате интерференции формируется последовательность ТГц импульсов и соответствующий квазидискретный спектр. Чирп экспериментально полученных ТГц импульсов показан на рисунке 2 (а) (красная кривая). Как видно, он хорошо аппроксимируется экспоненциальной функцией (синяя кривая).

Как было показано ранее [10], интерферирующий сам с самим собой импульс с линейным чирпом, но сдвинутый на временную задержку короче его длительности, формирует последовательность импульсов, которая имеет строгое соответствие с ее квазидискретным спектром. Это означает, что каждый субимпульс во временной структуре имеет свою соответствующую спектральную линию в квазидискретном спектре. В данной работе из-за присутствия нелинейного чирпа в ТГц спектре неочевидно наличие соответствия между временной и спектральной структурами.

92



Рис. 2. (а) Экспериментальный чирп ТГц импульса и его экспоненциальное приближение, (б) квазидискретный спектр (в) и временная структура последовательности импульсов

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И МОДЕЛИРОВАНИЕ

На рисунке 2 (б) можно увидеть три отчетливых пика импульса. Во временной структуре рисунок 2 (в) эти пики соответствуют трем импульсам, но разной частоты и длительности. Формирование нерегулярной временной последовательности связано с нелинейным (экспоненциальным) чирпом импульса. Длительность отдельных пиков в последовательности варьируется от 10 до 40 пс, что соответствует частоте следования 25 - 100 ГГц. Кодирование может осуществляться в спектральной области, где мы имеем регулярную квазидискретную структуру, образованную двухлучевой интерференцией [11], разделения путем спектра в пространстве И использования амплитудных фильтров, как это было ранее показано в ближнем ИК-диапазоне.



Рис. 3. (а) Спектр, (б) временная структура и чирп моделированного ТГи импульса. *(B)* Квазидискретный чирпированного спектр u (2) последовательность импульсов, сформированная интерференцией двух чирпированных импульсов. Сравнение исходного импульса (синяя сплошная линия) и закодированного импульса (красная пунктирная линия) с вырезанием одной из линий. (д) квазидискретный спектр и (е) соответствующая последовательность импульсов

Для предположений, проверки сделанных при анализе экспериментальных данных, было проведено численное моделирование спектра и временной структуры экспоненциального чирпированного ТГц импульса с параметрами, близкими к полученным экспериментально (Рисунок 3 (а-б)). Далее моделируется интерференция двух импульсов во временной области [10]. На рисунке 3 (в, г) показан такой импульс после интерференции с самим собой, но сдвинутым на временную задержку $\Delta t = 4$ пс, и сравнение соответствующего квазидискретного спектра с экспериментальными результатами (рисунок 3 (в)). Видно, что смоделированный спектр хорошо согласуется с экспериментальным.

Для подтверждения соответствия между временной и спектральной структурами, образовавшимися в процессе интерференции, было выполнено численное моделирование удаления одной линии в квазидискретном спектре. Результаты показаны на рисунке 3 (д-е). Видно, что вырезание одного из

94

спектральных пиков приводит к исчезновению субимпульса во временной структуре. В результате, изменения в спектре приводят к аналогичным изменениям во временной структуре. Другими словами, существует взаимосвязь между спектром и временной структурой последовательности терагерцовых импульсов. Положения спектральных минимумов фиксированы и не будут зависеть от нестабильности энергии возбуждающего лазера и его продолжительности, что обычно приводит к изменениям во временной области. В результате это не повлияет на передаваемую информацию.

Для оценки перспективы применения этого метода, были рассчитаны характеристики канала связи (под каналом подразумевается один из пиков, представленных на рисунке 2 (в), например центральный). Отношение сигнала на несущей частоте к шуму (*C*/*N*) составляет порядка 10³ или 30 дБ. ВЕR для случая источников двоичных сообщений рассчитывается со следующими значениями параметров: скорость передачи 75 Мбит/с (что соответствует частоте повторения лазера 75 МГц для источников двоичных сообщений), и ширина спектрального канала 250 ГГц, в результате BER = $1,5 \cdot 10^{-7}$. Предложенный метод является конкурентоспособным по сравнению с существующими ТГц каналами связи на малые расстояния на основе непрерывных источников ($10^{-3} - 10^{-7}$ BER) [12].

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе экспериментальна показана возможность формирования последовательности субимпульсов ТГц диапазона с частотой следования во временной области 25–100 ГГц. Это достигается интерференцией двух чирпированных ТГц импульсов с временем задержки меньшей, чем их длительности. В результате в спектральной области формируется устойчивая регулярная структура. Результаты, основанные на моделировании, показывают, что при использовании нелинейно чирпированных импульсов ТГц диапазона существует взаимосвязь между временной и спектральной структурами. Скорость передачи данных в такой системе по оценкам составляет 225 Мбит/с.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ №17-00-00275 (17-00-00272).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zhang Z. et al. 6G wireless networks: Vision, requirements, architecture, and key technologies //IEEE-VTM. 2019. v. 14. p. 28-41.

- 2. Huq K. M. S. et al. Terahertz-enabled wireless system for beyond-5G ultra-fast networks: A brief survey //IEEE Network. 2019. v. 33. p. 89-95.
- 3. Delfyett P. J. et al. Advanced ultrafast technologies based on optical frequency combs // IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron. 2011. v. 18. p. 258-274.
- 4. Li H. et al. Dynamics of ultra-broadband terahertz quantum cascade lasers for comb operation // Opt. Express. 2015. v. 23. p. 33270-33294.
- Lin C., Li G. Y. Adaptive beamforming with resource allocation for distanceaware multi-user indoor terahertz communications // IEEE Trans. Commun. 2015. v. 63. p. 2985-2995.
- Piesiewicz R. et al. Short-range ultra-broadband terahertz communications: Concepts and perspectives //IEEE Antennas and Propagation Magazine. 2007. v. 49. p. 24-39.
- Grachev Y. V. et al. Wireless data transmission method using pulsed thz sliced spectral supercontinuum // IEEE Photonics Technol. Lett. 2017. v. 30. p. 103-106.
- Grachev Y. V., Osipova M. O., Bespalov V. G. Comparison of an electro-optical system and photo-conducting antenna employed as detectors of pulsed terahertz radiation by means of a new method for measuring spectral width // Quantum Electron. 2014. v. 44. p. 1170.
- McGowan R. W., Gallot G., Grischkowsky D. Propagation of ultrawideband short pulses of terahertz radiation through submillimeter-diameter circular waveguides // Opt. Express. 1999. v. 24. p. 1431-1433.
- 10. Melnik M. et al. Analysis of controlling methods for femtosecond pulse sequence with terahertz repetition rate // Appl. Phys. B. 2019. v. 125. p. 98.
- Alfano R. R., Zeylikovich I. Method and apparatus for producing a multiple optical channel source from a supercontinuum generator for WDM communication : пат. 7245805 США. – 2007.
- Zhao M., Zhou W., Yu J. 3.5 Gbit/s OOK THz signal delivery over 88 cm freespace at 441.504 GHz // Microw. Opt. Technol.Lett. 2018. v. 60. p. 1435-1439.

FORMATION OF TERAHERTZ PULSE SEQUENCES APPLICABLE FOR SHORT-RANGE COMMUNICATION SYSTEMS

M.O. Zhukova¹, M.V. Melnik¹, E.N. Oparin¹, S. Liu¹, A.N. Tcypkin¹, S.A. Kozlov¹

¹ITMO University (197101, St. Petersburg, Kronverksky prospect, 49, bl A) e-mail: mozhukova@itmo.ru)

Up to date sources of broadband terahertz radiation can contribute to the development of the sixth generation (6G) of communication standards. In this paper, we demonstrate the possibility of forming a controlled sequence of THz subpulses in the time domain and the corresponding quasi-discrete spectrum due to the interference of two THz pulses with an exponential chirp. Moreover, due to the small time delay between these pulses, the temporal and spectral structures are similar to each other. Such ratios will allow encoding and decoding of information in the THz frequency range. The calculated metrics for a communication channel prototype based on the proposed method are competitive with existing THz communication channels with a short range.

Keywords: terahertz range, pulsed radiation, interference, encoding, communication systems.

ФОКУСИРОВКА ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ВЕКТОРНЫХ ПУЧКОВ ДРОБНЫХ ПОРЯДКОВ

В.Д. Зайцев

Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, кафедра технической кибернетики (443001, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 151) e-mail: zaicev-vlad@yandex.ru

С помощью формул Ричардса-Вольфа моделировалась фокусировка цилиндрического векторного пучка с длиной волны 532 нм и дробным топологическим зарядом плоской дифракционной линзой с числовой апертурой NA=0.95. Было проведено исследование влияния отклонения порядка пучка от m=2 (т.е. случая, когда обратный поток наблюдается в центре фокусного пятна). Было показано, что небольшие отклонения порядка пучка от m=2 не приводят к исчезновению обратного потока энергии на оси. Отрицательные значения на оси начинаются от m=1,5.

1. ВВЕДЕНИЕ

Цилиндрические векторные пучки (ЦВП) получили в настоящее время широкое распространение из-за уникальных свойств, проявляемых ими при острой фокусировке. В частности, с помощью цилиндрических векторных пучков, можно получать фокусные пятна с размерами меньше скалярного дифракционного предела [1], фокусы с большой глубиной – опти-ческие иглы [2,3], световые туннели [4,5], цепочки фокусов [6–8] и т.д.

Поляризация в каждой точке ЦВП линейна, однако ее направление меняется непрерывно, совершая один или несколько оборотов при изменении азимутального угла от 0 до 2π. Большая часть работ (например, ранее отмеченные ...) посвящена изучению ЦВП, в которых поляризация совершает только один оборот – это радиально-поляризованные пучки, в которых поляризация направлена вдоль радиуса, или азимутально-поляризованные пучки, в которых она, соответственно, направлена перпендикулярно радиусу. Однако известны работы, в которых иссле-дуются поведение ЦВП высоких порядков, т.е. пуч-ков, в которых направление поляризации совершает несколько оборотов [9–14].

Одним из способов получения цилиндрических векторных пучков является получение секторных ЦВП с помощью полуволновых пластинок [1,15–24], нелинейных оптических кристаллов [18], поляризаторов [19] и субволновых решеток [20-22]. Ранее исследовалось влияние количества секторов на результаты фокусировки [23] и было показано, что уже для количества секторов равного шести отличия с фокусировкой пучка, в котором поляризация изменяется непрерывно, становятся невелики. Однако, ранее не поднимался вопрос, каким будут результаты фокусировки, если направление поляризации в различных секторах будет отличаться от запланированного (радиального или азимутального) – поляризация будет «перекручена» или «недокручена» ДО целого количества оборотов, К примеру, из-за технологических ошибок в изготовлении секторного элемента

В данной работе с помощью формул Ричардса-Вольфа моделировалась фокусировка цилиндриче-ского векторного пучка с длиной волны 532 нм и дробным порядком плоской дифракционной линзой с числовой апертурой NA=0.95. Было проведено моделирование для исследования влияния отклонения порядка пучка от m=2 (т.е. случая, когда обратный поток наблюдается в центре фокусного пятна).

Было показано, что обратный поток сохраняется в центре пятна даже при значительном отклонении порядка пучка от m=2 – появляется на оси уже при m=1,5.

2. МОДЕЛИРОВАНИЕ

В данной работе исследования осуществлялись с помощью формул Ричардса-Вольфа [24]

(1)

$$\mathbf{U}(\rho, \psi, z) = -\frac{if}{\lambda} \int_{\alpha_{\min}}^{\alpha_{\max}} \int_{0}^{2\pi} B(\theta, \varphi) T(\theta) \mathbf{P}(\theta, \varphi) \times \exp\left\{ik\left[\rho\sin\theta\cos\left(\varphi - \psi\right) + z\cos\theta\right]\right\} \sin\theta d\theta d\varphi$$

где U(ρ , ψ , z) – напряжённость электрического или магнитного поля, B (θ , ϕ) – электрическое или магнитное поле на входе широкоапертурной системы в координатах выходного зрачка (θ – полярный угол, ϕ – азимутальный), T (θ) – функция аподизации линзы, f – фокусное расстояние, k = $2\pi/\lambda$ – волновое число, λ – длина волны (в моделировании считалась равной 532 нм), α min – минимальный полярный угол, определяемый диаметром кольцевой апертуры, α max – максимальный полярный угол, определяемый числовой апертурой линзы (NA = sinαmax), P (θ, φ) – вектор поляризации, для напряжённости электрического и магнитного полей имеющий вид:

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

$$(2) \qquad + \begin{bmatrix} \sin \varphi \cos \varphi(\cos \theta - 1) \\ 1 + \sin^2 \varphi(\cos \theta - 1) \\ -\sin \theta \sin \varphi \end{bmatrix} b(\theta, \varphi)$$

где a(θ, φ) и b(θ, φ) – функции, описывающие со-стояние поляризации хи у- компонент напряжённостей фокусируемого пучка.

Для светового поля с цилиндрической поляриза-цией m-го порядка, вектора Джонса будут иметь вид:

(3)
$$E(\theta,\phi) = \begin{pmatrix} a(\theta,\phi) \\ b(\theta,\phi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sin(m\phi) \\ \cos(m\phi) \end{pmatrix}$$

для напряжённости электрического поля и

(4)
$$H(\theta,\phi) = \begin{pmatrix} a(\theta,\phi) \\ b(\theta,\phi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\cos(m\phi) \\ -\sin(m\phi) \end{pmatrix}$$

для напряжённости магнитного поля.

3. ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ОТКЛОНЕНИЯ ПОРЯДКА ПУЧКА ОТ m=2

На рисунке 1 показано распределение продольной проекции вектора Пойнтинга при изменении порядка пучка от 1,5 до 1,9 (т.е. поляризация «недокручена» до двух полных оборотов ее направления в поперечном сечении пучка).



Рис. 1. Распределение продольной компоненты вектора Пойнтинга при фокусировке ЦВП с порядками, изменяющимися от 1,9 до 1,5

Из рис. 1 видно, что при уменьшении порядка m распределение продольной составляющей вектора Пойнтинга Sz приобретает асимметричный вид – кольцо сжимается, а отрицательный поток в центре

пропадает. Из рисунка 1 также видно, что небольшие отклонения порядка пучка от m=2 не приводят сразу к исчезновению обратного потока энергии на оси. Отрицательные значения продольной компоненты в центре фокусного пятна наблюдаются уже при m=1,5. На рисунке 2 показано изменение Sz в центре фокусного пятна.



Рис. 2. Величина продольной проекции вектора Пойнтинга Sz(0,0) в центре фокусного пятна при изменении порядка фокусируемого пучка т

При отклонении порядка пучка m от целого значения поперечные составляющие вектора Пойнтинга Sx и Sy также становятся ненулевыми, хотя при m=1 и m=2 они отсутствовали. Поток энергии в плоскости фокуса превращается из ламинарного в турбулентный. В отличие от дробных выраженных центров вращения поперечного потока становится больше (рисунок 3).



Рис. 3. Составляющие вектора Пойнтинга Sx (a) и Sy (б) в области фокуса при фокусировке пучка с порядком поляризации m=1,9

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С помощью формул Ричардса-Вольфа моделировалась фокусировка цилиндрического векторного пучка с длиной волны 532 нм и дробным топологическим зарядом плоской дифракционной линзой с числовой апертурой NA=0.95. Было проведено исследование влияния отклонения порядка пучка от m=2 (т.е. случая, когда обратный поток наблюдается в центре фокусного пятна). Было показано, что небольшие отклонения порядка пучка от m=2 не приводят к исчезновению обратного потока энергии на оси. Отрицательные значения на оси начинаются от m=1,5.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Dorn, R. Sharper Focus for a Radially Polarized Light Beam / R. Dorn, S. Quabis, and G. Leuchs // Phys. Rev. Lett. – 2003. – Vol. 91. – P. 233901.

2. Grosjean, T. Longitudinally polarized electric and magnetic optical nanoneedles of ultra high lengths / T. Grosjean and I. Gauthier // Opt. Commun. – 2013. –Vol. 294. – P. 333–337.

3. Guan, J. Transversely polarized sub-diffraction optical needle with ultra-long depth of focus / J. Guan, J. Lin, C. Chen, Y. Ma, J. Tan, and P. Jin // Opt. Commun. – 2017. – Vol. 404. – P.118–123.

4. Yu, Y. Engineering of multi-segmented light tunnel and flattop focus with designed axial lengths and gaps / Y. Yu, H. Huang, M. Zhou, and Q. Zhan // Opt. Commun. -2018. - Vol. 407. - P. 398–401.

5. Zheng, C. Characterization of the focusing performance of axial line-focused spiral zone plates / C. Zheng, S. Su, H. Zang, Z. Ji, Y. Tian, S. Chen, K. Mu, L. Wei, Q. Fan, C. Wang, X. Zhu, C. Xie, L. Cao, and E. Liang // Appl. Opt. – 2018. – Vol. 57. – P. 3802-3807.

6. Lin, J. Generation of longitudinally polarized optical chain by 4 π focusing system / J. Lin, R. Chen, P. Jin, M. Cada, and Y. Ma // Opt. Commun. – 2015. – Vol. 340. – P. 69-73.

7. Yu, Y. Generation of uniform three-dimensional optical chain with controllable characteristics / Y. Yu and Q. Zhan // J. Opt. -2015. - Vol. 17. - P. 105606.

8. Xiaoqiang, Z. Focusing properties of cylindrical vector vortex beams / Z. Xiaoqiang, C. Ruishan, and W. Anting // Opt. Commun. – 2018. – Vol. 414. – P. 10-15.

9. Rashid, M. Focusing of high order cylindrical vector beams / M. Rashid, O. M. Maragò, and P. H. Jones // J. Opt. A Pure Appl. Opt. – 2009 – Vol. 11 – P. 065204.

10. Li, Y. Propagation evolution of an off-axis high-order cylindrical vector beam / Y. Li, Z. Zhu, X. Wang, L. Gong, M. Wang, and S. Nie // J. Opt. Soc. Am. A – 2014. – Vol. 31 – P. 2356-2361.

11. Qi, J. Multiple-slit diffraction of high-polarization-order cylindrical vector beams / J. Qi, W. Wang, B. Pan, H. Deng, J. Yang, B. Shi, H. Shan, L. Zhang, and H. Wang // Proceedings of SPIE – 2017. – Vol. 10339. – P. 1033927.

Wang, X.-L. Generation of arbitrary vector beams with a spatial light modulator and a common path interferometric arrangement / X.-L. Wang, J. Ding, W.-J. Ni, C.-S. Guo, and H.-T. Wang // Opt. Lett. – 2007– Vol. 32. – P. 3549–3551.
 Chen H. Generation of vector beam with space-variant distribution of both polarization and phase / H. Chen, J. Hao, B.-F. Zhang, J. Xu, J. Ding, and H.-T. Wang // Opt. lett. – 2011.– Vol. 36. – P. 3179–3181.

14. Liu, Y. Generation of perfect vortex and vector beams based on Pancharatnam-Berry phase elements / Y. Liu, Y. Ke, J. Zhou, Y. Liu, H. Luo, S. Wen, and D. Fan // Sci. Rep. – 2017. – Vol. 7. – P. 44096.

15. Machavariani, G. Efficient extracavity generation of radially and azimuthally polarized beams / G. Machavariani, Y. Lumer, I. Moshe, A. Meir, and S. Jackel // Opt. Lett. – 2007. – Vol. 32. – P.1468–70.

16. Machavariani, G. Spatially-variable retardation plate for efficient generation of radially- and azimuthally-polarized beam / G. Machavariani, Y. Lumer, I. Moshe, A. Meir, and S. Jackel // Opt. Commun. – 2008. – Vol. 281. – P. 732–738.

17. Alferov, S. V. Experimental study of focusing of inhomogeneously polarized beams generated using sector polarizing plates / S. V. Alferov, S. V. Karpeev, S. N. Khonina, and O. Y. Moiseev // Comput. Opt. – 2014. – Vol. 38. – P. 57–64.

18. Imai, R. Terahertz vector beam generation using segmented nonlinear optical crystals with threefold rotational symmetry / R. Imai, N. Kanda, T. Higuchi, Z. Zheng, K. Konishi, and M. Kuwata-Gonokami // Opt. Express – 2012 – Vol. 20. – P. 21896–21904.

19. Man Z. Arbitrary vector beams with selective polarization states patterned by tailored polarizing films / Z. Man, C. Min, Y. Zhang, Z. Shen, and X.-C. Yuan // Laser Phys. -2013 - Vol. 23. -P. 105001.

20. Nalimov, A. G. Reflected four-zones subwavelength microoptics element for polarization conversion from linear to radial / A. G. Nalimov, L. O'Faolain, S. S. Stafeev, M. I. Shanina, and V. V. Kotlyar // Comput. Opt. – 2014. – Vol. 38. – P. 229–236.

 Stafeev, S. S. Microlens-aided focusing of linearly and azimuthally polarized laser light / S. S. Stafeev, A. G. Nalimov, M. V. Kotlyar, D. Gibson, S. Song, L. O'Faolain, and V. V. Kotlyar // Opt. Express. – 2016. – Vol. 24. – P. 29800–29813.
 Kotlyar, V. V. Subwavelength micropolarizer in a gold film for visible light / V. V. Kotlyar, S. S. Stafeev, M. V. Kotlyar, A. G. Nalimov, and L. O'Faolain // Appl. Opt. – 2016. – Vol. 55. – P. 5025-5032.

23. Stafeev, S. S. Tight focusing of a quasi-cylindrical optical vortex / S. S. Stafeev and V. V. Kotlyar // Opt. Commun. – 2017. – Vol. 403. – P. 277–282.

24. Richards, B. Electromagnetic Diffraction in Optical Systems. II. Structure of the Image Field in an Aplanatic System / B. Richards and E. Wolf // Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci. – 1959 – Vol. 253. P. 358–379.

ВЛИЯНИЕ ДЕГИДРАТАЦИИ КОЖИ *EX VIVO* НА РЕГИСТРИРУЕМЫЕ СПЕКТРЫ КОЛЛИМИРОВАННОГО ПРОПУСКАНИЯ

<u>С.М. Зайцев</u>^{1,2}, А.Н. Башкатов^{1,3}, У. Блондель², М. Амуру², В.В. Тучин^{1,3,4}, Э.А. Генина^{1,3}

¹Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского (410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83) ²Университет Лотарингии, (54506, Вандёвр-ле-Нанси, Франция) ³Томский государственный университет (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36) ⁴Институт проблем точной механики и управления РАН (410028, г. Саратов, ул. Рабочая, 24) e-mail: sergey.zaycev.1995@bk.ru

В данной работе представлены результаты исследования влияния дегидратации крысы vivo на кожи exрегистрируемые спектры коллимированного пропускания. Спектры пропускания были получены с помощью системы из двух световодов, оборудованных коллиматорами, в диапазоне длин волн 400-800 нм. В результате было установлено, что уменьшение толщины образца кожи в процессе дегидратации приводит к увеличенному потоку фотонов через кожу (увеличение в 11 раз при λ =700 нм), и, в то же время, к росту коэффициента ослабления света µt за счет увеличения концентрации рассеивателей в коже на единицу объема.

Ключевые слова: кожа, коллимированное пропускание, дегидратация, коэффициент ослабления, спектроскопия.

1. ВВЕДЕНИЕ

Активно разрабатываемые в последние годы неинвазивные оптические методы диагностики позволяют осуществлять исследование и визуализацию биологических тканей *in vivo* и *ex vivo* чрескожным способом [1-3]. Данный метод, несомненно, позволяет значительно улучшить эффективность диагностики и терапии. Однако, из-за своих сильных рассеивающих свойств кожа представляет собой барьер, ограничивающий эффективность оптических

104

методов диагностики, снижая потенциальную глубину анализа биоткани, а также контраст её визуализации.

Дегидратация кожи является одним из основных механизмов, приводящих к снижению её толщины и доли обратно рассеянного света. Результатом может являться увеличение доли фотонов, прошедших внутрь биоткани, что, в свою очередь, приводит к увеличению контраста и разрешения по глубине неинвазивных оптических методов диагностики.

Целью данной работы являлось исследование влияния эффекта дегидратации кожи ex vivo на измеряемые спектры коллимированного пропускания кожи.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

2.1. Образцы кожи

В качестве объекта исследования были использованы 10 образцов кожи *ex vivo* с бедренной части беспородных крыс-альбиносов. Размер образцов составлял 2×2 см с предварительно удалённым слоем жировой ткани. Образцы были предоставлены Центром коллективного пользования Саратовского государственного медицинского университета имени В.И. Разумовского.

2.2. Экспериментальная установка и экспериментальный протокол

Установка для измерения спектров коллимированного пропускания изображена на рисунке 1. В качестве источника света использовалась галогенная лампа (HL-2000, Ocean Optics, CША). Образец кожи крысы крепился по периметру квадратного отверстия 1×1 см², расположенного на держателе для образцов. Испускаемый широкополосный пучок света направлялся на эпидермальную сторону образца кожи с помощью оптического световода с диаметром волокна 400 мкм (QP400-1-VIS-NIR, Ocean Optics, CША), оборудованного на конце оптическим коллиматором (74-ACR Ocean Optics, CША). Прошедший через кожу свет регистрировался аналогичной системой из коллиматора и световода, а затем направлялся в спектрометр (USB4000-UV-VIS Ocean Optics, США).



Рис. 1. Экспериментальная установка: 1- галогенная лампа, 2 – световоды, оборудованные коллиматорами, 3 – диафрагмы, 4 – держатель для образца кожи, 5 – образец кожи, 6 – спектрометр, 7 - ПК.

Спектры пропускания измерялись в начальный момент времени, а также каждые 10 минут в течение 300-350 минут. Каждое измерение спектров дополнялось измерением толщины образца кожи с помощью микрометра. Для оценки потери воды за счёт дегидратации, у каждого образца кожи была также измерена масса в начале и в конце измерений. В течение всего эксперимента теплый поток воздуха (~36°С) был направлен на дермальную сторону каждого образца для ускорения процесса дегидратации.

Полученные экспериментальные данные были обработаны с помощью программного обеспечения МАТLAB. Область 400-800 нм полученных спектров пропускания была выбрана для анализа, так как этот диапазон длин волн обладает наименьшим уровнем шума, основываясь на чувствительности спектрометров. Значения коэффициента ослабления света μ_t , который представляет собой сумму коэффициентов рассеяния и поглощения света, были подсчитаны с учётом длины волны и момента времени измерения по формуле

$$\mu_t = -\frac{\ln(\frac{I_0(t,\lambda)}{I_t(t,\lambda)})}{l(t)},\tag{1}$$

где I_0 – интенсивность падающего света в зависимости от момента времени t и длины волны λ , I_t - интенсивность прошедшего через образец кожи света в зависимости от момента времени t и длины волны λ , l – толщина образца кожи в зависимости от момента времени t.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Типичная кинетика коллимированного пропускания образца кожи для нескольких длин волн, а также соответствующая кинетика коэффициента ослабления света и толщины представлены на рисунке 2. Как видно из представленных данных, толщина данного образца кожи снизилась более чем в 2 раза за время эксперимента. В течение всего времени измерения наблюдался рост коэффициента ослабления света, в то время как величина коллимированного пропускания показывала рост только до определённого момента времени. После этого на всех измеряемых длинах волн наблюдался спад сигнала коллимированного пропускания.



Рис. 2. Типичная кинетика коллимированного пропускания образца кожи на нескольких длинах волн (a); соответствующая кинетика коэффициента ослабления света (б) и толщины образца кожи (в).

На рисунке 3 представлена гистограмма сравнительных данных для всех исследованных образцов кожи на длине волны 700 нм. Как видно из гистограммы, для всех образцов можно было наблюдать значительное снижение толщины вплоть до момента достижения максимальной величины коллимированного пропускания. Одновременно с ростом коллимированного

пропускания, также для всех образцов наблюдалось увеличение коэффициента ослабления света. Данный факт, вероятно, может объясняться увеличением концентрации тканевых рассеивателей на единицу объема в процессе дегидратации, что привело к увеличению значения µ_ℓ. Однако снижение толщины образца в данном случае привело к увеличению количества фотонов, прошедших через кожу. Таким образом, несмотря на рост коэффициента коллимированного пропускания, дегидратация приводит к росту рассеяния образцов кожи.



Рис. 3. Нормированные значения коллимированного пропускания исследуемых образцов кожи в момент достижения максимума (чёрный цвет, λ=700 нм), соответствующие нормированные значения μ_t (красный) и толщины кожи (синий).

Феномен снижения величины коллимированного пропускания после достижения максимального значения, по-видимому, мог быть вызван тем, что в соответствующий момент времени процесс дегидратации по большей части завершился (среднее снижение массы образцов составило 0.31±0.08 г), что можно заметить по снижению наклона кинетической кривой толщины кожи на рисунке 2(в). В то же время рост величины коэффициента ослабления света продолжался и после данного момента времени, что и могло привести к тому, что величина коллимированного пропускания начала снижение. Данный результат требует дополнительного исследования в последующих работах.
3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Впервые измерена кинетика изменения коэффициента коллимированного пропускания образцов кожи в процессе дегидратации. На основе полученных результатов одновременного измерения коллимированного пропускания и толщины образцов, проведена оценка коэффициента ослабления кожи. Несмотря на значительный рост величины коллимированного пропускания (в среднем в 11 раз на длине волны 700 нм), получено увеличение коэффициента ослабления света в процессе дегидратации, в среднем в 1.25 раз.

Работа была выполнена при поддержке грантов РФФИ (проекты № 20-32-90043 и № 18-52-16025), а также при поддержке гранта «Вернадский» Посольства Франции в России в рамках договора о совместной франкорусской аспирантуры (2018-2021 гг.). Особую благодарность хочется выразить Алле Борисовне Бучарской за предоставление лабораторных животных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- V. V. Tuchin, Tissue Optics: Light Scattering Methods and Instruments for Medical Diagnosis. Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE), 2015.
- H. J. C. M. Sterenborg, M. Motamedi, R. F. Wagner, M. Duvic, S. Thomsen, and S. L. Jacques, In vivo fluorescence spectroscopy and imaging of human skin tumours. // Laser Med Sci., 1994, v. 9, no. 3, p. 191–201.
- 3. E. A. Genina, A. N. Bashkatov, and V. V. Tuchin, Tissue optical immersion clearing. // Expert Rev Med Devices., 2010, v. 7, no. 6, p. 825–842.

EFFECT OF EX VIVO SKIN DEHYDRATION ON COLLIMATED TRANSMISSION SPECTRA

<u>S.M. Zaytsev</u>^{1,2}, A.N. Bashkatov^{1,3}, W. Blondel², M. Amouroux², V.V. Tuchin^{1,3,4}, E.A. Genina^{1,3}

¹Saratov State University (Astrakhanskaya str., 83, Saratov, Russia, 410012) ²University of Lorraine, (Vandeuvre-le-Nancy, France, 54506) ³Tomsk State University (Lenin ave., 36, Tomsk, Russia, 634050) ⁴Institute of Precision Mechanics and Control, RAS (Rabochaya str., 24, Saratov, Russia, 410028) e-mail: sergey.zaycev.1995@bk.ru

This paper presents the results of a study of the effect of dehydration of rat skin ex vivo on the recorded collimated transmittance spectra. Transmittance spectra were obtained using a system of two optical fibers equipped with collimators in the wavelength range of 400-800 nm. As a result, it was found that a decrease in the thickness of the skin sample during dehydration leads to an increased flux of photons through the skin (11-fold increase at $\lambda = 700$ nm), and, at the same time, to an increase in the light attenuation coefficient μ_t due to an increase in the concentration of scatterers in skin per unit volume.

Keywords: skin, collimated transmittance, dehydration, attenuation coefficient, spectroscopy.

ПЕРЕПУТЫВАНИЕ КУБИТОВ В НЕКОТОРЫХ МОДЕЛЯХ КВАНТОВОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ РЕЗОНАТОРОВ С КЕРРОВСКОЙ НЕЛИНЕЙНОСТЬЮ

<u>Р.К. Захаров</u>¹, А. Осман¹, Е.К. Башкиров¹

¹Самарский национальный исследовательский университет, (443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34) e-mail: rodion.zakharov88@gmail.com

В настоящей статье мы исследуем перепутывание между двумя двухуровневыми атомами, взаимодействующих с одномодовым тепловым полем идеального резонатора при наличии среды Керра. Мы показали, что керровская нелинейность увеличивает степень перепутывания между атомами. Что еще более интересно, тепловое поле может индуцировать атомное перепутывание даже в том случае, когда оба атома первоначально находятся в возбужденном состоянии.

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

1. ВВЕДЕНИЕ

Для перепутывания удаленных кубитов в квантовых компьютерах и квантовых сетях используют их взаимодействия с электромагнитными полями. Изучение взаимодействия между кубитами и фотонами резонаторов составляет предмет квантовой электродинамики резонаторов (РКЭД) [1]. В последние годы было предложено множество схем для создания, управления и поддержания атомного перепутывания в системах РКЭД, таких как захваченные в ловушку и охлажденные ионы, нейтральные атомы, сверхпроводящие кольца, спины в твердых телах, квантовые точки, взаимодействующие с квантовыми полями резонаторов [2]. Теоретические исследования таких моделей основаны на модели Джейнса-Каммингса (МДК) и ее обобщениях [3]. Хорошо известно, что МДК – это простейшая физическая модель, которая описывает взаимодействие естественного или искусственного двухуровневого атома (или иначе кубита) с полем одномодового резонатора. Такая модель активно используется для понимания широкого спектра явлений в квантовой оптике и системах конденсированных сред. В течение последних

десятилетий были исследованы многочисленные обобщения МДК [3]. В частности, изучалась динамика двухуровневых атомов, взаимодействующих с полем одномодового резонатора при наличии среды Керра [4, 5]. На практике керровская нелинейность в атомных системах χ часто мала по сравнению со скоростью потерь фотонов κ из резонатора, это затрудняет наблюдение такого эффекта. В качестве альтернативного подхода, сильное фотон-фотонное взаимодействие в сверхпроводящих квантовых цепях с $\chi/\kappa \sim 30$ может быть легко реализовано экспериментально [6].

Для оптимального функционирования квантовым устройствам требуются максимально перепутанные состояния. Хотя взаимодействие между окружающей средой и квантовыми системами может привести к декогеренции, оно также может вызывать перепутывание. Так, Ким с соавторами [7] исследовали атом-атомное перепутывание в системе двух однофотонными идентичных двухуровневых атомов с переходами, индуцированными одномодовым тепловым полем. Перепутывание двух идентичных двухуровневых атомов посредством нелинейного двухфотонного взаимодействия с одномодовым тепловым полем было изучено Чжоу и др. [8, 9]. взаимодействия, Влияние диполь-дипольного нелинейного невырожденного двухфотонного взаимодействия, расстройки и штарковского сдвига на тепловое перепутывание атомов изучалось в [10].

Представляет большой интерес изучить перепутывание двух идентичных атомов, вызванное тепловым шумом, посредством других нелинейных процессов с сильным фотон-фотонным взаимодействием. В данной работе мы исследуем влияние керровской нелинейности на тепловое атомное перепутывание для системы, состоящей из двух одинаковых кубитов, взаимодействующих с одномодовым полем микроволнового резонатора без потерь.

2. МОДЕЛЬ И ЕЕ ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ

Рассмотрим два одинаковых кубита резонансно взаимодействующих с полем одномодового резонатора. Мы предполагаем, что константы связи кубит-поле равны. Пусть также в резонаторе имеется дополнительная среда Керра. Гамильтониан взаимодействия данной системы в приближении вращающейся волны можно записать в виде

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{2} \hbar \gamma (\hat{\sigma}_i^+ \hat{a} + \hat{\sigma}_i^- \hat{a}^\dagger) + \chi \left(\hat{a}^\dagger\right)^2 \hat{a}^2, \qquad (1)$$

где $\hat{\sigma}_i^+ = |+\rangle_{ii} \langle -|$ и $\hat{\sigma}_i^- = |-\rangle_{ii} \langle +|$ – операторы перехода между возбужденным $|+\rangle_i$ и основным $|-\rangle_i$ состояниями в *i*-ом кубите (*i* = 1, 2), \hat{a}^+ и \hat{a} – операторы рождения и уничтожения фотонов моды резонатора, γ – константа связи между кубитами и модой резонатора, χ – параметр керровской нелинейности.

Выберем в качестве начального состояния кубитов сепарабельное состояние вида

$$\Psi(0)_{>_{A}} = |+,-\rangle \tag{2}$$

ИЛИ

$$\Psi(0) >_{A} = |+,+>.$$
(3)

Начальное состояние моды поля резонатора – тепловое состояние

$$\hat{
ho}_F(0) = \sum_n p_n \mid n
angle \langle n \mid p_n = rac{\overline{n}^n}{\left(1 + \overline{n}\right)^{n+1}},$$

где \overline{n} – среднее число фотонов в резонаторе,

$$\overline{n} = \left(\exp\left[\hbar \omega / k_B T \right] - 1 \right)^{-1},$$

 $k_{\scriptscriptstyle B}$ – постоянная Больцмана и T– температура резонатора.

Прежде чем рассматривать взаимодействие между двумя кубитами и тепловым полем, рассмотрим два одинаковых двухуровневых атома, одновременно взаимодействующих полем резонатора в фоковском состоянии. Для получения точного решения временного уравнения Шредингера мы используем так называемые «одетые» состояния или собственные функции гамильтониана взаимодействия (1). Будем предполагать, что величина возбуждения системы кубит-поле равно

 $(n \ge 0)$. Тогда эволюция системы в базисе $|-,-,n+2\rangle$, $|+,-,n+1\rangle$, $|-,+,n+1\rangle$, $|+,+,n\rangle$ собственные функции гамильтониана (1) можно записать в виде

$$|\Psi_{in}\rangle = w_{in}(X_{i1n} | -, -, n+2\rangle + X_{i2n} | +, -, n+1\rangle + X_{i3n} | -, +, n+1\rangle + X_{i4n} | +, +, n\rangle)$$

$$(i = 1, 2, 3, 4),$$
(4)

где

$$w_{in} = 1/\sqrt{|X_{i1n}|^2 + |X_{i2n}|^2 + |X_{i3n}|^2 + |X_{i4n}|^2}$$

Предположим, что система изначально находится в состоянии $|+,-,n+1\rangle$ ($n \ge 0$), затем, со временем t, вся система будет развиваться до

$$|\Psi(t)\rangle = C_{12,n} |-, -, n+2\rangle + C_{22,n} |+, -, n+1\rangle + C_{32,n} |-, +, n+1\rangle + C_{42,n} |+, +, n\rangle,$$
(5)

где

$$C_{i2,n} = e^{-iE_{1n}t/\hbar} w_{1n} Y_{2in} X_{1in} + e^{-iE_{2n}t/\hbar} w_{2n} Y_{2in} X_{2in} + e^{-iE_{3n}t/\hbar} w_{3n} Y_{2in} X_{3in} + e^{-iE_{4n}t/\hbar} w_{4n} Y_{2in} X_{4in}$$

$$(i = 1, 2, 3, 4)$$
(6)

И $Y_{ijn} = w_{jn} X^*_{jin}$.

Аналогичным образом может быть найдена временная волновая функция для начального состояния |+,+,*n*>.

Используя выражения (4)-(8), можно получить матрицу плотности для всей системы $\hat{\rho}(t)$. Взяв след по переменным поля $\hat{\rho}_A(t) = Tr_F \hat{\rho}(t)$, получим редуцированную атомную матрицу плотности.

3. ВЫЧИСЛЕНИЕ ОТРИЦАТЕЛЬНОСТИ

Для двухкубитной системы, описываемой матрицей плотности $\hat{\rho}_{A}(t)$, мера перепутывания или отрицательность может быть определена в терминах отрицательных собственных значений μ_{i}^{-} частично транспонированной редуцированной атомной матрицы плотности $\hat{\rho}_{A}^{T_{1}}$

$$\varepsilon = -2\sum_{i}\mu_{i}^{-}.$$
(9)

Для сепарабельных начальных атомных состояний (2) и (3) частично транспонированная редуцированная атомная матрица плотности имеет вид

$$\hat{\rho}_{A}^{T_{1}}(t) = \begin{pmatrix} \rho_{11}(t) & 0 & 0 & \rho_{23}^{*}(t) \\ 0 & \rho_{22}(t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33}(t) & 0 \\ \rho_{23}(t) & 0 & 0 & \rho_{44}(t) \end{pmatrix}.$$
(10)

Матричные элементы (10) не приведены ввиду их громоздкости.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ

Отрицательность для сепарабельного начального состояния $|+,-\rangle$ представлена на рисунке 1 как функция приведенного времени γt для фиксированного значения среднего числа фотонов $\overline{n} = 0.5$ и различных значений коэффициента керровской нелинейности $\tilde{\chi}$. Из рисунка 1 видно, что увеличение коэффициента керровской нелинейности приводит к увеличению максимальной степени перепутывания атомов.

Отрицательность для сепарабельного начального состояния $|+,+\rangle$ изображена на рисунке 2 как функция приведенного времени γt для фиксированного значения среднего числа фотонов $\bar{n} = 0.1$ и различных значений коэффициента керровской нелинейности $\tilde{\chi}$.



Рис. 1. Отрицательность как функция приведенного времени γt для начального сепарабельного атомного состояния (2) и значений коэффициента керровской нелинейности $\tilde{\chi} = 0$ (сплошная линия), $\tilde{\chi} = 0.3$ (штриховая линия). Среднее число фотонов в резонаторе $\bar{n} = 0.5$.



Рис. 2. Отрицательность как функция приведенного времени γt для начального сепарабельного атомного состояния (3) и значений коэффициента керровской нелинейности $\tilde{\chi} = 1$ (сплошная линия), $\tilde{\chi} = 2$ (штриховая линия) и $\tilde{\chi} = 5$ (пунктирная линия). Среднее число фотонов в резонаторе $\bar{n} = 0.1$.

Из рисунка 2 легко увидеть, что с увеличением коэффициента керровской нелинейности можно получить большую запутанность. Заметим, что при нулевом коэффициенте керровской нелинейности перепутывания между атомами в процессе эволюции системы не возникает. Эти результаты находятся в согласии с предыдущими исследованиями [7]-[13].

Следовательно, среда Керра может быть использована для управления степенью перепутывания между кубитами для любых их начальных состояний.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в настоящей работе, мы исследовали динамику двух идентичных кубитов, резонансно взаимодействующих с одномодовым полем резонатора, а также исследовали влияние керровской нелинейности на атоматомное перепутывание. Поведение параметра перепутывания (отрицательности) для сепарабельных состояний атомов и теплового поля резонатора было предметом нашего исследования. Мы пришли к выводу, что керровская нелинейность для начального атомного состояния $|+,-\rangle$ увеличивает степень перепутывания атомов. Мы также обнаружили, что для начального состояния |+,+> взаимодействие кубитов с полем может вызывать перепутывание атомов при наличии керровской нелинейности, в то время как для модели без нелинейности, это начальное состояние не вызывает перепутывание атомов в процессе эволюции системы. Эти результаты могут быть полезны для обработки квантовой информации на основе явления перепутывания.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. I. Buluta, S. Ashhab, F. Nori, Natural and artificial atoms for quantum computation. // Rep. Prog. Phys., 2011, v. 74, № 104401, p. 1-34.
- I. M. Georgescu, S. Ashhab, F. Nori, Quantum simulation. // Rev. Mod. Phys., 2014, v. 88, p. 153-185.
- B. W. Shore, P. L. Knight, The Jaynes-Cummings Model. // J. Mod. Opt., 1992, v. 40, №7, p. 1195-1238.
- S. Puri, S. Boutin, A. Blais, Engineering the quantum states of light in a Kerrnonlinear resonator by two-photon driving. // npj Quan. Inform., 2017, v. 3, № 18, p. 1-4.
- 5. S. A. Aldaghfag, K. Berrada, S. Abdel-Khalek, Entanglement and photon statistics of two dipole-dipole coupled superconducting qubits with Kerr-like nonlinearities. // Results in Phys., 2020, v. 16, № 102978, p. R1661-R1664.
- 6. 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.
- 7. 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.

- 8. 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.
- 9. E. K. Bashkirov, Entanglement induced by the two-mode thermal noise. // Laser Phys. Lett., 2006, v. 3, p. 145-150.
- 10. 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.
- 11. B. Zhang, Entanglement between two qubits interacting with a slightly detuned thermal feld. // Opt. Comm., 2010, v. 283, p. 4676-4679.
- E.K. Bashkirov, M.S. Mastyugin, Entanglement of two superconducting qubits interacting with two-mode thermal field. // Computer Optics, 2013, v. 37, p. 278-285.
- E.K. Bashkirov, Dynamics of entanglement of atoms with two-photon transitions induced by a thermal field. // Computer Optics, 2020, v. 44, p. 167-176.

ENTANGLEMENT OF QUBITS IN SOME MODELS OF THE CAVITY QUANTUM ELECTRODYNAMICS WITH KERR NONLINEARITY

R.K. Zakharov¹, A. Osman¹, E.K. Bashkirov¹

¹Samara National Research University, (Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086) e-mail: rodion.zakharov88@gmail.com

In this paper, we investigate entanglement between two two-level atoms when they simultaneously interact with a single-mode thermal field of a lossless cavity with Kerr medium. We show that a slight Kerr nonlinearity might enhance the degree of entanglement between the atoms. More interestingly, both atoms would somehow get entangled even when both atoms are initially in the excited state.

Keywords: quantum informatics, entanglement, qubits, Kerr nonlinearity, negativity, thermal field, two-level atoms.

ИЗУЧЕНИЕ ИНТЕНСИВНОСТИ И ВРЕМЕНИ ЖИЗНИ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ПЕРЕВИТОЙ ГЕПАТОЦЕЛЛЮЛЯРНОЙ КАРЦИНОМЫ МЫШЕЙ

К.Ю. Кандурова¹, В.В. Шуплецов¹, Е.В. Потапова¹, Е.А. Жеребцов^{1,2}

¹ Научно-технологический центр биомедицинской фотоники, Орловский государственный университет имени И.С. Тургенева (302026, г. Орёл, ул. Комсомольская, 95) ² Optoelectronics and Measurement Techniques Unit, University of Oulu (90570, Erkki Koiso-Kanttilankatu 3, Oulu, Finland) e-mail: kandkseniya@gmail.com

Ключевые слова: оптическая биопсия, рак печени, гепатоцеллюлярная карцинома, время жизни флуоресценции.

Морфологический анализ опухоли остается неотъемлемой частью предоперационной диагностики рака печени [1]. Образцы для исследования получаются в ходе процедуры пункционной биопсии. Метод обладает значительными преимуществами, однако существуют недостатки: получения неинформативных биоптатов и невозможность вероятность исследования в режиме реального времени. Для повышения эффективности биопсии перспективным представляется использование флуоресцентных методов диагностики, которые широко применяются для оценки состояния биологических тканей в режиме реального времени благодаря участию в метаболических эндогенных флуорофоров, процессах В частности восстановленного никотинамидадениндинуклеотида (НАДН). Интенсивность и время жизни флуоресценции несут информацию о метаболическом состоянии клеток и взаимодействии НАДН с окружающими веществами [2].

Целью работы явилось измерение интенсивности и времени жизни флуоресценции на модельных животных с интеграцией в систему тонкоигольной оптической биопсии.

Для оценки параметров флуоресценции использовался метод времякоррелированного счета одиночных фотонов. Измерительная система (Becker & Hickl, Германия) включала два фотоумножителя HPM-100-40 (445±25 нм) и пикосекундный лазер BDL-SMN (365 нм). Источник и детекторы подключались к специально разработанному волоконно-оптическому зонду (Ø 1 мм, скос торца 20°) для использования в стандартных пункционных иглах 17,5 G.

В качестве модели использовались 8 мышей линии BDF, которым в среднюю долю печени были перевиты клетки гепатоцеллюлярной карциномы мыши H33. Измерения проводились *in vivo* через 3 месяца после операции в нескольких областях здоровых и пораженных тканей печени. Исследования были одобрены Этическим комитетом Орловского государственного университета (протокол заседания № 12 от 6.09.2018).

Полученные результаты показали высокую индивидуальную вариабельность и незначительное увеличение средней интенсивности флуоресценции в опухоли. Выявлено статистически значимое снижение компонент времени жизни флуоресценции τ_1 и τ_2 в тканях опухоли на 35 и 22%. При этом амплитудный вклад быстрой компоненты α_1 в опухоли увеличился на 12%, достигнув 75,6±0,6 %, что указывает на преобладание свободной формы НАДН. Результаты коррелируют с данными о преобладании свободного НАДН в процессе гликолиза в злокачественных тканях в противоположность окислительному фосфорилированию в здоровых тканях.

Таким образом, предлагаемый подход к флуоресцентным измерениям во время пункционной биопсии является перспективным для дальнейших исследований с более подробным анализом влияющих на результаты параметров, в том числе стадии опухолевого процесса и морфологических особенностей.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда в рамках проекта №18-15-00201.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. A. Wee Fine-needle aspiration biopsy of hepatocellular carcinoma and related hepatocellular nodular lesions in cirrhosis: controversies, challenges, and expectations // Patholog. Res. Int., 2011, v. 2011, 587936.
- W. Becker, A. Bergmann, M.A. Hink et al. Fluorescence lifetime imaging by time-correlated single-photon counting // Microsc. Res. Tech., 2004, v. 63, №. 1, p. 58-66.

THE STUDY OF FLUORESCENCE INTENSITY AND LIFETIME OF INOCULATED HEPATOCELLULAR CARCINOMA IN MICE

K.Y. Kandurova¹, V.V. Shupletsov¹, E.V. Potapova¹, E.A. Zherebtsov^{1,2}

 ¹Research and Development Center of Biomedical Photonics, Orel State University named after I.S. Turgenev (Komsomolskaya st., 95, Orel, Russia, 302026)
 ²Optoelectronics and Measurement Techniques Unit, University of Oulu (90570, Erkki Koiso-Kanttilankatu 3, Oulu, Finland) e-mail: kandkseniya@gmail.com

This paper describes the approach to measuring the parameters of fluorescence intensity and lifetime with the system of fine-needle optical biopsy for preoperative diagnosis of liver cancer. The results of measurements in healthy and malignant tissues of laboratory mice with inoculated hepatocellular carcinoma are presented. The results demonstrated the prospects for further research on integration of fluorescence methods into the procedure of puncture biopsy of liver lesions.

Keywords: optical biopsy, liver cancer, hepatocellular carcinoma, fluorescence lifetime.

ЧЕТЫРЕХВОЛНОВОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В ПАРАБОЛИЧЕСКИХ ВОЛНОВОДАХ С КЕРРОВСКОЙ И ТЕПЛОВОЙ НЕЛИНЕЙНОСТЯМИ

<u>Д.Р. Капизов</u>, В.И. Никонов

Самарский национальный исследовательский университет, (443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34) e-mail: darkhankapizov@gmail.com

С помошью ΦΡΤ проанализировано OBΦ метода качество четырехволнового преобразователя излучения в схеме с попутными волнами параболических волноводов тепловой накачки с керровской И нелинейностями. Увеличение угла между волнами накачки приводит к возникновению «тонкой» структуры ФРТ, период которой не изменяется при переходе от волновода с керровской нелинейностью к волноводу с тепловой нелинейностью. Перекачка энергии из центрального максимума в побочные происходит быстрее для волновода с керровской нелинейностью. Энергия, сосредоточенная в побочных максимумах и полуширина огибающей ФРТ больше для волновода с керровской нелинейностью, чем для волновода с тепловой нелинейностью.

Ключевые слова: керровская нелинейность, тепловая нелинейность, параболический волновод, четырехволновое взаимодействие

1. ВВЕДЕНИЕ

Обращение волнового фронта (ОВФ) является одним из основных способов компенсации искажений, вносимых в волну при ее распространении через оптически неоднородную среду. Преимущество использования четырехволновых процессов для ОВФ связано с их безпороговостью, отсутствием частотного сдвига и широким диапазоном преобразуемых амплитуд.

Для получения ОВФ существует несколько схем четырехволнового взаимодействия. В качестве основной считается схема со встречными волнами накачки, когда первая и вторая волна накачки распространяются навстречу друг другу. В результате дифракции второй волна накачки на решетке, образованной интерференцией первой волны накачки и сигнальной волны, генерируется обращенная волна (объектная волна), которая будет распространяться навстречу сигнальной волне, происходит полное обращение

волнового фронта [1-2]. Так же существует схема с попутными волнами накачки, когда первая и вторая волна накачки распространяются в одном направлении. Тогда сгенерированная объектная волна будет распространятся в том же направлении, что и сигнальная волна, происходит обращение лишь поперечной составляющей волнового вектора [3-4]. В работе [5] анализируется качество ОВФ при четырехволновом взаимодействии в схеме как со встречными, так и с попутными волнами накачки.

В работах [6-11] пристальный интерес уделяется исследованию четырехволнового взаимодействии в волноводах. Интерес вызван способностью волноводов направлять излучение на большие расстояния при малой площади поперечного сечения для достижения достаточной эффективности четырехволнового преобразования взаимодействующих волн.

В настоящей работе исследуется качество ОВФ при вырожденном четырехволновом взаимодействии в схеме с попутными волнами накачки в параболическом волноводе с керровской нелинейностью и в параболическом волноводе с тепловой нелинейностью.

2. ФУНКЦИЯ РАЗМЫТИЯ ТОЧКИ ЧЕТЫРЕХВОЛНОВОГО ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ ИЗЛУЧЕНИЯ В ПАРАБОЛИЧЕСКОМ МНОГОМОДОВОМ ВОЛНОВОДЕ

Рассмотрим вырожденное четырехволновое взаимодействие в схеме с попутными волнами накачки в многомодовом волноводе с параболическим профилем показателя преломления. В приближении заданного поля, линейная зависимость сигнальной и объектной волн позволяет использовать метод функции размытия точки (ФРТ), для исследования качества ОВФ четырехволнового преобразователя.

В работе [10] получена ФРТ для вырожденного четырехволнового взаимодействия в параболическом многомодовом волноводе с керровской нелинейностью в схеме с попутными волнами накачки с маленьким коэффициентом отражения:

$$\begin{split} \Gamma\left(\tilde{x}\right) &= -igl \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\sin\theta \cdot k\omega_{0}\right)^{2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{\tilde{x}^{2}}{2}\right) \times \\ &\times \sum_{n=0}^{N} \sum_{m=0}^{N} \sum_{r=0}^{N} \frac{1}{\beta_{r}} \cdot \frac{i^{n+m-2}}{2^{n+m}\sqrt{n!m!r!(n+m-r)!}} \times \\ &\times H_{n}\left(\frac{\sin\theta \cdot k\omega_{0}}{\sqrt{2}}\right) \cdot H_{m}\left(\frac{\sin\theta \cdot k\omega_{0}}{\sqrt{2}}\right) \cdot H_{n+m-r}\left(0\right) \cdot H_{r}\left(\tilde{x}\right) \cdot \gamma_{n,m,r,n+m-r}, \end{split}$$

ГДе
$$\gamma_{n,m,r,n+m-r} = \frac{2}{\pi \omega_0^2 2^{n+m} \sqrt{n!m!r!(n+m-r)!}} \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\tilde{x}) H_m(\tilde{x}) H_r(\tilde{x}) H_{n+m-r}(\tilde{x}) \exp(-2\tilde{x}^2) d\tilde{x}$$

– интеграл перекрытия, характеризующий эффективность преобразования четырех мод волновода; $g = \frac{12\pi\omega^2}{c^2} \chi^{(3)}$; ω – циклическая частота излучения; c – скорость света; l – длина волновода; $\chi^{(3)}$ – тензор нелинейной восприимчивости 3-го порядка; θ – угол падения волн накачки; k – волновое число; ω_0 – поперечный размер волновода; β_r – постоянная распространения r-ой моды волновода; n,m,r,s=n+m-r (по условию фазового синхронизма) – номер моды волновода (двух волн накачки, объектной и сигнальной волны); $H_n(где n=n,m,r,s=n+m-r)$ – функция Эрмитта n-ого порядка; $\tilde{x} = \frac{x\sqrt{2}}{\omega_0}$ – нормированная переменная.

параболического Для многомодового тепловой волновода с нелинейностью случай, рассматривается когда записывается две температурные решетки, при интерференции сигнальной волны с первой и ΦΡΤ второй волной накачки. вырожденного четырехволнового взаимодействия в параболическом многомодовом волноводе с тепловой нелинейностью в схеме с попутными волнами накачки с маленьким коэффициентом отражения имеет вид [11]:

$$\Gamma(\tilde{x}) = -i\frac{(kl)^2}{n_1}\frac{dn}{dT}\frac{2\alpha}{\Lambda c_p\rho} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\sin\theta \cdot k\omega_0\right)^2\right) \exp\left(-\frac{\tilde{x}^2}{2}\right) \times \\ \times \sum_{n=0}^N \sum_{s=0}^N \sum_{r=0}^N \sum_{p=0}^N \frac{1}{\beta_r} \cdot \frac{i^{n+m-2}}{2^{n+m-s-r}\sqrt{n!m!r!s!}} \cdot H_n\left(\frac{\sin\theta \cdot k\omega_0}{\sqrt{2}}\right) \cdot H_m\left(\frac{\sin\theta \cdot k\omega_0}{\sqrt{2}}\right) \cdot H_s(0) \cdot H_r(\tilde{x}) \times \\ \times \left\{\gamma_{mpr} \cdot \gamma_{nps} \cdot \frac{(k\omega_0)^4}{[2(2p+1)(k\omega_0)^2 + (4(s-n))^2](kl)^2} \times \right. \\ \left. \times \left[1 + \frac{\sqrt{2(2p+1)}}{k\omega_0}kl\right] \left[2(2p+1)(k\omega_0)^3 + (4(r-m))^2\right]kl \right] \times \\ \left. \times \left[\operatorname{sch}\left(\frac{\sqrt{2(2p+1)}}{k\omega_0}kl\right) \left(\exp\left(-i\frac{4(s-n)kl}{(k\omega_0)^2}\right) + \exp\left(-i\frac{4(r-m)kl}{(k\omega_0)^2}\right)\right) - 2\right]\right] + \right] \right\}$$

перекрытия трех мод волновода $(t = n, m, j = s, r); \frac{dn}{dT}$ – термооптический коэффициент; n₁ – показатель преломления на оси волновода; α – коэффициент поглощения; Л – коэффициент температуропроводности среды; c_p – удельная теплоемкость; ρ – объемная плотность вещества.

Функция размытия точки, полностью описывает качество преобразования излучения при четырехволновом взаимодействии В многомодовом волноводе.

3. Обсуждение результатов

На рисунке 1 приведены нормированные на максимальное значение (Γ_{\max}) характерные графики зависимостей модуля ФРТ $\left(G(\tilde{x}) = \frac{|\Gamma(\tilde{x})|}{|\Gamma_{\max}|}\right)$ от нормированной поперечной координаты для параболического волновода с керровской нелинейностью и для волновода с тепловой нелинейностью при угле падения волн накачки $\theta = 1^{\circ}$. В пределах полуширины ФРТ, значение ФРТ остается постоянной как для волновода с керровской фазы нелинейностью, так и для волновода с тепловой нелинейностью, в отличие от волновода с тепловой нелинейности с учетом одной температурной решетки [11].

Когда основная энергия объектной волны сосредоточенна в центральном максимуме, в качестве количественной характеристики качества ОВФ преобразователя излучения может выступить полуширина ФРТ $\left(\Delta \tilde{x} = \frac{\Delta x \sqrt{2}}{\omega_{0}}\right)$,

оцениваемая по уровню 0.5 от максимального значения. Значение полуширины ФРТ уменьшилось с $1.75\omega_0$ до $1.37\omega_0$ при переходе от волновода с керровской нелинейностью к волноводу с тепловой нелинейностью.



Рис. 1. Зависимость модуля ФРТ от нормированной поперечной координаты для волновода с керровкской нелинейностью (1) и волновода с тепловой нелинейностью (2) при kω₀ = 20, θ = 1°

При угле падения волн накачки $\theta \to 0^{\circ}$ полуширина ФРТ полностью определяется параметром волновода ω_0 . В случае увеличения угла падения волн накачки и в зависимости ФРТ от поперечной координаты возникает «тонкая» структура как для волновода с тепловой нелинейностью, так и для волновода с керровской нелинейностью [10, 11]. На рисунке 2 представлена зависимость полуширины ФРТ и нормированного максимального значения побочного максимума $\left(\frac{\Gamma(\tilde{x}_2)}{\Gamma_{\text{max}}}\right)$ (\tilde{x}_2 – координата максимального значения побочного максимума) от угла падения волн накачки для волновода с керровской нелинейностью и для волновода с тепловой нелинейностью.

С увеличением угла падения волн накачки от $\theta = 1^{\circ}$ до $\theta = 3.5^{\circ}$ наблюдается уменьшение с последующим приближением значения полуширины ФРТ волновода с керровской нелинейностью и волновода с тепловой нелинейностью. Значение полуширины ФРТ уменьшается от $1.75\omega_0$ до $0.87\omega_0$ и от $1.37\omega_0$ до $0.86\omega_0$ волновода с керровской нелинейностью и волновода с тепловой нелинейностью соответственно. Одновременно с уменьшением полуширины ФРТ возрастает нормированное максимальное значение побочного максимума от 0 до 0.5 и 0.085 до 0.22 волновода с

керровской нелинейностью и волновода с тепловой нелинейностью, соответственно. Перекачка энергии из центрального максимума в побочные происходит быстрее для волновода с керровской нелинейностью, чем для волновода с тепловой нелинейностью.



Рис. 2. Зависимость нормированных полуширины ФРТ и максимального значения побочного максимума от угла падения волн накачки для волновода с керровской нелинейностью (1, 3) и волновода с тепловой нелинейностью (2, 4) при $k\omega_0 = 20$

При увеличении параметра волновода до $k\omega_0 = 40$ и угле падения волн накачки $\theta = 3^\circ$ в зависимости ФРТ от поперечной координаты наблюдается рост как числа максимумов, так и максимального значения побочных максимумов, аналогичное поведение ФРТ было получено при рассмотрении четырехволнового взаимодействия в неограниченной среде [5]. Переход от четырехволнового взаимодействия на керровской нелинейности к тепловой нелинейности не изменяет период «тонкой» структуры ФРТ (рисунок 3). Значение полуширины центрального максимума ФРТ равны с точностью до 1% волновода с керровской и волновода с тепловой нелинейностью, нормированное максимальное значение побочных максимумов ФРТ растет с приближением к центральному максимуму с 0.35 до 0.725 для волновода с керровской нелинейностью и с 0.08 до 0.47 для волновода с тепловой нелинейностью. Энергия, сосредоточенная в побочных максимумах, как и полуширина огибающей ФРТ убывает при переходе от волновода с керровской нелинейностью к волноводу с тепловой нелинейностью.



Рис. 3. Зависимость модуля ФРТ от нормированной поперечной координаты для волновода с керровской нелинейностью (1) и волновода с тепловой нелинейностью (2) при kω₀ = 40, θ = 3°

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проанализировано качество ОВФ четырехволнового преобразователя излучения для волновода с керровской нелинейностью и для волновода с тепловой нелинейностью, показано, что при увеличении угла падения волн накачки перекачка энергии из центрального максимума в побочный максимум происходит быстрее для волновода с керровской нелинейностью, чем для волновода с тепловой нелинейностью. Так же наблюдается совпадение периода «тонкой» структуры, энергия, сосредоточенная в побочных максимумах больше в волноводе с керровской нелинейностью, чем в волноводе с тепловой нелинейностью. Полуширина огибающей ФРТ уменьшается при переходе от волновода с керровской нелинейностью к волноводу с тепловой нелинейностью.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. А.А. Акимов, Е.В. Воробьёва, В.В. Ивахник Четырёхволновое взаимодействие на резонансной и тепловой нелинейностях // Компьютерная оптика, 2011, т.35, № 4, с. 462-466.
- 2. Е.В. Воробьёва, В.В. Ивахник, М.В. Савельев Пространственно-временные характеристики четырёхволнового преобразователя излучения в прозрачной среде с учётом электрострикции и эффекта Дюфура // Компьютерная оптика, 2014, т.38, № 2, с. 223-228.

- 3. В.В. Ивахник, М.В. Савельев Пространственная селективность четырехфотонного преобразователя излучения в прозрачной двухкомпонентной среде в схеме с попутными волнами накачки // Компьютерная оптика, 2016, т.40, № 3, с. 322-330.
- A.A. Akimov, V.V. Ivakhnik, V.I. Nikonov Four-Wave Interaction on Resonance and Thermal Nonlinearities in a Scheme with Concurrent Pump Waves for High Conversion Coefficients // Radiophysics and Quantum Electronics, 2015, Vol.57, Issue 8-9, p. 672-679.
- 5. В.В. Ивахник, Т.Г. Харская Использование метода функции размытия точки для анализа качества преобразования излучения при четырёхволновом взаимодействии на тепловой нелинейности (обзор) // Компьютерная оптика, 2009, т.33, № 1. с. 17-26.
- X. Ma [et al.] Generation of photon pairs in dispersion shift fibers through spontaneous four wave mixing: influence of self-phase modulation // Optics Communications, 2011. Vol.284, p. 4558-4562.
- 7. S.K. Turitsyn [et al.] Clements inverse four-wave mixing and self-parametric amplification in optical fibre // Nature Photonics, 2015, V.9, № 9, p. 608-615.
- Y. Weng, X. He, J. Wang, Z. Pan All-optical ultrafast wavelength and mode converter based on intermodal four-wave mixing in few-mode fibers // Optics Communications, 2015, V.348, p. 7-12.
- 9. E. Nazemosadat, H. Pourbeyram, A. Mafi Phase matching for spontaneous frequency conversion via four-wave mixing in graded–index multimode optical fibers // Journal of the Optical Society of America B, 2016, V.33, № 2, p. 144-150.
- 10.В.В. Ивахник, Д.Р. Капизов, В.И. Никонов Четырехволновое взаимодействие в многомодовом волноводе с керровской нелинейностью в схеме с попутными волнами накачки // Физика волновых процессов и радиотехнические системы, 2019, т.22, № 2, с.13-18.
- 11.В.В. Ивахник, Д.Р. Капизов, В.И. Никонов Четырехволновое взаимодействие в многомодовом волноводе с тепловой нелинейностью в схеме с попутными волнами накачки // Физика волновых процессов и радиотехнические системы, 2020, т. 23, №3.

FOUR-WAVE INTERACTION IN THE PARABOLIC WAVEGUIDES WITH KERR AND THERMAL NONLINEARITIES

D.R. Kapizov, V.I. Nikonov

Samara National Research University, (Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086) e-mail: darkhankapizov@gmail.com

Using the point spread function (PSF) method, quality of phase conjugation of a four-wave radiation converter in a scheme with concurrent pump waves of parabolic waveguides with Kerr and thermal nonlinearities is analyzed. Increasing the angle between the pump waves leads to the appearance of a "fine" structure of the PSF and the period of the PSF does not change while passing from a waveguide with Kerr nonlinearity to a waveguide with thermal nonlinearity. The energy concentrated in the side maxima and the PSF envelope half-width is greater for a waveguide with Kerr nonlinearity than for a waveguide with thermal nonlinearity.

Keywords: Kerr nonlinearity, thermal nonlinearity, parabolic waveguide, fourwave interaction.

ИССЛЕДОВАНИЕ И РАСЧЕТ ПЛАНАПОХРОМАТИЧЕСКОГО ОБЪЕКТИВА С ИСПРАВЛЕННЫМ ХРОМАТИЗМОМ УВЕЛИЧЕНИЯ

Л.Н. Андреев, <u>А.Д. Кожина</u>, Е.А. Цыганок, Е.Б. Сошникова, А.В. Уварова

Университет ИТМО (197101, г. Санкт-Петербург, Кронверкский проспект, д.49) e-mail: crensta@mail.ru

Риск биологических возникновения различных угроз диктует повышенные требования к точности и скорости их обнаружения. Что приводит качества необходимости улучшения изображения современных к Работа микроскопов. разработке планапохроматического посвящена объектива, как основного силового элемента микроскопа. Высокая степень коррекции сферической и хроматических аберраций позволяет отказаться от использования компенсационных окуляров, а коррекция кривизны дает возможность получать изображения хорошего качества на матричных приемниках.

Ключевые слова: планапохромат, хроматическая аберрация, хроматизм увеличения.

1. ВВЕДЕНИЕ

Микроскоп – оптический прибор, реализующий видимое увеличение микроструктур, расположенных на конечном расстоянии. Наибольшее влияние на качество оптической системы оказывает объектив, как первая ступень увеличения микроскопа. От его степени коррекции аберраций и числовой апертуры зависят качество изображения и разрешающая способность микроскопа [1].

В зависимости от степени коррекции, объективы микроскопа разделяются на: монохроматы, ахроматы и апохроматы. У монохроматов коррекция аберраций выполняется в узком спектральном диапазоне.

Второй тип - это ахроматы. У данного типа объективов ахроматизация выполняется для двух длин волн. Корригируются сферическая аберрация, кома, астигматизм, хроматическая аберрация положения.

Третий тип объективов имеет ахроматизацию для трех длин волн, и называется апохроматами. Они имеют наибольшее предпочтение для проведения исследований, так как в них исправляются не только сферическая

аберрация, кома, астигматизм и хроматизм положения, но и вторичный спектр и сферохроматизм [1].

Некоторые объективы имеют степень коррекции полевых аберраций. Ее можно определить по таким маркерам, как "стигм" и "план". Астигматические объективы – объективы с уменьшенными полевыми аберрациями, "планы" – с отсутствующими.

Как можно заменить, в классификации не сказано про исправления хроматизма увеличения, который мешает эффективному использованию исследований, требующих микроскопических методов размещение В изображения плоскости промежуточного специальных шкал, сеток, препаратов и прочих компонентов [2]. Не все современные объективы имеют исправленный хроматизм увеличения. У сильных объективов он обычно составляет около 2%. Для его устранения используют специальные компенсационные окуляры. Тем не менее, необходимость иметь несколько комплектов окуляров, которые нужно выбирать в зависимости от объектива, существенно ограничивает оператора и затрудняет его работу.

Цель данной работы разработать апохроматический объектив с плоским полем, а также имеющим коррекцию хроматизма увеличения.

2. СПОСОБЫ КОРРЕКЦИИ ХРОМАТИЗМА УВЕЛИЧЕНИЯ

В настоящее время проблема коррекции хроматизма увеличения решается разными способами. Одним из них является использование компьютерных методов обработки изображения [2]. Несмотря на свою эффективность, реализация данного способа затруднительна при экспрессанализе, так как выполнение алгоритма обработки требует времени, наличия компьютера и специального программного обеспечения. Поэтому оптимальная коррекция должна быть выполнена компонентами самой оптической системы.

Как было сказано ранее, многие производители микроскопов применяют специальных компенсирующие окуляры. Их проектируют таким образом, что в них остается не до конца корригированный хроматизм увеличения, благодаря чему во всей оптической схеме микроскопа он оказывается скомпенсированным [1]. Однако при этом в комплекте необходимо иметь несколько наборов окуляров.

Еще одним методом борьбы с хроматизмом увеличения является введение в параллельный ход лучей пары гиперхроматических линз [3]. Каждая линза представляет собой плоскопараллельную пластину, склеенную

из оптических материалов, у которых показатели преломления для основной длины волны близки, а коэффициенты средней дисперсии – различны. На рисунке 8 представлен пример использования гиперхроматических линз в ахроматическом иммерсионном микрообъективе (поз. 7-8 и 9-10 на рисунке 1) [4].Использование после объектива компенсатора, состоящего из двух добиться гиперхроматических линз, позволяет улучшения коррекции без увеличения нарушения хроматизма степени коррекции монохроматических аберраций.



Рис. 1. Ахроматический иммерсионный объектив с гиперхроматическими линзами

Также существует метод коррекции без использования дополнительных оптических элементов. Компании Nikon и Zeiss реализуют метод, согласно которому в микрообъективах, рассчитанных на длину тубуса "бесконечность", проблема устранения хроматизма увеличения решается путем введения фиксированной величины данной аберрации в тубусную линзу[5,6]. Однако это накладывает ограничения на применения объективов других производителей.

Как можно заменить, в настоящее время используется множество способов коррекции хроматизма увеличения. Наиболее универсальным на наш взгляд является введение компенсаторов в конструкцию самого объектива.

3. РАЗРАБОТКА ПЛАНАПОХРОМАТИЧЕСКОГО ОБЪЕКТИВА

Для разработки планапохраматического объектива с исправленным хроматизмом увеличения было решено использовать метод композиции М.М. Русинова [7]. Наш объектив состоит из трех частей. Первая часть - это апохроматический компонент. Вторая часть - это компенсатор кривизны и астигматизма. Третья - компенсатор хроматизма увеличения. В качестве объекта разработки выбран объектив "тубус бесконечность" с фокусным расстояние f'=25 мм, и числовой апертурой A=0,2.

3.1. Апохроматический компонент

Для наиболее эффективного для устранения вторичного спектра применяют сочетания материалов с близкими значениями относительных частных дисперсий и максимально различными коэффициентами дисперсий [8]. Наиболее оптимальным в этом случае является сочетание флюорита (CaF2) с особыми флинтами или тяжелыми и сверхтяжелыми кронами. По этим причинам основным силовым элементом разрабатываемого объектива является склеенный линзовый блок. Наиболее распространенными стеклами для сочетания с флюоритом являются СТК9, ОФ4, ТФ4, ТК14.

Апохроматический компонент должен обладать высокой коррекций сферической аберрации, комы, хроматизма положения и вторичного спектра. По этой причине, параметров, которыми бы происходило исправление аберраций недостаточно, в случае использования одной, склеенной из двух компонентов, линзы. Применение асферических поверхностей в данной работе не рассматривается, так как это экономически не обоснованно. Для получения необходимых переменных, в оптическую систему вводится одиночная линза.

С помощью программ автоматизированной коррекции было получено 7 оптических систем с разными сочетаниями марок стекол.На рисунке 2 представлен внешний вид наилучшего варианта апохроматического компонента в обратном ходе лучей. Оно состоит из СТК9-СаF2/ОФ4. В таблице 1 в столбце «АП» приведены его критерии качества.



Рис. 2. Внешний вид апохроматического компонента

На рисунке Зпредставлен график хроматическогофокального сдвига. По нему можно увидеть, что хроматизм положения и вторичный спектр в системе присутствуют. Однако, их величина составляет единицы микрометров и допустима для апохроматических компонентов.



Рис. 3. График фокального сдвига апохроматического компонента

3.2. Компенсатор кривизны и астигматизма

Для компенсации кривизны поверхности используются афокальные компенсаторы и апланатические мениски. Мы остановились на линзах с аплаталическими поверхностями, так как они не вносят сферической аберрации и могут быть установлены в сходящемся пучке лучей. Внешний вид оптической системы в обратном ходе лучей, состоящей из апохроматического компонента с компенсатором кривизны и астигматизма, представлен на рисунке 4. Критерии качества оптической системы приведены в таблице 1 в столбце «АП с КК».



Рис. 4. Внешний вид апохроматического компонента с компенсатором кривизны

3.3. Компенсатор хроматизма увеличения

В качестве компенсатора хроматизма увеличения мы будем использовать два склеенных блока линз, наподобие пары гиперхроматических линз, рассмотренных выше. Однако у них имеются существенные различия. Пара гиперхроматических линз, состоящая из двух одинаковых плоскопараллельных пластинок, не только устраняет хроматизм увеличения, но и вносит хроматизм положения, что ухудшит качество уже исправленной системы.

Предлагаемый компенсатор также состоит из двух плоскопараллельных пластинок, выполненных склеиванием плосковыпуклой и плосковогнутой линз. Однако во второй склейке материалы инвертированы, то есть из материала, который использовался для выполнения плосковыпуклой линзы в одной пластинке, будет выполнена плосковогнутая линза в другой пластинке. Это позволит скомпенсировать хроматизм положения, вносимый первой пластинкой. Внешний вид оптической системы объектива в обратном ходе лучей представлен на рисунке 5. На рисунке 6 представлены графики хроматизма увеличения без компенсатора и с компенсатором, а также приведен хроматический фокальный сдвиг для всей оптической системы. В таблице 1 указаны характеристики качества для каждой ступени расчета оптической системы объектива.

Таблица 1. Характеристики качества рассчитанных оптических систем

Характеристика	АП	АП с КК	Объектив
Фокусное расстояние f', мм	25,13	25,56	25,56
Числовая апертура NA	0,20	0,19	0,19
Хроматизм положения, мм	-0,004	0,004	0,003
Продольная сферическая аберрация на зоне, мм	-0,094	-0,093	-0,093
Продольная сферическая аберрация на краю, мм	0,035	0,046	0,046
Поперечная сферическая аберрация на краю, мм	0,007	0,009	0,009
Астигматический отрезок z'm (на краю), мм	-0,38	-0,07	-0,07
Астигматический отрезок z's (на краю), мм	-0,20	0,02	0,02
Кривизна, мм	-0,29	-0,025	-0,025
Астигматизм (на краю), мм	-0,18	-0,09	-0,09
Хроматизм увеличения, %	0,02	0,48	0,01



Рис. 5. Внешний вид планапохроматического объектива с исправленным хроматизмом положения





4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе выполнения работы был разработан объектив, имеющий высокую степень коррекции хроматизма положения, вторично спектра, кривизны, а также хроматизма увеличения. В разработке объектива использовались методы композиции и автоматизированной коррекции. Полученные результаты могут быть впоследствии применены для изготовления объектива. Кроме того, показанные в работе компенсаторы могут быть использованы для расчета других оптических систем.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. В.А. Панов, Л.Н. Андреев, Оптика микроскопов. Расчет и проектирование. // Л.: Машиностроение, 1976,432 с.
- M. Kozubek, P. Matula, An efficient algorithm for measurement and correction of chromatic aberrations in fluorescence microscopy: // Journal of Microscopy, 2020.
- 3. Л.Н. Андреев, Прикладная теория аберраций. Часть третья: Учебное пособие. // СПб: Университет ИТМО, 2016, 46 с.
- 4. Л.Н. Андреев, Ахроматический иммерсионный объектив [Текст]: пат. 1203460 СССР: МПК G 02 B 21/02; заявл. 02.08.1984; опубл. 07.01.86
- J. Sanderson, Understanding Light Microscopy. // Hoboken, John Wiley & Sons Ltd, 2019
- J. Pawley, Handbook of Biological Confocal Microscopy. // Madison, Springer, p. 985
- 7. М. М. Русинов, Композиция оптических систем.// Л.: Машиностроение, 1986, 383 с.
- 8. О.Н. Балаценко, А.П. Грамматин, Объективы-апохроматы без кристаллов // Оптический журнал, 2002,том 69, №2,

RESEARCH AND DESIGN OF PLANAPOCHROMATIC LENS WITH CORRECTED LATERAL COLOR

L.N. Andreev, A.D. Kozhina, H.A. Tsyganok, E. B. Soshnicova, A.V. Uvarova

ITMO University, (49 Kronverksky Pr., St. Petersburg, 197101, Russia) e-mail: crensta@mail.ru

The uprise of various biological threats leads to an increase of such requirements for their detection as accuracy and speed. Thus, the image quality of modern microscopes needs to be improved. The work is devoted to development of a plan apochromatic objective for microscope. A high level of spherical and chromatic aberrations correction makes it possible to abandon the use of compensating eyepieces; curvature correction makes it possible to obtain images of good quality on matrix receivers.

Keywords: plan apochromat, chromatic aberration, lateral color.

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА РЕАКЦИИ ЦИКЛОПЕНТАДИЕНИЛА И ИНДЕНИЛА

В.С. Красноухов¹, М.В. Загидуллин^{1,3}, В.Н. Азязов^{1,3}, А.М. Мебель^{1,2}

¹Самарский национальный исследовательский университет имени академика. С.П. Королева (Московское шоссе 34, Самара, Россия, 443086) ²Международный университет Флориды, Майами, США

(SW 8 th St, Miami, 33199, USA)

³Самарский филиал физического института имени П.Н. Лебедева РАН (Ново-Садовая 221, Самара, Россия, 443011)

В данной работе рассматривалось взаимодействие циклопентадиенил и инденил радикалов с использованием *ab initio* квантово-механических методов. На первом этапе энергии изомеров рассчитываются с использованием неэмпирических квантово-механических методов теории функционала плотности B3LYP и B2PLYPD3. На следующем этапе энергии интермедиатов уточнялись на основе модифицированной комбинированной схемы, включающей расчетные методы высокого уровня. Показано, что основными продуктами реакции выступают фенантрен, антрацен, бензоазулен и бензофульвален.

Ключевые слова: полициклические ароматические углеводороды (ПАУ), сажа, циклопентадиенил, инденил, *ab initio* расчеты.

1. ВВЕДЕНИЕ

Полициклические ароматические углеводороды (ПАУ) являются одними из самых распространенных загрязнителей и служат в качестве предшественников в образовании сажи [1-7], оказывая огромное воздействие на окружающую среду и здоровье. Формирование сажи начинается с образования простейших ПАУ, их дальнейшего роста, образования зародышей сажи и их коагуляции.

В работе Kislov и др. [8] рассматривались теоретические исследования реакции взаимодействия пятичленных углеродных колец C_5H_5 и C_5H_4 методами G3(MP2, CC)//B3LYP. В результате данных исследований было показано, что конечными продуктами могут быть интересующие нас ароматические углеводороды нафталин и азулен ($C_{10}H_8$), являющиеся изомерами. Также данная реакция была рассмотрена более подробно в работе Mebel и др. [9].

Данная работа являет собой усложненное исследование взаимодействия пятичленных колец на примере реакции $C_9H_7 + C_5H_5$ и позволит найти общие закономерности в будущих, более сложных, исследованиях реакций горения, включающих в себя идентичные случаи ассоциации и конденсации пятичленных и шестичленных колец.

2. МЕТОДОЛОГИЯ

Для исследования продуктов реакции $C_9H_7 + C_5H_5$ и энергетически оптимальных путей нахождения поверхности потенциальной энергии и констант скоростей были применены неэмпирические расчеты. Геометрии реагентов, продуктов, промежуточных и переходных состояний, участвующих в исследуемой реакции, были оптимизированы с использованием гибридного метода функционала плотности B3LYP с дальнейшим уточнением при помощи двойного гибридного метода функционала плотности B2PLYPD3 с базисным набором 6-311G**, который является наиболее полным. Начальный расчет энергий интермедиатов происходил в программном пакете Gaussian [10]. Так же были вычислены колебательные частоты и энергии нулевых колебаний E(ZPE) аналогичными методами. Получившиеся стационарные точки были охарактеризованы как локальные минимумы или переходные состояния в зависимости от числа мнимых частот. Полные энергии для поверхностей потенциальной энергии были уточнены с использованием модифицированной комбинированной схемы расчета:

 $E_0[(MP2, G3, CCSD)] = E[CCSD(T)/6-311G^{**}] + E[MP2/G3Large] - E[MP2/6-311G^{**}] + E(ZPE) = E[CCSD(T)/6-311G^{**}] + \Delta E_{MP2} + E(ZPE),$

где CCSD(T) – метод связанных кластеров (программный пакет Molpro [11]);

MP2 – метод Меллера-Плессе второго порядка с базисами 6-311G** и G3Large;

 ΔE_{MP2} – поправка расчетов методом MP2.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 представлены пути реакции взаимодействия инденил и циклопентадиенил радикалов при рассмотрении случая с углеродной связью. Отрыв водорода от C_5H_5 может привести к безбарьерному образованию как изомера W1, так и образованию изомера WW1, энергия которых на 75,2 и 74,2 ккал/моль выше энергии начального состояния, соответственно. При отсоединении водорода от данных двух интермедиатов возможно образование

продукта P4f (бензофульвален) с высокой относительной энергией 114,4 ккал/моль. Для первого случая из состояния W1 возможны переходы в состояния W2-1 и W2-2, которые различаются внутренней связью колец инденила и C₅H₄. Локальный минимум W2-1 характеризуется двойной связью с углеродом, создавая треугольное углеродное кольцо. Далее связь одного пятичленного углеродного кольца разрывается, образуя второе шестичленное кольцо. Данный локальный минимум W3-1 имеет энергию 78,2 ккал/моль. В дальнейшем возможны переходы в состояния W4, W4-1a и W3-2. При переходе в состояние W4 создается C-C соединение между пятичленным и шестичленным кольцами, тогда как в состоянии локального минимума W4-1a происходит раскрытие пятичленного кольца. Изомер W4 в дальнейшем преобразуется в локальный минимум W52 из конденсированных колец с крайне низкой энергией 60,7 ккал/моль, для образования которого разрывается C-C связь. В конечном итоге, после отрыва водорода образуется конечная структура P2p (фенантрен) с энергией 67,5 ккал/моль.



Puc.1. Схема изомеризаций при ассоциации циклопентадиенил и инденил радикалов. Относительные энергии представлены соответственно указанному методу (ккал/моль).

С другой стороны, изомер W4-1а может быть изомеризован в состояния W5-1a или W42a, ведущее к фенантрену через аналогичное изомеру W5-2 состояние W5-1. Состояние W5-1a в дальнейшем так же после отсоединения водорода образует конечный продукт P1a (антрацен), представляющий собой три линейно конденсированных бензольных кольца и являющееся изомером фенантрена. Энергия антрацена составляет 73,4 ккал/моль, что на 5,9 ккал/моль выше энергии фенантрена. Видно, что цепочка перехода к антрацену W4-1a > W5-1a > P1a требует больших энергетических затрат относительно множественных путей, ведущих к фенантрену, которые требуют меньших затрат. Данное условие позволяет говорить о том, что более предпочтительным будет является образование фенантрена относительно антрацена.

Изомер W2-2 содержит двойную связь между атомами углерода пятичленного кольца и, аналогично предыдущему пути развития, в пятичленном кольце также разрывается С-С связь. После отсоединения водорода происходит переход к конечному состоянию в виде P3az (бензоазулен) с относительной энергией 103,9 ккал/моль.

Рассматривая второй случай можно увидеть, что наиболее выгодные пути крайне похожи. Из состояния WW1 также возможны переходы в похожие изомеры WW2-1 и WW2-2 с различными связями пятичленных колец, что ведет аналогично к образованию продукта P2p (фенантрена). Также возможна изомеризация в состояние W5-2, представляющая собой миграцию водорода с энергией 99,5 ккал/моль.

Состояние WW2-2 может в дальнейшем изомеризоваться в WW3-2, выходящее также на возможное состояние WW4-2. Видно, что путь к WW3-2 имеет крайне высокие относительные энергии переходных состояний и является невыгодным. При отрыве водорода от интермедиата WW3-2 образуется продукт P3az2 (бензоазулен(2)), являющийся изомером P3az.

На рис. 2 изображены температурные зависимости констант скорости образования продуктов реакции. На рис. 2А видно, что существенно преобладает канал изомеризации из-за очень низкого переходного барьера между изомерами, тогда как дальнейшие потери водорода требуют более серьезных затрат энергии. Внешне картина остается похожей на протяжении всех давлений у всех радикалов, однако, количественно выход продукта бензофульвалена возрастает с повышением давления и температуры. При низких температурах по энтальпии наиболее выгодным продуктом является фенантрен.



Рис.2. Температурная зависимость констант скорости для различных изомеризационных каналов W1 (1 атм (А), 10 атм (Б), 100 атм (В)) и WW1 (1 атм (Г), 10 атм (Г), 10 атм (Д), 100 атм (Е))

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате данной работы были найдены оптимальные пути реакции ассоциированных радикалов С₉H₇ и С₅H₅, вычислены и уточнены энергии

соединений, рассмотрена общая картина образования фенантрена, антрацена, бензоазулена и бензофульвалена.

Показано, что конечная энергия антрацена на 5,9 ккал/моль больше энергии фенантрена при их энтальпиях образования, указывая на энергетическое предпочтение формирования фенантрена над антраценом.

Наиболее выгодным по энтропийному фактору продуктом является бензофульвален, который может образоваться уже после изомеров W1 или WW1 при отрыве H при высокой энергии.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 20-33-90137.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1. Bittner, J. D. and Howard, J. B., Eighteenth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1981, pp. 1105–1116.
- Westmoreland, P. R., Dean, A. M., Howard, J. B., and Longwell, J. P., J. Phys. Chem., 1989, 93, pp. 8171–8180.
- 3. Glassman, I., Combustion, 2d ed., Academic Press, New York, 1987.
- 4. Robaugh, D. A. and Stein, S. E., J. Am. Chem. Soc., 1986, 108, pp. 3224-3229.
- 5. Colussi, A. J., Zabel, F., and Benson, S. W., Int. J. Chem. Kinet., 1977, 9, pp. 161–177.
- 6. Lin, C.-Y. and Lin, M. C., J. Phys. Chem., 1986, 90, pp. 425–431.
- Craig A. Taatjes, David L. Osborn, Talitha M. Selby, Giovanni Meloni, Adam J. Trevitt, Evgeny Epifanovsky, Anna I. Krylov, Baptiste Sirjean, Enoch Dames and Hai Wang, J. Phys. Chem. A, 2010, 114 (9), pp. 3355 – 3370.
- 8. Kislov, V. V. and Mebel, A. M., J. Phys. Chem. A, 2007, 111, pp. 9532-9543.
- Mebel, A. M., Landera, A., Kaiser, R.I., J. Phys. Chem. A, 2017, 121 (5), pp 901–926.
- Curtiss, L. A., Raghavachari, K., Trucks, G. W., and Pople, J. A., J. Chem. Phys. 94:7221 7230 (1991); Pople, J. A., Head-Gordon, M., Fox, D. J., Raghavachari, K., and Curtiss, L. A., J. Chem. Phys. 90:5622–5629 (1989); Curtiss, L. A., Jones, C., Trucks, G. W., Raghavachari, K., and Pople, J. A., J. Chem. Phys. 93,1990, pp. 2537–2545.
- Werner, Hans-Joachim, et al. "Molpro: a general-purpose quantum chemistry program package." Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science 2.2 (2012), pp. 242-253.

RESEARCH OF THE CYCLOPENTADIENYL AND INDENYL RADICALS REACTION POTENTIAL ENERGY SURFACE

V.S. Krasnoukhov¹, M.V. Zagidullin^{1,2}, V.N. Azyazov^{1,2}, A.M. Mebel^{1,3}

¹Samara National Research University (Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086), ²Florida International University, Miami, USA (SW 8 th St, Miami, 33199, USA), ³Lebedev Physical Institute, Samara Branch (Novo-Sadovaya str., 221, Samara, Russia, 443011),

In this work, we considered the interaction of cyclopentadienyl and indenyl radicals using ab initio quantum mechanical methods. At the first stage, isomer energies are calculated using non-empirical quantum-mechanical methods of the density functional theory B3LYP and B2PLYPD3. At the next stage, the energies of the intermediates were refined based on a modified combined scheme, including high-level calculation methods. It was shown that the main reaction products are phenanthrene, anthracene, benzoazulene and benzofulvalene.

Keywords: PAH, soot, indenyl, cyclopentadienyl, ab initio calculations.

РАЗРАБОТКА ТАБЛЕТОК ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ В ТЕРАГЕРЦОВОМ ДИАПАЗОНЕ ЧАСТОТ

А.А. Лыкина¹, О.А. Кислова¹, В.Г. Булгакова², Д.В. Королев³

¹Университет ИТМО

 (197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., д. 49, литер А)
 ²ФГУП «Крыловский государственный научный центр», (193230, Санкт-Петербург, Октябрьская наб., 44)
 ³ФГБУ «НМИЦ им. В. А. Алмазова» Минздрава России (197341, Санкт-Петербург, ул. Аккуратова, д. 2) e-mail: zuum63@mail.ru

представлена разработка таблеток В работе для исследования терагерцовых оптических свойств биологических объектов с помощью коммерческого терагерцового трансмиссионного спектрометра (TeraPulse 4000, компания TeraView, Великобритания). В процессе исследования были получены оптические параметры (показатель преломления и коэффициент поглощения) таких материалов, как: парафин, диоксид кремния, оксид политетрафторэтилена (PTFE) алюминия, И политерафторэтилена с добавлением лактозы и чистой лактозы в терагерцовом диапазоне частот. Кристаллические материалы имеют высокий коэффициент поглощения в диапазоне 0.2-1.4 ТГц. Наиболее подходящим из рассмотренных материалов для создания таблетки является полимер РТFE, который обладает низким значением коэффициента поглощения на исследуемом диапазоне частот.

Ключевые слова: терагерцовая спектроскопия, таблетка, кристаллические вещества, полимер, лактоза.

1. ВВЕДЕНИЕ

Терагерцовое (ТГц) излучение и технологии на его основе активно развиваются и все шире используются во многих областях науки и техники, медицинскую диагностику [1]. В процессе включая терагерцовой спектроскопии энергия ТГц электромагнитного поля находится в диапазоне микроджоулей, что означает, что энергия импульса является относительно низкой и, следовательно, подходит для неразрушающего, бесконтактного, неионизирующего анализа объектов. Благодаря данным особенностям ТГц спектроскопия активно используется для получения информации 0
спектральных свойствах и внутренней структуре биологических объектов, таких как ткани и жидкие образцы [2].

Большинство исследований в ТГц спектроскопии сосредоточены на получении полной спектральной характеристики образца. Для таких исследований важным фактором является качественная пробоподготовка объекта, позволяющая получить надежные спектры. При исследовании биологических образцов мягких прослеживается жидких И сильное поглощение воды [3], что затрудняет получение специфических линий поглощения исследуемых образцов в терагерцовом диапазоне спектра. Альтернативным более точным И методом получения оптических характеристик биологических образцов оказывается исследование в твердом обезвоженном состоянии.

Таким образом, целью данной работы является разработка специальных проб в виде таблеток для проведения спектральных исследований в ТГц диапазоне спектра с целью определения оптических свойств биологических веществ в твердом состоянии.

2. ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

2.1. Экспериментальная установка

Измерения проводились на коммерческом ТГц спектрометре TeraPulse 4000 компании TeraView (Великобритания), имеющем в качестве накачки ТГц излучателя фемтосекундный титан-сапфировый лазер с центральной длиной волны 800 нм и длительностью импульса 100 фс. Отклик образца регистрировался с помощью фотопроводящей антенны, аналогичной той, что использовалась для генерации зондирующего широкополосного терагерцового излучения.

Прибор генерировал импульсы широкополосного терагерцового излучения в диапазоне от 0,2 ТГц до 1,4 ТГц со спектральным разрешением 0,03 ТГц в режиме быстрого сканирования (30 сканирований в 1 сек).

Таблетки помещали в держатель для образцов в модуле на пропускание. ТГц излучение фокусировалось в центре таблетки. Было записано девятьсот сканирований и усреднено в центральной точке для каждого тестового образца. Пространство, через которое проходит ТГц луч, продувалось азотом, чтобы уменьшить поглощение, вызванное водяным паром в воздухе.

145

2.2. Материалы и методы подготовки образцов

В эксперименте было изготовлено 10 таблеток из кристаллических веществ и полимеров: диоксид кремния (SiO₂), оксид алюминия (Al₂O₃, сапфир) и политетрафторэтилен (PTFE).

Таблетки из чистых веществ SiO₂ и Al₂O₃ были хрупкими и разрушались. Поэтому порошки образцов SiO₂ и Al₂O₃ смешивали в отношении 1:1 по массе с 2 % раствором парафина в гексане до полного высыхания. В изготовленных таблетках парафин являлся связующим веществом, так как его полезным физическим свойством является пластичность. Его составляло 1 % от общей массы смеси. Затем полученные порошки образцов SiO₂ и Al₂O₃ прессовали на ручном гидравлическом прессе при давлении 0,5 тонн.

Каждый образец прессовали в таблетку диаметром 5 мм, толщина каждого образца составляла от 3 до 1,1 мм.

Образцы РТFE, смесь политетрафторэтилена с лактозой (РТFE+L) и чистое вещество лактоза были предоставлены готовыми в наборе TeraPulse 4000. Данные образцы представляют из себя спрессованные и сформированные в таблетки диаметром 13 мм и толщиной 3 мм.

2.3. Результаты

В ходе выполнения работы были получены ТГц оптические характеристики: показатель преломления (Рис. 1(б)) и коэффициент поглощения (Рис. 1(а)), различных материалов в терагерцовом диапазоне частот от 0,2 до 1,4 ТГц.

Создавая таблетки из порошков диоксида кремния и оксида алюминия, прибегали к добавлению парафина. Поэтому, для получения корректных результатов спектров образцов, был исследован парафин на наличие собственных спектральных линий.

Из рисунка 1 (а) видно, что у всех материалов коэффициент поглощения возрастает на всем диапазоне исследуемого спектра. Материалы, относящиеся к кристаллической группе, имеют довольно большие значения коэффициента поглощения. В сравнении с ними полимер РТFE является наилучшим материалом для создания таблетки, так как имеет низкие значения коэффициента поглощения. Сравним ТГц оптические характеристики таблеток из смеси полимера РTFE с лактозой, и чистым веществом лактоза (Рис. 2).

146



Рис.1. Коэффициент поглощения (а) и показатель преломления (б) таблеток из кристаллических веществ и полимера: диоксид кремния (SiO₂), оксид алюминия (Al₂O₃), политетрафторэтилен (PTFE) и парафин (Parafin)



Рис.2. Коэффициент поглощения (а) и показатель преломления (б) таблеток из смеси политетрафторэтилена с лактозой (PTFE+L) и чистое вещество лактоза (Lactose)

Рассматривая спектры ТГц оптических свойств смеси РТFE с лактозой и чистого вещества лактозы, можно заметить характерные линии поглощения биологического вещества, которые совпадают друг с другом на всем спектральном диапазоне. Заметим, что полимер РTFE дает незначительный вклад в спектр показателя преломления лактозы, также усиливает поглощение лактозы. Следовательно, материал PTFE наиболее подходит в качестве носителя таблетки для спектральных исследований.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе была разработана методика создания таблеток для исследования биологических объектов с помощью трансмиссионной импульсной ТГц спектроскопии во временной области. Основываясь на полезных свойствах и легкодоступности материалов для лабораторных исследований, были выбраны материалы: оксид алюминия, диоксид кремния, политетрафторэтилен.

При анализе ТГц оптических характеристик образцов было выявлено, наилучшим образцом для создания таблеток является полимер РТFE, благодаря его низкому коэффициенту поглощения и линейности показателя преломления в диапазоне 0,2 – 2 ТГц. Из – за высокой прозрачности данного материала для ТГц волн, при исследовании таблетки РТFE с добавлением лактозы, прослеживаются характерные пики поглощения биологического материала лактозы.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 17-00-00275 (17-00-00272).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. J.H. Son, S.J. Oh, H. Cheon, Potential clinical applications of terahertz radiation. //J. of Applied Physics, 2019, v. 125, p. 190901.
- В.Л. Вакс, Е.Г. Домрачева, Е.А. Собакинская, М.Б. Черняева, Применение методов и средств нестационарной спектроскопии субТГц и ТГц диапазонов частот для неинвазивной медицинской диагностики. // Наносистемы: физика, химия, математика, 2011, 16 с.
- O. A. Smolyanskaya, N. V. Chernomyrdin, A. A. Konovko, K. I. Zaytsev, I. A. Ozheredov, O. P. Cherkasova,... & J. L. Coutaz, Terahertz biophotonics as a tool for studies of dielectric and spectral properties of biological tissues and liquids. // Progress in Quantum Electronics, 2018, v. 62, p. 1-77.

DEVELOPMENT OF PELLETS FOR RESEARCHING THE BIOLOGICAL OBJECTS IN THE TERAHERTZ FREQUENCY RANGE

A.A. Lykina¹, V.G. Bulgakova², D.V. Korolev³, O.A. Smolyanskaya¹

¹ITMO University

(197101, St. Petersburg, Kronverkskiy pr., 49, letter A)
²FSUE "Krylov State Research Center",
(193230, St. Petersburg, Oktyabrskaya nab., 44)
³FSBI NMITs im. V. A. Almazov "Ministry of Health of Russia
(197341, St. Petersburg, Akkuratova st., 2)
e-mail: zuum63@mail.ru

The work presents the development of pellets for studying terahertz properties of biological objects using a commercial terahertz spectrometer (TeraPulse 4000, TeraView, Great Britain) in transmission mode. Terahertz optical parameters (refractive index and absorption coefficient) of materials such as paraffin, potassium bromide, silicon dioxide, aluminum oxide, polytetrafluoroethylene and plitefluoroethylene with the addition of lactose were obtained during the study. Crystalline materials have a high absorption coefficient. A suitable material for making a pellet is polytetrafluoroethylene, which has a low absorption coefficient over the entire terahertz frequency range.

Key words: terahertz spectroscopy, pellet, crystalline substances, polymer, lactose.

ЭЛЕКТРОННЫЙ ЛЭМБОВСКИЙ СДВИГ (2Р-28) В МЮОННЫХ ИОНАХ (µeLi), (µeBe), (µeB)

Ф.А. Мартыненко¹, А.Е. Дорохов^{1,2}, А.П. Мартыненко¹

¹Самарский национальный исследовательский университет, (443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34) ²Лаборатория Теоретической Физики ОИЯИ (141980 Дубна, Московской обл., Россия) e-mail: f.a.martynenko@gmail.com

В рамках метода теории возмущений по постоянной тонкой структуры и отношению масс электрона и мюона проведен расчет электронного лэмбовского сдвига (2P-2S) и интервала (2S-1S) в легких мюонных ионах. Учтены поправки первого и второго порядков теории возмущений. Полученные значения для лэмбовского сдвига (2P-2S) и интервала (2S-1S) можно использовать для сравнения с будущими экспериментальными данными и проверки квантовой электродинамики.

Ключевые слова: квантовая электродинамика, мюонные атомы, тонкая структура спектра.

1. ВВЕДЕНИЕ

бериллия и бора (µeLi), (µeBe), (µeB) Мюонные ионы лития, представляют собой простейшие трёхчастичные системы, состоящие из ядра, отрицательно-заряженного мюона и электрона. Основное взаимодействие в этой системе определяется кулоновским взаимодействием заряженных Существуют способа вычисления уровней частиц. два энергии В трехчастичных мюонных атомах. Первый подход, использованный в [1-5], основан на методе теории возмущений (ТВ) для уравнения Шрёдингера. В этом случае существует аналитическое решение для трёхчастичной волновой функции в исходном приближении, которое позволяет учитывать различные поправки к уровням энергии от других взаимодействий по теории возмущений. В другом подходе в [6-10] для нахождения уровней энергии трех частиц использовался вариационный метод в квантовой механике. Он позволил получить численные значения уровней энергии трёхчастичной системы с очень высокой точностью. Цель данной работы состоит в расчете электронного лэмбовского сдвига (2S-2P) и энергетического интервала (2S-1S) в рамках первого подхода из [3-5] для мюонных ионов с зарядом ядер 3, 4, 5.

150

Отметим, что сверхтонкая структура мюонного гелия (µeHe) была измерена в [11]. Измерение других энергетических интервалов, таких как (2S-1S), (2S-2P), в мюонном гелии или мюонных ионах лития, бериллия и бора вполне осуществимо.

2. ОБЩИЙ ФОРМАЛИЗМ

Связанные частицы в ионах мюонного лития, бериллия и бора имеют различные массы $m_e \ll m_\mu \ll M$ (M – масса ядра). В результате мюон и ядро образуют псевдоядро, и в первом приближении ион мюонного лития, бериллия и бора может рассматриваться как двухчастичная система. Гамильтониан такой системы имеет следующую общую структуру [3-5]:

$$H = H_0 + \Delta H + \Delta H^{rec} + \Delta H^{vp} + \Delta H^{str} + \Delta H^{vert}, \qquad (1)$$

$$H_{0} = -\frac{1}{2M_{\mu}}\nabla_{\mu}^{2} - \frac{1}{2M_{e}}\nabla_{e}^{2} - \frac{3\alpha}{x_{\mu}} - \frac{2\alpha}{x_{e}}, \Delta H = \frac{\alpha}{x_{\mu e}} - \frac{\alpha}{x_{e}}, \Delta H^{rec} = -\frac{1}{M}\nabla_{\mu} \cdot \nabla_{e},$$
⁽²⁾

где \vec{x}_{μ} и \vec{x}_{e} - координаты мюона и электрона по отношению к ядру, $M_{e} = \frac{m_{e}M}{m_{e}+M}$ и $M_{\mu} = \frac{m_{\mu}M}{m_{\mu}+M}$ приведённые массы подсистем электрон-ядро и мюон-ядро. Члены гамильтониана ΔH^{vp} , ΔH^{str} и ΔH^{vert} описывают поправки на поляризацию вакуума, структуру ядра и вершинную поправку. В исходном приближении волновая функция системы, в которой мюон находится в основном состоянии, а электрон в состоянии 2S или 2P имеет вид:

$$\Psi_{2S}(\vec{x}_{\mu}, \vec{x}_{e}) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} (W_{\mu}W_{e})^{3/2} (1 - \frac{1}{2}W_{e}x_{e})e^{-\frac{1}{2}W_{e}x_{e}}e^{-W_{\mu}x_{\mu}},$$
(3)

$$\Psi_{2P}(\vec{x}_{\mu}, \vec{x}_{e}) = \frac{1}{2\sqrt{6\pi}} (W_{\mu}W_{e})^{3/2} W_{e} x_{e}(\vec{e}\vec{n}) e^{-\frac{1}{2}W_{e}x_{e}} e^{-W_{\mu}x_{\mu}}, \tag{4}$$

Основной вклад в оператор возмущения определяется ΔH . В первом порядке теории возмущений необходимо вычислить два матричных элемента:

$$\Delta E^{(1)}(2S) = \langle \Psi_{2S} \left| \frac{\alpha}{x_{\mu e}} - \frac{\alpha}{x_e} \right| \Psi_{2S} \rangle, \quad \Delta E^{(1)}(2P) = \langle \Psi_{2P} \left| \frac{\alpha}{x_{\mu e}} - \frac{\alpha}{x_e} \right| \Psi_{2P} \rangle.$$
⁽⁵⁾

Для 2S-уровня электрона матричный элемент имеет вид ($a_1 = W_e/W_{\mu}$):

$$\Delta E^{(1)}(2S) = \frac{(W_e W_\mu)^3}{8\pi^2} \int d\vec{x}_e d\vec{x}_\mu (1 - \frac{1}{2} W_e x_e)^2 e^{-2W_\mu x_\mu} e^{-W_e x_e} \frac{\alpha}{|\vec{x}_\mu - \vec{x}_e|} = = \alpha \frac{W_e^3}{W_\mu^2} \frac{(8 + a_1(20 + a_1(12 + a_1(10 + a_1))))}{a_1^2(2 + a_1)^5} = W_e \alpha (\frac{1}{4} - \frac{1}{4} a_1^2 + \frac{5}{8} a_1^3...).$$

Для 2Р-состояния электрона матричный элемент также может быть вычислен аналитически:

$$\Delta E^{(1)}(2P) = \frac{(W_e W_\mu)^3}{96\pi^2} \int d\vec{x}_e d\vec{x}_\mu (W_e x_e)^2 e^{-2W_\mu x_\mu} e^{-W_e x_e} \frac{\alpha}{|\vec{x}_\mu - \vec{x}_e|} =$$
(7)

$$=\frac{\alpha W_e}{4(2+a_1)^5}((2+a_1)^5-6a_1^4-a_1^5)=W_e\alpha(\frac{1}{4}-\frac{3}{64}a_1^4+\frac{7}{64}a_1^5\dots).$$

Мы видим, что поправки на отдачу имеют для 2Р-состояния более высокую степень малости, чем для 2S. Основной вклад в электронный лэмбовский сдвиг имеет порядок $O(\alpha^2)$:

$$\Delta E(2P - 2S) = W_e \alpha \frac{a_1^2}{4} = \frac{\alpha^2}{4} \frac{(Z - 1)^3 M_e^3}{Z^2 M_{\mu}^2}.$$
(8)

Таким образом, электронный лэмбовский сдвиг возникает в таких трехчастичных системах в порядке $O(\alpha^2)$ благодаря кулоновскому взаимодействию всех частиц. Заметим, что поправка на отдачу ядра из (2) < $\Psi |\Delta H_{rec}|\Psi >$ равна 0 для обоих состояний электрона.

Во втором порядке теории возмущений поправка к уровням энергии определяется следующим выражением:

$$\Delta E^{(2)} = \int \psi_{\mu 0}(\vec{x}_{\mu}) \psi_{e1}(\vec{x}_{e}) \left(\frac{\alpha}{x_{\mu e}} - \frac{\alpha}{x_{e}}\right) \sum_{n,n'} \frac{\psi_{\mu n}(\vec{x}_{\mu}) \psi_{en'}(\vec{x}_{e}) \psi_{\mu n}(\vec{x}_{\mu'}) \psi_{en'}(\vec{x}_{e})}{E_{\mu 0} + E_{e1} - E_{\mu n} - E_{en'}}$$
(9)

$$\times \psi_{\mu 0}(\vec{x}_{\mu}') \psi_{e1}(\vec{x}_{e}') \left(\frac{\alpha}{x_{\mu e}} - \frac{\alpha}{x_{e}}\right) d\vec{x}_{\mu} d\vec{x}_{\mu}' d\vec{x}_{e} d\vec{x}_{e}',$$

где $E_{\mu 0}$ - энергия мюона в основном состоянии, E_{e1} – энергия электрона в возбужденном состоянии.

Разобьем этот сложный матричный элемент на несколько более простых, выделяя определенные состояния мюона. Пусть для мюона в промежуточном состоянии n=0. Тогда из (9) получим:

$$\Delta E^{(2)} = \int \psi_{\mu 0}(\vec{x}_{\mu}) \psi_{e1}(\vec{x}_{e}) \left(\frac{\alpha}{x_{\mu e}} - \frac{\alpha}{x_{e}}\right) \psi_{\mu 0}(\vec{x}_{\mu}) \psi_{\mu 0}(\vec{x}_{\mu}') \sum_{n,n'} \frac{\psi_{en'}(\vec{x}_{e}) \psi_{en'}(\vec{x}_{e})}{E_{e1} - E_{en'}}$$
(10)

$$\times \psi_{\mu 0}(\vec{x}_{\mu}') \psi_{e1}(\vec{x}_{e}') \left(\frac{\alpha}{x_{\mu e}} - \frac{\alpha}{x_{e}}\right) d\vec{x}_{\mu} d\vec{x}_{\mu}' d\vec{x}_{e} d\vec{x}_{e}'$$

Стоящая здесь редуцированная кулоновская функция Грина электрона для возбужденного состояния с n=2 имеет две части. Ненулевой вклад в данный матричный элемент дает только часть \tilde{G}_{2s}^{e} , которая имеет следующий вид:

$$\begin{split} \tilde{G}_{2S}^{e}(r_{1},r_{2}) &= -\frac{(Z-1)\alpha M_{e}^{2}}{16\pi x_{1}x_{2}}e^{-(x_{1}+x_{2})}g_{2S}(x_{1},x_{2}), \end{split} \tag{11}$$

$$g_{2S}(x_{1},x_{2}) &= 8x_{<} - 4x_{<}^{2} + 8x_{>} + 12x_{<}x_{>} - 26x_{<}^{2}x_{>} + 2x_{<}^{3}x_{>} - 4x_{>}^{2} - 26x_{<}x_{>}^{2} + 23x_{<}^{2}x_{>}^{2} - x_{<}^{3}x_{>}^{2} + 2x_{<}x_{>}^{3} - x_{<}^{2}x_{>}^{3} + 4e^{x_{<}}(1-x_{<})(x_{>}-2)x_{>} + 4(x_{<}-2)x_{<}(x_{>}-2)x_{>}[-2\gamma + Ei(x_{<}) - ln(x_{<}) - ln(x_{>})], \end{split}$$

где $x_{<} = min(x_{1}, x_{2}), x_{>} = max(x_{1}, x_{2}), x_{i} = W_{e}r_{i}, \gamma$ - константа Эйлера. Матричные элементы по координатам мюона вычисляются аналитически:

$$V_{\mu}(x_e) = \int \psi_{\mu 0} \left(\vec{x}_{\mu} \right) \left(\frac{\alpha}{x_{\mu e}} - \frac{\alpha}{x_e} \right) \psi_{\mu 0}(\vec{x}_{\mu}) d\vec{x}_{\mu} = -\frac{\alpha}{x_e} (1 + W_{\mu} x_e) e^{-2W_{\mu} x_e}.$$
(12)

Оставшееся интегрирование по координатам электрона тоже можно выполнить аналитически, получив в итоге следующий результат:

$$\Delta E_{1}^{(2)} = \int \psi_{e1} \left(\vec{x}_{e} \right) \left(-\frac{\alpha}{x_{e}} \right) \left(1 + W_{\mu} x_{e} \right) e^{-2W_{\mu} x_{e}} d\vec{x}_{e} \int \psi_{e1} \left(\vec{x}_{e}^{'} \right) \left(-\frac{\alpha}{x_{e}^{'}} \right) \left(1 + W_{\mu} x_{e}^{'} \right) \times$$

$$e^{-2W_{\mu} x_{e}^{'}} d\vec{x}_{e}^{'} \tilde{G}_{2S}^{e} \left(x_{e}, x_{e}^{'} \right) = \frac{M_{e} \alpha^{2}}{8} \left(\frac{26}{16} \left(\frac{W_{e}}{W_{\mu}} \right)^{3} - \left(\frac{W_{e}}{W_{\mu}} \right)^{4} \left(\frac{191}{32} + 4 \ln \frac{W_{e}}{W_{\mu}} \right) \right),$$
(13)

где окончательный ответ представлен в виде разложения по степеням отношения эффективных масс частиц M_e , M_μ . Аналогично можно рассмотреть другой вклад, когда мюон находится в возбужденных промежуточных состояниях $n \neq 0$. Данный вклад можно представить в виде:

$$\Delta E_{2}^{(2)} = \int \psi_{\mu 0}(\vec{x}_{\mu}) \psi_{e1}(\vec{x}_{e}) \frac{\alpha}{|\vec{x}_{\mu} - \vec{x}_{e}|} d\vec{x}_{\mu} d\vec{x}_{e} \sum_{n \neq 0} \psi_{\mu n}(\vec{x}_{\mu}) \psi_{\mu n}(\vec{x}_{\mu}') \times G^{e}(\vec{x}_{e}, \vec{x}_{e}', z) \frac{\alpha}{|\vec{x}_{\mu} - \vec{x}_{e}|} \psi_{\mu 0}(\vec{x}_{\mu}') \psi_{e1}(\vec{x}_{e}') d\vec{x}_{\mu}' d\vec{x}_{e}'$$
(14)

Стоящая здесь кулоновская функция Грина электрона зависит от параметра $z = E_{\mu 0} - E_{\mu n} + E_{e1}$. В ведущем порядке по отношению масс частиц выберем $G^{e}(\vec{x}_{e}, \vec{x}_{e}', z)$ в виде функции Грина свободного электрона:

$$G^{e}(\vec{x}_{e}, \vec{x}_{e}', z) = -\frac{M_{e}}{2\pi} \frac{1}{\left|\vec{x}_{\mu} - \vec{x}_{e}\right|} e^{-b\left|\vec{x}_{e} - \vec{x}_{e}'\right|}, b = \sqrt{2M_{e}(E_{\mu 0} - E_{\mu n} + E_{e1})}$$
(15)

Тогда вторая часть поправки во втором порядке ТВ примет вид:

$$\Delta E_{2}^{(2)} = -\frac{M_{e}\alpha^{2}}{2\pi} \int \psi_{\mu0}(\vec{x}_{\mu})\psi_{e1}(\vec{x}_{e})\frac{1}{|\vec{x}_{\mu} - \vec{x}_{e}|} d\vec{x}_{\mu}d\vec{x}_{e} \sum_{n\neq 0}\psi_{\mu n}(\vec{x}_{\mu})\psi_{\mu n}(\vec{x}_{\mu}') \times \frac{\alpha}{|\vec{x}_{\mu} - \vec{x}_{e}|}\psi_{\mu 0}(\vec{x}_{\mu}')\psi_{e1}(\vec{x}_{e}')d\vec{x}_{\mu}'d\vec{x}_{e}'$$
(16)

Выполним вначале интегрирование по \vec{x}'_e , заменяя значение волновой функции электрона ее значением в нуле:

$$I = \int d\vec{x}'_{e} \psi_{e1}(\vec{x}'_{e}) \frac{1}{|\vec{x}_{e} - \vec{x}'_{e}||\vec{x}_{e} - \vec{x}'_{\mu}|} = \frac{4\pi}{b^{2}} \frac{1}{|\vec{x}_{e} - \vec{x}'_{\mu}|} \left(1 - e^{-b|\vec{x}_{e} - \vec{x}'_{\mu}|}\right) =$$
(17)
$$4\pi \left[\frac{1}{b} - \frac{1}{2}|\vec{x}_{e} - \vec{x}'_{\mu}| + \frac{b}{6}|\vec{x}_{e} - \vec{x}'_{\mu}|^{2} + \cdots\right]$$

где мы также выполнили разложение по $|\vec{x}_e - \vec{x}'_{\mu}|$. Слагаемое 1/b в квадратных скобках обращается в нуль в силу ортогональности волновых функций мюона. Оставляя лидирующий член в квадратных скобках, воспользуемся соотношением полноты:

$$\sum_{n \neq 0} \psi_{\mu n}(\vec{x}_3) \psi_{\mu n}^*(\vec{x}_2) = \delta(\vec{x}_3 - \vec{x}_2) - \psi_{\mu 0}(\vec{x}_3) \psi_{\mu 0}^*(\vec{x}_2).$$
(18)

Прямое вычисление интегралов с функциями из правой части (15) дает следующие результаты:

$$\Delta E_{21}^{(2)} = -16M_e \alpha^2, \ \Delta E_{21}^{(2)} = M_e \alpha^2 (16 + \frac{105}{32} \frac{W_e^3}{W_u^3})$$
(19)

Вычислим теперь поправку второго порядка теории возмущений для 2Рсостояния. Выберем вначале мюон в промежуточном состоянии с *n* = 0. Такой вклад будет определяться следующим интегралом:

$$\Delta E_{1}^{(2)} = \int \psi_{e1}(\vec{x}_{e}) \left(-\frac{\alpha}{x_{e}}\right) \left(1 + W_{\mu} x_{e}\right) e^{-2W_{\mu} x_{e}} d\vec{x}_{e} \int \psi_{e1}(\vec{x}_{e}) \left(-\frac{\alpha}{x_{e}'}\right) \times (1 + W_{\mu} x_{e}') e^{-2W_{\mu} x_{e}'} dx_{e}' \tilde{G}_{2P}^{e}(x_{e}, x_{e}')$$

$$(20)$$

Редуцированная кулоновская функция Грина электрона для возбужденного состояния 2Р имеет следующий вид:

$$\tilde{G}(2P) = -\frac{Z\alpha\mu^2}{36x_1^2 x_2^2} e^{-\frac{x_1 + x_2}{2}} \frac{3}{4\pi} \frac{(\vec{x}_1 \vec{x}_2)}{x_1 x_2} g_{2P}(x_1, x_2),$$
(21)

$$g_{2P}(x_1, x_2) = 24x_{<}^3 + 36x_{<}^3x_{>} + 36x_{<}^3x_{>}^2 + 24x_{>}^3 + 36x_{<}x_{>}^3 + 36x_{<}x_{>}^3 + 49x_{<}^3x_{>}^3 - 3x_{<}^4x_{>}^3 - 12e^{x_{<}}(2 + x_{<} + x_{<}^2)x_{>}^3 - 3x_{<}^3x_{>}^4 + 12x_{<}^3x_{>}^3[-2C + Ei(x_{<}) - ln(x_{<}) - ln(x_{>})].$$

Как и в случае 2S-состояния все интегралы по координатам могут быть вычислены аналитически. Разлагая результат по степеням W_e/W_{μ} , получим:

$$\Delta E_3^{(2)} = -M_e \alpha^2 \left[\frac{7}{2048} \frac{W_e^5}{W_\mu^5} - \frac{9}{8192} \frac{W_e^6}{W_\mu^6} \dots \right].$$
(22)

Как следует из разложения (22), порядок поправки для 2Р-состояния возрастает по сравнению с 2S-состоянием электрона, а ее величина значительно уменьшается. Такая же ситуация имеет место и для второго вклада для 2Р-состояния, связанного с мюонными возбуждениями. Очевидно, что параметром разложения, который работает в рамках теории возмущений, является отношение масс частиц $\frac{M_e}{M_u} \approx \frac{m_e}{m_u}$.

Полный вклад оператора возмущений *ΔH*, полученный в первом и втором порядках теории возмущений равен:

$$\Delta E(2P-2S) = M_e \alpha^2 \left[\frac{(Z-1)}{4} \frac{W_e^2}{W_\mu^2} + \frac{197}{64} \frac{W_e^3}{W_\mu^3} + \left(\frac{191}{256} + \frac{1}{2} \ln \frac{W_e}{W_\mu}\right) \frac{W_e^3}{W_\mu^3} + \dots\right].$$
(23)

Используя значения фундаментальных параметров теории, можно получить следующие численные оценки электронного лэмбовского сдвига для мюонных ионов лития (${}^{7}_{3}Li$), бериллия (${}^{9}_{4}Be$) и бора (${}^{10}_{5}B$):

$$\Delta E_{Li}(2P - 2S) = 36.02 \,\Gamma \Gamma \mu, \tag{24}$$
$$\Delta E_{Be}(2P - 2S) = 67.56 \,\Gamma \Gamma \mu, \ \Delta E_B(2P - 2S) = 101.73 \,\Gamma \Gamma \mu.$$

В рамках данного метода был выполнен также аналитический расчет электронного энергетического интервала (2S-1S) и получены его численные значения для мюонных ионов лития $\binom{7}{3}Li$, бериллия $\binom{9}{4}Be$) и бора $\binom{10}{5}B$:

$$\Delta E_{Li}^{(2S-1S)} = 9.869 \cdot 10^6 \, \Gamma \Gamma \mu, \ \Delta E_{Be}^{(2S-1S)} = 22.206 \cdot 10^6 \, \Gamma \Gamma \mu, \ \Delta E_B^{(2S-1S)} = 39.477 \cdot (25) \\ 10^6 \, \Gamma \Gamma \mu.$$

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Значения интервалов энергии (24)-(25) получены впервые и могут служить ориентиром при сравнении с будущими экспериментальными данными. Среди других поправок, которые могут улучшить данные результаты необходимо отметить эффект поляризации вакуума в кулоновском потенциале взаимодействия мюона и ядра и поправку на структуру ядра. Известно, что эффект поляризации вакуума дает основной вклад в лэмбовский сдвиг в мюонных двухчастичных атомах. Эти эффекты имеют более высокий порядок малости по постоянной тонкой структуры. Погрешность полученных результатов может быть оценена поэтому по основному неучтенному вкладу порядка $O(\alpha)$ и составляет около 0.5 % (0.10 - 0.40 ГГц для интервала (24)).

Работа Ф. А. Мартыненко поддержана Фондом развития теоретической физики и математики "БАЗИС" (грант No. 19-1-5-67-1).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Lakdawala S. D., Mohr P. J. Hyperfine structure in muonic helium //Physical Review A. – 1980. – T. 22. – №. 4. – C. 1572.
- 2. Yakhontov V. L., Amusia M. Y. Hyperfine splitting computation in the ${}^{1}S_{\frac{1}{2}}^{e} {}^{2}S_{\frac{1}{2}}^{\mu}$ state of the exotic (${}^{4}He^{2+} - \mu^{-}e^{-}$)⁰ 0 and (${}^{3}He^{2+} - \mu^{-}e^{-}$)⁰ atoms //Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. – 1994. – T. 27. – No. 16. – C. 3743.
- 3. Krutov A. A., Martynenko A. P. Ground-state hyperfine structure of the muonic helium atom //Physical Review A. 2008. T. 78. №. 3. C. 032513.
- Krutov A. A., Martynenko A. P. Hyperfine structure of the ground state muonic ³*He* atom //The European Physical Journal D. – 2011. – T. 62. – №. 2. – C. 163.
- 5. Krutov A. A., Martynenko A. P. Hyperfine structure of the excited state ${}^{1}S_{\frac{1}{2}}^{e} {}^{2}S_{\frac{1}{2}}^{\mu}$ of the muonic helium atom //Physical Review A. 2012. T. 86. No. 5. C. 052501.
- 6. Huang K. N., Hughes V. W. Theoretical hyperfine structure of the muonic ³*He* and ⁴*He* atoms //Physical Review A. 1982. T. 26. №. 5. C. 2330.
- Chen M. K. Correlated wave functions and hyperfine splittings of the 2S state of muonic ^{3,4}*He* atoms //Physical Review A. – 1992. – T. 45. – №. 3. – C. 1479.
- 8. Frolov A. M. Properties and hyperfine structure of helium-muonic atoms //Physical Review A. – 2000. – T. 61. – №. 2. – C. 022509.

- 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.
- Karshenboim S. G., Ivanov V. G., Korobov V. I. Low energy levels in neutral muonic helium within a nonrelativistic approach //Physical Review A. – 2018. – T. 97. – №. 2. – C. 022504.
- 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.

ELECTRONIC LAMB SHIFT (2P-2S) IN MUONIC IONS (µeLi), (µeBe), (µeB)

<u>F.A. Martynenko¹</u>, A.E. Dorokhov^{1,2}, A.P. Martynenko¹

 ¹ Samara National Research University, (34, Moskovskoye shosse, Samara, 443086, Russia)
 ² BLTP JINR (141980 Dubna, Moscow region, Russia) e-mail: f.a.martynenko@gmail.com

The electron Lamb shift (2P-2S) and the interval (2S-1S) in light muonic ions are calculated within the framework of the perturbation theory method for the fine structure constant and the electron-muon mass ratio. Corrections of the first and second orders of the perturbation theory are taken into account. The obtained values for the Lamb shift (2P-2S) and the interval (2S-1S) can be used for comparison with future experimental data and verification of quantum electrodynamics.

Keywords: quantum electrodynamics, muonic atoms, fine structure of the spectrum.

РОЛЬ РЕКОМБИНАЦИОННОГО ПРОЦЕССА О+О+М В ГИБЕЛИ О₃

А.А. Першин^{1,2}, К.А. Романюк^{1,2}, А.П. Торбин¹

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: anchizh93@gmail.com

В работе методом время-разрешенной абсорбционной спектроскопии получены временные профили озона после фотолиза в смеси O_3-N_2 . Обнаружено, что основной вклад в гибель озона в постфотолизной зоне вносит реакционный процесс $O_3+O_2^*$, где O_2^* – возбужденная молекула кислорода, формируемая в результате трехчастичной рекомбинации атомов кислорода $O+O+N_2$. На основании созданной в работе кинетической модели и экспериментально полученных временных профилей озона предложены значения констант скорости процессов с участием молекул O_2^* .

Ключевые слова: озон, рекомбинация, электронно- и колебательновозбужденный кислород, лазерный фотолиз, абсорбционная спектроскопия.

1. ВВЕДЕНИЕ

Процессы с участием активных форм кислорода, таких как атомы О, электронно- и колебательно-возбужденные молекулы кислорода и озона О₃, оказывают существенное влияние на атмосферную химию [1], являются ключевыми компонентами кинетики кислородосодержащей плазмы и активной среды кислородно-йодного лазера [2]. Ранее в наших работах [3,4] методом время-разрешенной абсорбционной спектроскопии была исследована кинетика озона после УФ импульсного лазерного фотолиза в смеси O₃-O₂-M. При избытке атомов и молекул кислорода, восстановление озона протекает в трехчастичном процессе $O + O_2 + M \rightarrow O_3(v) + M$, где $O_3(v) -$ молекула колебательно возбужденного озона. Был обнаружен эффект неполного восстановления O₃ в постфотолизной зоне, объясняемый протеканием быстрой реакции O₃(v) с атомарным кислородом О. Однако научный интерес представляет изучение процессов гибели термализованного озона в присутствии других активных форм кислорода.

157

№	Процесс	Константа скорости, T=300 К	Ист.
1	$O + O + N_2 \rightarrow O_2^* + N_2$	$k_1 = 4 \cdot 10^{-33} \text{ см}^6/\text{с}$	[5]
2	$O_2^* + O_3 \rightarrow O + O_2 + O_2$	$k_2 = (2,0\pm0,8) \cdot 10^{-10}$ cm ³ /c	Данная работа
3	$O_2^* + O \rightarrow O_2 + O(^1S)$	$k_3 = 2,1 \cdot 10^{-11} \text{ cm}^3/\text{c}$	[7]
4	$O(^{1}S) + O_{3} \rightarrow$ продукты	$k_4 = 5,8 \cdot 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{c}$	[8]
5	$O_2^* + N_2 \rightarrow O_2 + N_2$	$k_5 = (5,0\pm1,7) \cdot 10^{-15}$ cm ³ /c	Данная работа
6	$O + O_3 \rightarrow O_2 + O_2$	$k_6 = 8 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^3/\text{c}$	[9]
7	$O_2(a^1\Delta) + O_3 \rightarrow O + O_2 + O_2$	$k_7 = 3.8 \cdot 10^{-15} \text{ cm}^{3/2}$	[9]

Таблица 1. Основные процессы, включенные в модель

В работе [5] для описания свечения атмосферы Земли, Венеры и Марса был предложен механизм с участием возбужденных состояний кислорода с избытком электронной и колебательной энергии более 4 эВ, таких как, например, $O_2(X^3\Sigma v>30, A^3\Sigma, A'^3\Delta, c^1\Sigma$ и т.д.) (далее такие состояния будут обозначаться O_2^*), которые формируются в ходе рекомбинационного процесса [5,6]

$$O + O + M \rightarrow O_2^* + M$$

Поскольку в процессе фотолиза смеси O_3 - N_2 образуется большое количество атомов кислорода, то оно будет сопровождаться наработкой значительного количества молекул O_2^* .

В рамках данной работы предложена модель гибели озона после фотолиза в смеси O_3 - N_2 (таблица 1). В рамках представленной схемы не известны константы скорости процессов (2), (3) и (5). Целью данной работы являлось определение вышеупомянутых величин из экспериментальных данных и кинетической модели.

2. ЭКСПЕРИМЕНТ

Экспериментальные данные были получены на установке во многом схожей с использованной ранее в работах [3,4]. Схема экспериментальной установки показана на рисунке 1. Наблюдение временных профилей озона после фотолиза осуществлялось методом абсорбционной УФ спектроскопии. Фотолиз озона производился лазерными импульсами на длине волны 266 нм, обеспечиваемых четвертой гармоникой твердотельного лазера Solar Laser



Рис. 1. Схема и фотография экспериментальной установки

Systems LQ829 в фотолизной ячейке (см. фото). Длительность импульса лазера составляла 10 нс.

Озон нарабатывался с помощью лабораторного озонатора А-с-ГОКСф-5-02-ОЗОН из чистого кислорода O₂ и перед каждым экспериментом накапливался в колбе с охлажденным до -50 °C силикагелем. Остатки молекулярного кислорода удалялись из колбы вакуумированием. Лазерный пучок диаметром 8 мм распространялся перпендикулярно потоку газовой смеси O₃-N₂. Концентрация озона измерялась по поглощению озоном УФ света вблизи пика полосы Хартли. Излучение от УФ светодиода UVTOP255 доставлялось в зону фотолиза по световолокну диаметром 0,6 мм. Концы цилиндрических световолокон располагались в непосредственной близости от фотолизной зоны строго соосно.

Часть прошедшего сквозь фотолизную зону зондирующего излучения направлялась на вход монохроматора МДР-6, выделявшего свет в районе 256 нм, и регистрировалась фотоэлектронным умножителем Hamamatsu R636-10. Рассеянное излучение от лазерного импульса 266 нм вносило существенные искажения в регистрируемые временные профили концентрации озона, поэтому на вход ФЭУ был установлен узкополосный фильтр Hg01-254-25. Временное разрешение системы измерения концентрации озона составляло 1 мкс.

3. КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И АНАЛИЗ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Типичные временные профили озона после импульсного лазерного фотолиза в смеси O₃-N₂ показаны на рисунке 2 сплошными линиями. Существующая модель кинетики озона после фотолиза в смеси O₃-O₂-M [3] не

могла адекватно объяснить наблюдаемый быстрый темп гибели O₃. Как известно [10], при фотолизе на длине волны 266 нм существуют два основных канала выхода продуктов:

$$O_3 + hv_{266}$$
 → $O_2(a^1\Delta) + O(^1D)$ (90%)
→ $O_2(X^3\Sigma) + O(^3P)$ (10%).

Атомы O(¹D) быстро деактивируются в основное ³P состояние при столкновениях с молекулами N₂ с константой скорости 3,1·10⁻¹¹ см³/с [11]. В связи с этим после фотолиза нарабатывается атомарный кислород в концентрациях, соизмеримых с концентрацией неразрушенного озона. Было выдвинуто предположение, что ответственной за быструю гибель O₃ является реакция (2) с участием молекулы кислорода O₂^{*}, которая активно формируется в процессе (1) (таблица 1). Процесс (1) активно изучался в течение долгого времени [1,5,8]. Однако точно электронно-колебательное состояние O₂^{*} до сих пор не определено, что значительно затрудняло изучение процессов с его участием. В частности, информация о процессах (2) и (5) в литературе отсутствует.

Вторым возможным каналом гибели озона является реакция (4) с электронно-возбужденным атомом кислорода $O({}^{1}S)$. Строго установлено [7], что $O({}^{1}S)$ образуется в результате столкновительной передачи энергии от O_{2}^{*} атому $O({}^{3}P)$ в процессе (3). В свою очередь константа скорости реакционного процесса $O_{3}+O({}^{1}S)$ близка к газокинетическому пределу [8].

Для составления кинетической модели были использованы процессы и константы скорости, приведенные в таблице 1. При анализе системы уравнений полагалось, что O_2^* и $O(^1S)$ находятся в состоянии динамического равновесия. В результате, кинетическая модель сводилась к следующей системе уравнений:



Рис. 2. Примеры расчетных и экспериментальных профилей озона при температуре T=296 К и давлении N₂ P=770 Торр при разных начальных концентрациях озона

$$k_{1}[O]^{2}[M] - k_{2}[O_{2}^{*}][O_{3}] - k_{3}[O_{2}^{*}][O] - k_{5}[O_{2}^{*}][M] = 0$$

$$k_{3}[O_{2}^{*}][O] - k_{4}[O(^{1}S)][O_{3}] = 0$$

$$\frac{d[O]}{dt} = -2k_{1}[O]^{2}[M] + k_{2}[O_{2}^{*}][O_{3}] - k_{3}[O_{2}^{*}][O] - k_{6}[O][O_{3}] + k_{7}[O_{2}(a)][O_{3}]$$

$$\frac{d[O_{3}]}{dt} = -k_{2}[O_{2}^{*}][O_{3}] - k_{4}[O(^{1}S)][O_{3}] - k_{6}[O][O_{3}] - k_{7}[O_{2}(a)][O_{3}]$$

$$\frac{d[O_{2}(a)]}{dt} = -k_{5}[O_{2}(a)][O_{3}]$$

После преобразований система сводится к тройке дифференциальных уравнений:

$$\frac{d[O]}{dt} = -\frac{k_1[O]^2[M]}{k_2[O_3] + k_3[O] + k_5[M]} (k_2[O_3] + 3k_3[O] + 2k_5[M]) - k_6[O][O_3] + k_7[O_2(a)][O_3]$$
$$\frac{d[O_3]}{dt} = -\frac{k_1[O]^2[M]}{k_2[O_3] + k_3[O] + k_5[M]} (k_2[O_3] + k_3[O]) - k_6[O][O_3] - k_7[O_2(a)][O_3]$$
$$\frac{d[O_2(a)]}{dt} = -k_7[O_2(a)][O_3]$$

Определим начальные условия для представленной выше системы согласно схеме фотолиза озона и соотношению между концентрациями продуктов и интенсивностью падающего пучка [12]

$$\begin{bmatrix} \mathbf{O}_{3} \end{bmatrix}_{0} = \mathbf{N}_{\mathbf{O}_{3}}^{0} \left(1 - \frac{e^{\sigma \left(\mathbf{N}_{\mathbf{O}_{3}}^{0} \mathbf{x} - \mathbf{I}_{0} t \right)}}{1 + \left(e^{\sigma \mathbf{N}_{\mathbf{O}_{3}}^{0} \mathbf{x}} - 1 \right) e^{-\sigma \mathbf{I}_{0} t}} \right), \\ \begin{bmatrix} \mathbf{O} \end{bmatrix}_{0} = \frac{\mathbf{N}_{\mathbf{O}_{3}}^{0} e^{\sigma \left(\mathbf{N}_{\mathbf{O}_{3}}^{0} \mathbf{x} - \mathbf{I}_{0} t \right)}}{1 + \left(e^{\sigma \mathbf{N}_{\mathbf{O}_{3}}^{0} \mathbf{x}} - 1 \right) e^{-\sigma \mathbf{I}_{0} t}}, \\ \begin{bmatrix} \mathbf{O} \end{bmatrix}_{0} = \frac{\mathbf{N}_{\mathbf{O}_{3}}^{0} e^{\sigma \left(\mathbf{N}_{\mathbf{O}_{3}}^{0} \mathbf{x} - \mathbf{I}_{0} t \right)}}{1 + \left(e^{\sigma \mathbf{N}_{\mathbf{O}_{3}}^{0} \mathbf{x}} - 1 \right) e^{-\sigma \mathbf{I}_{0} t}}, \\ \begin{bmatrix} \mathbf{O} \end{bmatrix}_{0} = \frac{\mathbf{N}_{\mathbf{O}_{3}}^{0} e^{\sigma \left(\mathbf{N}_{\mathbf{O}_{3}}^{0} \mathbf{x} - \mathbf{I}_{0} t \right)}}{1 + \left(e^{\sigma \mathbf{N}_{\mathbf{O}_{3}}^{0} \mathbf{x}} - 1 \right) e^{-\sigma \mathbf{I}_{0} t}}, \\ \end{bmatrix}$$

В дальнейшем при анализе экспериментальных временных профилей озона использовалась представленная выше система дифференциальных уравнений. Для определения констант скоростей k_2 и k_5 использовалось численное решение системы дифференциальных уравнений и сопоставление решений с полученными из эксперимента профилями озона в системе COMSOL. Пример аппроксимации приведен на рисунке 2. Для каждого из полученных экспериментальных профилей определялись константы скоростей k_2 и k_5 , а полученные значения этих коэффициентов усреднялись.

В результате анализа данных были определены диапазоны для констант $k_2 = (2,0\pm0,8) \cdot 10^{-10} \text{ см}^3/\text{с}$ и $k_5 = (5,0\pm1,7) \cdot 10^{-15} \text{ см}^3/\text{с}$.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе показано, что основной вклад в гибель озона в постфотолизной зоне вносит реакционный процесс $O_2^* + O_3 \rightarrow O + O_2 + O_2$, где $O_2^* - 9$ электронно-колебательно возбужденная молекула кислорода, формируемая в результате трехчастичной рекомбинации атомов кислорода $O+O+N_2$. Из экспериментальных профилей и кинетической модели определены основные характеристики процессов деградации O_3 с возбужденными молекулами O_2^* . Методом численного моделирования определены константы скорости для реакций $O_2^* + O_3 \rightarrow O + O_2 + O_2$ и $O_2^* + N_2 \rightarrow O_2 + N_2$, которые равны (2,0±0,8) $\cdot 10^{-10}$ см³/с и (5,0±1,7) $\cdot 10^{-15}$ см³/с, соответственно.

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-33-90265.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Slanger T.G. Energetic Molecular Oxygen in the Atmosphere // Science, 1994, Vol. 265, p. 1871-1818.
- 2. Heaven M.C. Recent advances in the development of discharge-pumped oxygeniodine lasers // Laser & Phot. Rev., 2010, Vol. 4, p. 671-683.

- 3. Першин А.А., Торбин А.П., Хэвен М., and Азязов В.Н. Эффект неполного возобновления озона в присутствии активных форм кислорода // Краткие сообщение по физике ФИАН, 2015, Т. 42, №. 12, с. 74-82.
- 4. Торбин А.П., Першин А.А., Мебель А.М., and Азязов В.Н. Релаксация колебательно-возбужденного озона на СО // Краткие сообщения по физике ФИАН, 2018, Т. 45, №. 3, с. 3-8.
- 5. Krasnopolsky V.A. Oxygen emissions in the night airglow of the Earth, Venus and Mars // Planetary and space science, 1986, Vol. 34, No. 6. p. 511-518.
- Pejaković D.A., Kalogerakis K.S., Copeland R.A., and Huestis D.L. Laboratory determination of the rate coefficient for three-body recombination of oxygen atoms in nitrogen // Journal of Geophysical Research: Space Physics, 2008, Vol. 113, No. A4.
- 7. Slanger T.G., Black G. O (¹S) production from oxygen atom recombination // The Journal of Chemical Physics, 1976, Vol. 64, No. 9, p. 3767-3773.
- Kossyi I.A., Kostinsky A.Y., Matveyev A.A., and Silakov V.P. Kinetic scheme of the non-equilibrium discharge in nitrogen-oxygen mixtures // Plasma Sources Science and Technology, 1992, Vol. 1, No. 3, P. 207.
- Azyazov V.N., Heaven M.C. Kinetics of active oxygen species with implications for atmospheric ozone chemistry // International Journal of Chemical Kinetics, 2015, Vol. 47, No. 2, p. 93-103.
- 10.Sparks R.K., Carlson L.R., Shobatake K., Kowalczyk M.L., and Lee M.L. Ozone photolysis: A determination of the electronic and vibrational state distributions of primary products // The Journal of Chemical Physics, 1980, Vol. 72, No. 2, p. 1401-1402.
- 11.Blitz M.A., Dillon T.J., Heard D.E., Pilling M.J., and Trought I.D. Laser induced fluorescence studies of the reactions of O(1D2) with N2, O2, N2O, CH4, H2, CO2, Ar, Kr and n-C4H10 // Phys. Chem. Chem. Phys., 2004, Vol. 6, p. 2162-2171.
- 12.Tellinghuisen J., Phillips L.F. Kinetics of iodine following photolysis at 1930. ANG.: temperature dependence of A'-state quenching // The Journal of Physical Chemistry, 1986, Vol. 90, No. 21, p. 5108-5120.

ROLE OF THE O + O + M RECOMBINATION PROCESS IN DECAY OF O₃

A.A. Pershin^{1,2}, K.A. Romanyuk^{1,2}, A.P. Torbin¹

¹Lebedev Physical Institute, Samara Branch (Novo-Sadovaya str., 221, Samara, Russia, 443011) ²Samara National Research University, (Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086) e-mail: vorontsoven@fian.smr.ru

Time profiles of ozone after photolysis in an O_3-N_2 mixture using the method of time-resolved absorption spectroscopy were obtained. It was found that the main contribution to the loss of ozone in the postphotolysis zone is made by the reaction process $O_3+O_2^*$, where O_2^* is an excited oxygen molecule formed as a result of three-particle recombination of oxygen atoms $O+O+N_2$. On the basis of the kinetic model created in this work and the experimentally obtained time profiles of ozone, the values of the rate constants of the processes with the participation of O_2^* molecules are proposed.

Keywords: ozone, recombination, electronically and vibrationally excited oxygen, laser photolysis, absorption spectroscopy.

ИСПЫТАНИЕ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКОГО ИНТЕРФЕРОМЕТРИЧЕСКОГО ДЕФОРМОГРАФА В УСЛОВИЯХ ПОДЗЕМНОГО РУДНИКА

О.Т. Каменев^{1,2}, Ю.С. Петров¹, В.А. Колчинский¹, <u>А.А. Подлесных</u>²

¹Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН (690041, г. Владивосток, ул. Радио, 5) ²Дальневосточный федеральный университет, (690922, г. Владивосток, ул. Суханова 8) e-mail: alex118usn@gmail.com

Проведена апробация волоконно-оптического интерферометрического деформографа с длиной базы 10 м. в условиях подземных горных выработок рудника «Николаевский» ГМК «Дальполиметалл». Осуществлен сейсмодеформационный мониторинг рудника в течении 1 месяца. Оценена расчетная пороговая чувствительность прибора.

Ключевые слова: волоконная оптика, деформометр, разветвитель 3×3

1. ВВЕДЕНИЕ

Подземная разработка твёрдых полезных ископаемых, особенно в районах повышенной геодинамической активности (характерной, например, для Дальневосточного региона) и с увеличением глубины горных работ, сопровождается объективной неизбежностью проявления опасных геодинамических явлений, в том числе – горных ударов и техногенных землетрясений, приводящих к катастрофическим последствиям.

Развитие волоконной оптики обеспечило широкие перспективы развития волоконно-оптических измерительных систем мониторинга крупномасштабных техногенных объектов (ответственных строительных конструкций, наземных и подземных сооружений), в том числе представляет интерес для создания сетей мониторинга в подземных рудниках для измерения параметров полей деформаций в массиве горных пород.

Системы мониторинга, базирующиеся на волоконно-оптических датчиках (ВОД) невосприимчивы к электромагнитным помехам, имеют крайне высокую чувствительность к внешним воздействиям (перемещение, изменения температуры), возможность создания протяженных измерительных преобразователей с распределенной чувствительностью, устойчивость к

165

агрессивной внешней среде, а также при своей низкой стоимости обеспечивают взрыво- и пожаробезопасность [1].

Удобной для применения в волоконно-оптических деформометрах является оптическая схема интерферометра Маха-Цендера. Однако, высокая чувствительность интерферометра приводит к дрейфу его рабочей точки, условий окружающей вызванному изменениями среды, например, Эта проблема может быть решена путем температуры и давления. методов обработки выходного использования пассивных сигнала с применением разветвителя 3×3.

2. УСТРОЙСТВО И ПРИНЦИП РАБОТЫ ДЕФОРМОГРАФА

Основным элементом деформографа является волоконно-оптический деформометр с интерферометром Маха-Цендера и разветвителем 3х3 (рисунок 1).



Рис. 1. Функциональная схема длиннобазового деформометра на основе волоконно-оптического интерферометра Маха-Цендера и разветвителя 3x3

1 – стойка для крепления троса, 2 – трос, 3 – корпус, 4 –подвижная часть, 5 – стойка, 6 – полупроводниковый лазер, 7 – волоконный световод опорного плеча, 8 – волоконный световод измерительного плеча, 9 – тройной фотоприемник

Оптическая схема деформометра соответствует рисунку 2. Излучение от полупроводникового DFB-лазера (1) (длина волны 1550 нм, мощность 1 мВт), направляется посредством волоконно-оптического Y-разветвителя (2) в два одномодовых световода, которые являются опорным (3) и сигнальным (4) плечами интерферометра Маха-Цендера. Далее, опорная и сигнальная волны, направляются в волоконно-оптический разветвитель 3×3 (5). Взаимодействие волн в разветвителе приводит к преобразованию модуляции фазы сигнальной

волны, вызванной работой многовитковый опто-механический преобразователь (МОП) (6), в модуляцию интенсивности, которая регистрируется при помощи трех фотоприемников (7).



Рис. 2. Схема волоконно-оптического деформометра с разветвителем 3x3 1 – DFB-лазер; 2 – волоконно-оптический Y-разветвитель; 3 – опорное плечо интерферометра; 4 – сигнальное плечо интерферометра; 5 – разветвитель 3x3; 6 – многовитковый оптомеханический преобразователь; 7 – фотоприёмники; 8 – АЦП; 9 – компьютер.

В деформометре применяется горизонтальный многовитковый оптомеханический преобразователь (МОП), важным элементом которого является кевларовый трос (рисунок 3). В соответствии с теорией, представленной в [2], коэффициент преобразования горизонтального МОП определяется коэффициентом упругости троса, и коэффициентом упругости витков волоконного световода измерительного плеча интерферометра. На выходе разветвителя 3×3 формируются выходные сигналы интерферометра, которые оказываются сдвинутыми по фазе относительно друг друга на $2\pi/3$ (120°):

$$x_1 = C + B\cos(\Delta\varphi(t)); \qquad (1 a)$$

$$x_2 = C + B\cos(\Delta\varphi(t) - 120^\circ); \qquad (1 \text{ 6})$$

$$x_3 = C + B\cos(\Delta\varphi(t) + 120^\circ) \tag{1 B}$$

Где индексы 1, 2 и 3 обозначают соответствующие выходы разветвителя; $\Delta \varphi(t)$ - сдвиг фаз между сигнальной и опорной волнами интерферометра Маха-Цендера; *С* – постоянная составляющая сигнала, *B* – амплитуда. Совместная обработка сигналов, описываемых выражениями (1а – в) по алгоритму, представленному в работе [3], обеспечивает возможность полного восстановления изменения разности фаз регистрируемого МОП [4].



Рис. 3. Схема развертывания деформографа

На рисунке 4 представлен выходной сигнал деформометра. Подобные сейсмосигналы используются для определения состояния горной выработки и предсказания горных ударов.



Рис. 4. Сигнал, регистрируемый деформометром на руднике при протекании деформационных процессов в горной породе

. Анализ полученных экспериментальных результатов позволил оценить пороговую чувствительность деформографа, которая соответствовала уровню шумов в диапазоне 500...1000 Гц 0,3 нм. Таким образом, была подтверждена расчетная пороговая чувствительность 1 нм.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведены тестовые испытания прототипа оптоэлектронного деформографа в натурных условиях Николаевского месторождения. Показана эффективная работа деформографа. Определены параметры деформографа:

- диапазон частот от 0(условно) до 1000 Гц;
- пороговая чувствительность 1 нм;
- диапазон регистрируемых деформаций без сброса натяжения: от -1 до 1 мм.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- О. В. Бутов, А. Ю. Плешков, А. И. Вялышев, В. М. Добров, А. А. Долгов Волоконно-оптические датчики для контроля параметров состояния объектов и окружающей среды в задачах мониторинга. // Природоустройство. РГАУ – МСХА им. К.А. Тимирязева. 2014. с.32-37.
- О.Т. Каменев, Ю.Н. Кульчин, Ю.С. Петров, Р.В. Хижняк Применение волоконно-оптического интерферометра Маха-Цендера для создания длиннобазовых деформометров // Письма в ЖТФ, 2014, том 40, вып. 3, с.49-56.
- D.A. Brown, C.B. Cameron, R.M. Keolian, D.L. Gardner, S.L. Garrett, A symmetric 3 × 3 coupler based demodulator for fiber optic interferometric sensors. // Proc. SPIE 1. 1991. V. 1584. P.328–335.
- O.T. Kamenev, Yu. S. Petrov, A.A. Podlesnykh, Use of 3×3 Coupler in the Fiber Optic Strainmeter Based on Mach-Zehnder Interferometer // KnE Energy & Physics, 2018. VII International Conference on Photonics and Information Optics, p. 388–392

UNDERGROUND MINE TEST OF FIBER-OPTIC INTERFEROMETRIC STRAINMETER

O.T. Kamenev^{1,2}, Yu.S. Petrov¹, V.A. Kolchinskiy¹, <u>A.A. Podlesnykh²</u>

¹ Institute of Automation and Control Processes of FEB RAS, Russia, Vladivostok (Radio str., 5, Vladivostok, Russia, 690041)
² Far Eastern federal university, Russia, Vladivostok, (Sukhanova str., 8, Vladivostok, Russia, 690922) e-mail: alex118usn@gmail.com

Approbation of ten-meter based fiber-optic interferometric strainmeter were conducted in «Nicolayevskiy» mine of MMC «Dalpolymetal». Monitoring of seismic deformation were conducted for one month. Threshold sensitivity of device were estimated.

Keywords: strainmeter, fiber optics, 3x3 coupler

РАСЧЕТ РЕЗОНАНСНЫХ КОЛЕБАНИЙ КАНТИЛЕВЕРОВ В ВОЗДУШНОЙ И ЖИДКОЙ СРЕДЕ

<u>Е.А. Рассолов</u>^{1,2*}, А.Б. Черепахин¹

¹Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН, Радио ул. 5, г. Владивосток, 690041 Россия ²Дальневосточный федеральный университет, Суханова ул., 8, Владивосток, 690091 Россия *e-mail: sky.04@mail.ru

В работе рассмотрены методы расчета частоты резонансных колебаний микрокантилеверов с трапециевидным и прямоугольным поперечным сечением В воздушной И жидкой среде. Произведено сравнение колебаний экспериментально измеренных частот кантилеверов с рассчитанными. Собственные частоты экспериментально резонансных колебаний рассчитаны с использованием программных комплексы COMSOL Multiphysics и MATLAB.

Ключевые слова: осциллятор, кантилевер, резонансные колебания, микромеханический сенсор.

1. ВВЕДЕНИЕ

Сенсоры с использованием микромеханических осцилляторов находят широкое применение для построения сенсоров сверхмалых физических величин [1]: сверхмалых масс, электрических или магнитных сил. Принцип работы сенсора на основе микромеханических осцилляторов заключается в измерении резонансных или колебательных параметров осциллятора. В свою очередь изменение массы осциллятора, сил поверхностного натяжения, вязкости окружающей среды приводит к изменению частоты собственных колебаний Наиболее осциллятора. распространённым типом микромеханического осциллятора являются кантилеверы. Определение частоты резонансных колебаний ключевой момент В работе микромеханических сенсоров. В данной работе рассмотрены разных методов расчета резонансных частот для кантилеверов прямоугольной формы в воздушной и вязкой среде, приводится сравнение рассчитанных резонансных частот с экспериментально измеренными.

2. РАСЧЕТ ЧАСТОТЫ СОБСТВЕННЫХ КОЛЛЕБАНИЙ

В общем случае кантилевер представляет собой массивное прямоугольное основание, с выступающей из него балкой (собственно кантилевером).

Как правило, в процессе своей работы микрорезонансный осциллятор с массой m_0 присоединяет к себе объекты, подлежащие измерению. Величина изменения массы – Δm – связана с изменением резонансной частоты, – Δf – следующим приближенным выражением [2]:

$$\Delta f = -\frac{f_0}{2m_0} \Delta m \tag{1}$$

В случае если присоединенная масса сосредоточена на свободном конце кантилевера, для расчета резонансной частоты может быть использовано следующее аналитическое выражение [3]:

$$f = \frac{\eta^2 t}{2\pi l^2} \left(\frac{E}{12\rho(1+4\gamma)} \right)^{\frac{1}{2}},$$
 (2)

где γ – отношение массы Δm , присоединенной к кантилеверу, к массе кантилевера m_0 ; ρ – плотность материала, из которого изготовлен кантилевер; η – безразмерный параметр, зависящий от γ как $\eta(\gamma)=1.875/(1+4\gamma)$.

Резонансная частота f_r микрокантилевера, погруженного в вязкую жидкость, может быть связана с его незатухающей собственной частотой в вакууме f_0 [4]:

$$f_r = f_0 \frac{1}{\sqrt{1 + Lg_2/m}} \sqrt{1 - \frac{1}{2Q_{tot(liq)}^2}}$$
(3)

где L - длина кантилевера, а m - масса. $Q_{tot(liq)}$ - это показатель добротности погруженного кантилевера, учитывающий все потери в жидкости, а также собственные потери.

$$f_0 = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{\lambda_0}{L}\right)^2 \sqrt{\frac{\sum_i \hat{E}_i I_i}{b \sum_i \rho_i h_i}} \tag{4}$$

с $\lambda_0 = 1,875$, обозначающим основную изгибную моду, b – ширина кантилевера. Параметры ρ_i и h_i являются плотностью и толщиной соответствующих слоев композитного кантилевера. I_i представляет отдельные моменты инерции разных слоев относительно нейтральной оси балки. E_i –модуль Юнга. $Q_{tot(liq)}$ уже учитывает демпфирование жидкости, а также эффекты внутреннего демпфирования. Выражая коэффициент добротности в виде суммы двух основных компонентов, получаем:

$$\frac{1}{Q_{tot(liq)}} = \frac{1}{Q_{int}} + \frac{1}{Q_{fluid}}$$
(5)

при этом Q_{int} является собственной добротностью кантилевера, а Q_{fluid} жидкости. Можно пренебречь вкладом собственных потерь и заменить общий коэффициент добротности $Q_{tot(liq)} \approx Q_{fluid}$. Q_{fluid} является функцией двух жидкостных коэффициентов g_1 и g_2 , которые, в свою очередь, являются функциями частоты f_r .

$$Q_{fluid} = 2\pi f_0 \frac{\sqrt{1 + Lg_2/m}}{Lg_1/m}$$
(6)

который учитывает потери как следствие жидкофазной среды. Коэффициенты жидкости, *g*₁ и *g*₂ в формуле даны

$$g_1 = \pi \eta R e \Gamma_i(Re) \tag{7}$$

$$g_2 = \frac{\eta R e}{2f_r} \Gamma_r(Re) \tag{8}$$

 η - вязкость жидкости, а *Re* - число Рейнольдса потока жидкости вокруг кантилевера. *Г_r* и *Г_i* - действительная и мнимая части «гидродинамической функции»:

$$\Gamma(Re) = \Omega(RE) \left[1 + \frac{4jK_1(-j\sqrt{jRE})}{\sqrt{jRE}K_0(-j\sqrt{jRE})} \right]$$
(9)

с числом Рейнольдса *Re* пучка, вибрирующего с частотой f_r , в жидкости с плотностью ρ_f , определяемой как:

$$RE = \frac{\pi \rho_f b^2 f_r}{2\eta} \tag{10}$$

Число Рейнольдса пропорционально частоте колебаний, которая представляет собой неизвестный параметр. Это означает, что нужно выполнить самосогласованный расчет f_r . Для этого в качестве начального значения f_r для формулы (10) используется резонансная частота кантилевера в воздухе. Затем полученное значение RE используется для вычисления g_1 и g_2 . В результате в конце первой итерации мы получаем новую резонансную частоту f_r для кантилевера в жидкости. Затем с его помощью мы находим новое число Рейнольдса. Этот итеративный процесс продолжается до достижения самосогласованности.

Выражения (3) и (6) позволяют рассчитать резонансную частоту кантилевера прямоугольной формы. Большинство коммерчески доступных кантилеверов имеют сложную форму. В настоящей работе произведены экспериментальные измерения частоты собственных колебаний кантилевера NSG компании NT-MDT с размерами 190×40×5 мкм³, в поперечное сечение

такого кантилевера представляет собой трапецию. На конце кантилевера закреплён зонд высотой 14 мкм. В программном пакете COMSOL Multiphysics произведен расчет частоты собственных колебаний и ее зависимость от массы присоединенных объектов. Численно рассчитанная частота собственных колебаний кантилевера NSG составила 216959 Гц.

Расчет частоты собственных колебаний кантилевера, погруженного в жидкость выполнен с использованием выражения (3). Для облегчения расчетов был реализован алгоритм нахождения резонансной частоты кантилевера в жидкости в среде МАТLAB. Итеративным методом подобран эквивалентный кантилвер с прямоугольным сечением, у которого совпадает (с точностью до ~10 Гц) частота собственных колебаний и зависимость частоты от присоединенной массы. На рисунке 1 показано согласование зависимостей для двух кантилеверов, которая подтверждает корректность использования в расчетах кантилевера с эквивалентной, а не реальной формой.



Рис. 1. Зависимость частоты собственных колебаний для кантилевера с прямоугольным и трапециевидным сечением

3. ЭКСПЕРЕМАНТАЛЬНОЕ ИЗМЕРЕНИЕ ЧАСТОТ

В настоящей работе прозведено экспериментальное измерение частоты собственных колебаний кантилверов производилось с помощью адаптивного голографического интерферометра [5] при различных размерах кантилевера. Колебания возбуждались импульсным Nd:YAG – лазером с энергией импульсов 80 мкДж. Изменение размера (геометрии) кантилевера производилось с помощью гибридного ионного утонителя HITACHI IM4000 путем выполнения поперечных срезов. Снимки кантилевера до выполнения срезов и после, показаны на рисунке 2.



Рис. 2. Снимки кантилевера NSG NT-MDT в атомно силовом микроскопе: а – кантилевер без поперечных срезов; б – кантилевер с одним поперечным срезом; в – кантилевер с двумя поперечными срезами.

Для измерения частоты колебаний в жидкости кантилевер помещался в проточную кювету, которая заполнялась дистиллированной водой. Теоретически рассчитанные и экспериментально измеренные частоты резонансных колебаний кантилевера приведены в таблице 1.

Тип кантилевера	Частота колебаний в вакууме, рассчитанная в COMSOL Multiphysics	Эксперимент ально измеренная частота колебаний в	Частота колебаний в воде, рассчитанна я в Matlab	Эксперимент ально измеренная частота колебаний в
Кантилевер без поперечного среза 170×40×4,5 мкм	217117 Гц	210559 Гц	91291 Гц	90612 Гц
Кантилевер с одним поперечным срезом длина 160×40 ×4,5 мкм	245250Гц	252228 Гц	97140Гц	91014 Гц
Кантилевер после второго поперечного среза длина 147×40×4,5 мкм	290700 Гц	20174 Гц	98352 Гц	62597 Гц

Таблица 1. Теоретически рассчитанные и экспериментально измеренные частоты резонансных колебаний для различных кантилеверов

полученных экспериментальных Анализ результатов позволяет заключить, что все методы расчета резонансной частоты, описанные выше, позволяют получить правильную оценку резонансной частоты кантилевера в воде и воздухе. Однако для модифицированных в ионном утонителе кантилвере наблюдается сильное расхождение экпериментально измеренной и теоретически расчитанной частоты колебаний. Данный факт можно объяснить неточностью установки маски при выполнении поперечных срезов, из-за чего поперечный срез был выполнен не точно. Сильное отличие частот для кантилевера с двумя поперечными срезами объясняется вкладом структурных повреждений, возникших в результате воздействия импульсного лазера (рис. 2в). Влияние дефектов на механические свойства является существенным для более длинных и тонких кантилеверов.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в настоящей работе рассмотрены методы расчета резонансных колебаний кантилеверов в программных пакетах MATLAB и COMSOL Multiphysics. Показано, что способ активации кантилевера, при котором присоединённая масса располагается на его свободном конце, позволяет улучшить чувствительность микромеханического сенсора и повысить точность определения резонансной частоты.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №19-12-00323)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Xu, Yong Ping, ed. by MEMS Silicon. Oscillating Accelerometers and Readout Circuits. River Publishers, 2019.
- Jensen, K., Kwanpyo Kim, and A. Zettl. "An atomic-resolution nanomechanical mass sensor." Nature nanotechnology 3(9) (2008): 533.
- Ilic, B., Craighead, H. G., Krylov, S., Senaratne, W., Ober, C., & Neuzil, P. J. "Attogram detection using nanoelectromechanical oscillators." Journal of Applied Physics 95(7) (2004): 3694-3703.
- Dufour I., Heinrich S. M., Josse F. Strong-axis bending mode vibrations for resonant microcantilever (bio) chemical sensors in gas or liquid phase //Proceedings of the 2004 IEEE International Frequency Control Symposium and Exposition, 2004. – IEEE, 2004. – P. 193-199.

 Romashko R., Efimov T., Kulchin Y. Full-optical two-channel adaptive system for detecting microcantilever vibrations //Journal of Russian Laser Research. – 2016. – T. 37. – N. 1. – P. 102-106.

CALCULATION OF RESONANCE VIBRATIONS OF CANTILOVERS IN AIR AND LIQUID MEDIUM

E.A. Rassolov^{1,2*}, A.B. Cherepahin¹

¹Institute of Automation and Control Processes, FEB RAS (Radio str., 5, Vladivostok, Russia, 690041) ²Far Eastern Federal University, Vladivostok (Sukhanova str.., 8, Vladivostok, Russia, 690950) *e-mail: sky.04@mail.ru

The paper considers methods for calculating the frequency of resonant oscillations of microcantilevers with trapezoidal and straight cross sections forms in air and liquid media. The experimentally measured vibration frequencies of the cantilevers are compared with the experimentally calculated. The natural resonant vibrations were modeled using COMSOL Multiphysics and MATLAB software packages.

Keywords: oscillator, cantilever, resonant vibrations, micromechanical sensor

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОКУСИРОВКИ ОПТИЧЕСКОГО ВИХРЯ ЗОННОЙ ПЛАСТИНКОЙ ФРЕНЕЛЯ

А.А. Савельева^{1,2}, Е.С. Козлова^{1,2}

¹Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева (443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34) ²Инстит систем обработки изображений РАН - филиал ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН (443001, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 151) e-mail: lexis2450@gmail.com

В данной работе с помощью численного моделирования FDTD-методом исследуется процесс фокусировки оптического вихря третьего порядка зонной пластинкой Френеля из кварцевого стекла. Было показано, что распределение интенсивности сфокусированного поля в фокально области имеет форму кольца. При этом в области фокуса также было показано наличие обратного потока энергии, имеющего форму трубки.

Ключевые слова: зонная пластинка, оптический вихрь, фокусировка света, узкая фокусировка, FDTD метод.

1. ВВЕДЕНИЕ

Объекты с вихревой структурой довольно широко распространены в материальном мире. Это могут быть как макрообъекты (торнадо, циклоны), так и объекты из микрооптики, например, световые поля, световые пучки и т. д. Световые пучки с фазовыми особенностями подробно рассматриваются и изучаются в рамках сингулярной оптики. Среди таких пучков можно выделить вихревые лазерные пучки или оптические вихри, которые являются их частными случаями [1]. Исследованию вихревых пучков посвящено большое количество статей и научных исследований. Проблемами генерации [2], распространения [3], фокусировки [4], регистрации и распознавания оптических вихрей (в том числе и определением их характеристик) [5] активно занимаются как отечественные, так и зарубежные ученые.

Для создания оптических вихрей используются специальные элементы, как, например, аксиконы[6], зонные пластинки [7] и др. В [6] предложена новая оптическая система для генерации азимутально- и радиальнополяризованных вихревых лазерных пучков Бесселя. В основе этой систимы лежит бинарный фазовый аксикон. В [7] описаны встроенные спиральные зонные пластинки (СЗП), обработанные сильно сфокусированными фемтосекундными импульсами, вызывающими изменение показателя преломления в кристалле сапфира.

Область применения оптических вихрей включает в себя построении систем оптических коммуникаций [8], обработке материалов [9], ориентации молекул [10], создании оптических пинцетов [11] и сенсорике магнитных полей [12].

В данной работе с помощью численного моделирования исследуется дифракция оптических вихрей на зонной пластинке. Для проведения численных экспериментов использовался программный пакет FullWAVE, основанный на методе конечных разностей во временной области (FDTDметоде). Для задания входных распределений пучков, обработки и визуализации полученных результатов использовались авторские программы, написанные на языке MATLAB.

2. ОПИСАНИЕ ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Рассмотрим ЗП с 13 кольцами. Радиус зон рассчитывается по формуле:

$$r_p = \sqrt{p\lambda f + p^2 \lambda^2 / 4} \tag{1}$$

где r_p радиус зоны с номером p, λ волна входящего излучения, f фокусное расстояние. Для расчета шаблона ЗП были выбраны следующие параметры:: λ = 0,532 мкм, $f = \lambda$, P = 27 (общее количество зон эквивалентное 13 кольцам) зон представлены в Табл. 1. Шаблон ЗП представлен на Рис. 1.

Рассматриваемая ЗП предполагается быть изготовленной в кварцевом стекле. Линейно поляризованный гауссов пучок с длиной волны 532 нм, шириной перетяжки 8 нм и внедренным в него топологическим зарядом m=3 выбран в качестве падающего излучения. Пространственное распределение падающего излучения с требуемой поляризацией рассчитывалось с помощью авторского скрипта в MATLAB. 2D проекция интенсивности падающего поля в соотношении ЗП представлена на Рис 1.(б).

p	1	2	3	4	5	6	7	8	9
r_p , MKM	0,595	0,921	1,219	1,505	1,784	2,060	2,334	2,606	2,877
p	10	11	12	13	14	15	16	17	18
r_p , MKM	3,147	3,417	3,686	3,954	4,223	4,491	4,758	5,026	5,293
p	19	20	21	22	23	24	25	26	27
r_p , MKM	5,561	5,828	6,095	6,362	6,629	6,896	7,162	7,429	7,696

Таблица 1. Радиусы зон ЗП



Рис. 1. Шаблон ЗП в поперечной (а) и (б) продольной плоскости и распределение падающего излучения

Все моделирования были выполнены с помощью (FD)²TD-метода, реализованного FullWAVE. Данный метод использует модель Селмейера для описания диэлектричской проницаемости кварцевого стекла [20]:

$$\varepsilon_{2}(\lambda) = \varepsilon_{\infty} + \sum_{m} \frac{\Delta \varepsilon_{m} \lambda^{2}}{\lambda^{2} - \lambda_{m}^{2} - i\lambda \eta_{m}}$$
(2)

где λ – длина волны, $\varepsilon_{\infty}(x,z)$ – диэлектрическая проницаемость на высоких частотах, $\Delta \varepsilon_m(x,z)$ – величина резонанса, $\lambda_m(x,z)$ – резонансная длина волны, $\eta_m(x,z)$ – коэффициент демпфирования. Параметры модели взяты из [13] и представлены в Табл. 2.

Таблица 2. Параметры модели Селлмейера для кварцевого стекла [13].

m	$\Delta \varepsilon_m$	λ_m ,	δ_m		
1	0,69616630	0,068404300	0		
2	0,40794260	0,11624140	0		
3	0,89747940	9,8961610	0		
$\varepsilon_{\infty} = I$					

При расчетах использовались следующие параметры сетки: шаги по поперечным и продольной координатам составили 15 нм. Шаг по псевдовремени *ct* был выбран равным 7 нм в соответствии с условием Куранта. В ходе анализа результатов моделирования производилось усреднение поля по 10 периодам.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В ходе анализа результатов моделирования нами рассматривались интенсивность сфокусированного пучка, компоненты векторов напряженности электрического поля и Умова-Поинтинга. На рис. 2-4 приведены результаты моделирования.



Рис. 2. Распределение компонент вектора напряженности электрического поля E_x (a-в), E_y (г-е), E_z (ж-и) в плоскости XZ, YZ, XY


Рис. 3. Распределение интенсивности в плоскостях XZ (y=0) (a), YZ (x=0) (б), и в плоскости XY на расстоянии теоретического фокуса f от рельефа 3П (в).



Рис. 4. Распределение компонент вектора Умова-Поинтинга S_x (а-в), S_y (г-е), S_z (ж-и) в плоскости XZ, YZ, и в плоскости XY.

Рис. 2 демонстрирует, что поле имеет вихревую структуру, а основной вклад в распределение интенсивности в фокусе дают компоненты E_x и E_z . Из Рис. 3 видно, что входящий вихрь третьего порядка формирует в фокусе подобие кольца. Неоднородность кольца связана с плоской поляризацией падающего излучения. Анализ распределения компоненты S_z ,(Рис. 4 ж-и) показал, что она имеет в фокусе кольцевую структуру, при этом область отрицательного значения окруженное кольцом максимального

положительного значения, что позволяет говорить о наличии зоны обратного потока энергии, имеющего трубчатый вид.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведено моделирование фокусировки оптического вихря третьего порядка диэлектрической ЗП из кварцевого стекла. Показано, что распределение интенсивности поля имеет кольцевую структуру, при этом основной вклад в формирование поля дают компоненты E_x и E_z . Форма распределения компоненты S_z подтверждает наличие обратного потока энергии, окруженного областью прямого потока, таким образом форма обратного потока энергии имеет трубчатую структуру. Полученные результаты могут найти свое применение при формировании оптических пинцетов[14] и в микроманипулировании частицами[15].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. А.В. Воляр, М.В. Брецько, Я.Е. Акимова, Ю.А. Егоров, Формирование и анализ спектров оптических вихрей сингулярных пучков с аномалиями орбитального углового момента. // Компьютерная оптика, 2019, т. 43, № 4, с. 517-527.
- R. Uren, S. Beecher, C. R. Smith, W. A. Clarkson, Method for Generating High Purity Laguerre–Gaussian Vortex Modes. // IEEE Journal of quantum electronics, 2019, v. 55, № 5, 1700109.
- Z. Liu, D. Zhao, Propagation of partially coherent vortex beams in atmospheric turbulence by a spatial light modulator. // Laser Physics Letters, 2019, v. 16, 056003.
- С.С. Стафеев, В.В. Котляр, Острая фокусировка оптического вихря с посекторно азимутальной поляризацией. // Компьютерная оптика, т. 41, № 2, с. 147-154.
- 5. В.В. Котляр, А.А. Ковалёв, Топологический заряд оптических вихрей без радиальной симметрии. // Компьютерная оптика, 2020, т. 44, № 4, с. 510-518.
- 6. С.В. Карпеев, В.Д. Паранин, С.Н. Хонина, Формирование неоднородно поляризованных вихревых пучков Бесселя на основе интерференционного поляризатора. // Квантовая электроника, 2018, т. 48, № 6, с. 521-526.
- Y.-M. Lu, Z.-N. Tian, S.-N. Yang, J.-G. Hua, X.-Q. Liu, Y. Zhao, Q.-D. Chen, Y.-L. Zhang, H.-B. Sun, High-Efficiency Spiral Zone Plates in Sapphire. // IEEE Photonics technology letters, 2019, v. 31, № 12, p. 979-982.

- M. P. J. Lavery, C. Peuntinger, K. Gunthner, P. Banzer, D. Elser, R. W.Boyd, M. J. Padgett, C. Marquardt, G. Leuchs, Free-space propagation of high-dimensional structured optical fields in an urban environment. // Sci. Adv., 2017, v. 3, № 10, e1700552.
- F. Takahashi, K. Miyamoto, H. Hidai, K. Yamane, R. Morita, T. Omatsu, Picosecond optical vortex pulse illumination forms a monocrystalline silicon needle. // Sci. Rep., 2016, v. 6, 21738.
- 10.M. P. Backlund, M. D. Lew, A. S. Backer, S. J. Sahl, G. Grover, A. Agrawal, R. Piestun, W. E. Moerner, The double-helix point spread function enables precise and accurate measurement of 3D single-molecule localization and orientation. // Proc SPIE Int Soc Opt Eng., 2013, 8590, 85900L.
- 11.R. A. B. Suarez, A. A. R. Neves, M. R. R. Gesualdi, L. A. Ambrosio, M. Zamboni-Rached, Experimental optical trapping of micro-particles with Frozen Waves. // Optics, 2020, DOI:10.1364/OL.390909.
- 12.S. Yu, F. Pung, H. Liu, X. Li, J. Yang, T. Wang, Compositing orbital angular momentum beams in Bi4Ge3O12 crystal for magnetic field sensing. // Appl. Phys. Lett., 2017, v. 111, № 9, 091107.
- 13.A. Couairon, L. Sudrie, M.Franco, B.Prade, A. Mysyrowicz, Surface physics, nanoscale physics, low-dimensional systems-Filamentation and damage in fused silica induced by tightly focused femtosecond laser pulses. // Phys. Rev. B, 2005, v. 71 № 12, 125435.
- 14.R. A. B. Suarez, A. A. R. Neves, M. R. R. Gesualdi, L. A. Ambrosio, M. Zamboni-Rached, Experimental optical trapping of micro-particles with Frozen Waves. // Optics, 2020, DOI:10.1364/OL.390909.
- 15.S. Cheng, T. Xia, M. Liu, C. Zheng , H. Zang, S. Tao, Composite Spiral Zone Plate. // IEEE Photonics Journal, 2019, v. 11, № 1, 4500111.

MODELING THE FOCUSING OF AN OPTICAL VORTEX BY A FRESNEL ZONE PLATE

<u>A.A. Savelyeva</u>¹, E.S. Kozlova^{1,2}

¹ IPSIRAS – branchoftheFSRC «Crystallography and Photonics» RAS(Molodogvardejskayastreet151, Samara, Russia, 443001) ²Samara National Research University, (Moskovskoye shosse, 34,Samara, Russia, 443086) e-mail: lexis2450@gmail.com

In this work, using the numerical simulation by FDTD method, the focusing of a third-order optical vortex by a Fresnel zone plate made of silica glass was studied. It was shown that the intensity distribution of the focused field in the focal region has the shape of a ring. Moreover, the presence of a backward energy flow in the form of a tube was also shown in the focal region.

Keywords: zone plate, optical vortex, light focusing, narrow focus, FDTDmethod

ОЦЕНИВАНИЕ ДЕФОРМАЦИЙ В КОМПРЕССИОННОЙ ОПТИЧЕСКОЙ КОГЕРЕНТНОЙ ЭЛАСТОГРАФИИ С ОТСЛЕЖИВАНИЕМ МЕЖПИКСЕЛЬНЫХ СМЕЩЕНИЙ РАССЕИВАТЕЛЕЙ

<u>А.А. Советский</u>, А.Л. Матвеев, Л.А. Матвеев, Г.В. Геликонов, А.А. Зыков, В.Ю. Зайцев

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

В работе рассмотрен метод отслеживания внутритканевых смещений при эластографическом картировании фазочувствительной с помощью компрессионной оптической когерентной эластографии (ОКЭ), при реализации которой смещения рассеивателей часто превышают пиксельный масштаб. Учёт таких смещений крайне важен для корректного расчёта кумулятивных деформаций, ЧТО В свою очередь необходимо для неискажённого картирования границ различающихся по жёсткости областей на эластографических изображениях. Предложенный метод также важен для различения истинной упругой линейности среды и артефактной нелинейности жёсткости внутри биоткани.

Ключевые слова: ОКТ, эластография, смещения рассеивателей.

1. ВВЕДЕНИЕ

Компрессионная оптическая когерентная эластография (ОКЭ) - это новый подход к изучению механических свойств биологических тканей [1]. Идея подхода была заимствована из ультразвуковой эластографии и была представлена Дж. Шмиттом [2] на основе парадигмы линейной упругости биоткани. В рамках этой парадигмы предполагается, что одноосное давление на биоткань и результирующая осевая деформация линейно пропорциональны друг другу:

$$\sigma = E\varepsilon \tag{1}$$

Осевые деформации в биоткани можно найти путем сравнения полученных последовательно ОКТ-сканов, снятых во время компрессии образца. А именно, путем оценки осевых градиентов межкадровых фазовых изменений, где для определения этого градиента можно использовать либо

классический метод наименьших квадратов, либо недавно предложенный «векторный» метод [3,4], обладающий рядом существенных преимуществ.

Из уравнения (1) очевидно, что для количественной оценки модуля Юнга, который ниже кратко называется жёсткостью, необходимо не только знание локальной деформации, но также требуется оценка соответствующего давления, действующего на биоткань. В принципе, можно попытаться оценить давление, путём измерения силы, приложенной к биоткани поджатием ОКТзондом с известной площадью контакта. Однако распределение оказываемого на биоткань давления вдоль скана может быть сильно неоднородным (в силу неровности поверхности и механической неоднородности самой ткани) и привести к существенным ошибкам в измерении жёсткости [5]. С другой стороны, пространственное распределение модуля Юнга может быть извлечено из полученного профиля деформаций. В самом деле, если деформация вызвана одноосным напряжением (т. е. ткань может свободно расширяться в поперечном направлении), давление одинаково для разной глубины биоткани, тогда справедливо:

$$\sigma = E_1 \varepsilon_1 = E_2 \varepsilon_2 \tag{2}$$

что эквивалентно

$$E_1 / E_2 = \varepsilon_2 / \varepsilon_1 \tag{3}$$

Таким образом, измерение распределения осевой деформации является ключевым этапом в определении распределения модуля Юнга. Уравнения (2) и (3) показывают, что распределение локальных деформаций по глубине прямо пропорционально относительному распределению обратного модуля Юнга. Следовательно, если в какой-то области известен модуль Юнга, то открывается возможность количественно оценить модуль упругости по всей отображаемой области. Эта идея упоминалась довольно давно [6], но не нашла практического применения в ультразвуковой компрессионной эластографии, тогда как в компрессионной ОКЭ количественная оценка модуля упругости ткани эффективно реализуется с использованием полупрозрачных эталонных слоев (обычно из мягкого силикона) с заранее определенным модулем [7,8,9]. При этом смещения границы силикон-ткань при умеренных деформациях порядка нескольких процентов могут значительно превышать размер пикселя на ОКТ изображения. В связи с этим прямое сравнение анализируемых изображение «пиксель-в-пиксель» модель приводить к значительным ошибкам и размытию границ между границами различных по жесткости

областей. Ниже рассмотрен метод, позволяющий отлеживать такие конечные смещения и исключать связанные с ними ошибки при ОКЭ измерениях.

2.1. Методика исследований

Экспериментальная установка состояла из спектрального оптического когерентного томографа, созданного в ИПФ РАН, (пространственное аксиальное разрешение - 16 мкм, поперечное разрешение - 15 мкм, глубина сканирования - 2 мм (на воздухе), скоростью сканирования - 20 000 спектральных сканов в секунду); компьютера; системы автоматического позиционирования ОКТ-зонда. Для эластографического сканирования использовались эталонные силиконовые слои жёсткостью 50-500 кПа.



Рис. 1. (а) – схема размещения биоткани, силиконового слоя известной жёсткости и ОКТ-зонда, которым осуществляется компрессия, при эластографическом картировании.(b) – вид экспериментальной установки. (c) – вид специального держателя ОКТ – зонда при ручном сканировании области лица.

2.2. Учёт смещений биоткани при эластографическом картировании компрессионной ОКЭ

Важной особенностью компрессионной эластографии является смещение рассеивателей внутри биоткани во время компрессии. В условиях сильной упругой неоднородности типичной для клинических применений крайне важно отслеживать смещения рассеивателей, накапливая деформации рассеивателей. Неучёт смещений смещающихся сверх-пиксельных рассеивателей может привести к ошибочному оцениванию жёсткости, размытию границ неоднородностей жёсткости, неправильной трактовке характера упругого поведения биоткани. В результате линейно упругая, но неоднородная по жёсткости среда может быть ошибочно принята за нелинейную, а нелинейное поведение среды может быть существенно искажено.

Учёт влияния конечных деформаций образца может быть осуществлён путём отслеживания смещений и суммирования локальных деформаций в каждом пикселе с постоянной коррекцией области суммирования в процессе компрессии (Рис. 2). Когда смещение превышает пиксельный масштаб производится коррекция дальнейшего суммирования. При этом в результат суммирования в начальный пиксель продолжает добавляться новые значения деформации из пикселя текущего положения рассеивателя.



Рис. 2. Схематическое описание процесса учёта смещений биоткани при компрессии биоткани.

Для наглядной демонстрации важности учёта смещений приведены экспериментальные эластографические данные роговицы глаза крысы, снятые после лазерного нагрева (в ходе исследований новых возможностей коррекции формы роговицы нехирургическими методами). Эластограммы построенные при учёте смещений и без учёта демонстрируют влияние съезжания биоткани вверх с размытием границы силикон-биоткань. Графики давления от деформации и жёсткости от деформации, где сплошные кривые построены при учёте смещений, а пунктирные без такого учета (для областей в месте лазерного нагрева (II) и в отдалении от него (I)), -демонстрируют существенные различия. Они вызваны постепенным попаданием всё большей области окна усреднения из биоткани в подстилающий силикон. Такое ошибочное определение жёсткости, отражённое в отличии сплошных и пунктирных кривых, может быть причиной существенного снижения диагностического контраста и даже ошибочной интерпретации эластограмм.



Рис. 3. Демонстрация важности учёта сверх-пиксельных смещений при ОКЭкартировании на примере исследования изменений жёсткости роговицы крысы после лазерного нагрева. (a) – схема эксперимента, (b) и (f) – структурные ОКТ-изображения в начале и конце компрессии соответственно, (c) и (d) – эластографические карты жесткости, полученные с учётом и без учёта смещений биоткани, соответственно; (e) – карта смещений, (g) и (h) – зависимости давления от деформации и жёсткости от деформации для областей роговицы в необлученной области (I) и облученной зоне (II).

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе описаны процедуры учёта немалых смещений, часто реализующихся при диагностике биотканей методом компрессионной оптической когерентной эластографии. Продемонстрирована важность учёта таких смещений на примере исследования изменения жёсткости биоткани при лазерном нагреве роговицы крысы.

Работа поддержана грантом РФФИ № 18-42-520018 Р_А

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- V.Y. Zaitsev, A.L. Matveyev, L.A. Matveev, A.A. Sovetsky, M.S. Hepburn, A. Mowla, B.F. Kennedy, Strain and elasticity imaging in compression optical coherence elastography: the two-decade perspective and recent advances. // Journal of Biophotonics, 2020, e202000257.
- 2. J.M. Schmitt, OCT elastography: imaging microscopic deformation and strain of tissue. // Optics Express, 1998, v. 3(6), p. 199.
- 3. V.Y. Zaitsev, A.L. Matveyev, L.A. Matveev, G.V. Gelikonov, A.A. Sovetsky, and A. Vitkin, Optimized phase gradient measurements and phase-amplitude interplay in optical coherence elastography. // Journal of Biomedical Optics, 2016, v. 21(11), p. 116005.

- 4. A.L. Matveyev, L.A. Matveev, A.A. Sovetsky, G.V. Gelikonov, A.A. Moiseev, and V.Y. Zaitsev, Vector method for strain estimation in phase-sensitive optical coherence elastography. // Laser Physics Letters, 2018, v. 15(6), p. 65603.
- A.A. Sovetsky, A.L. Matveyev, L.A. Matveev, E.V. Gubarkova, A.A. Plekhanov, M.A. Sirotkina, N.D. Gladkova, V.Y. Zaitsev, Full-optical method of local stress standardization to exclude nonlinearity-related ambiguity of elasticity estimation in compressional optical coherence elastography. // Laser Physics Letters, 2020, v. 17(6), p. 065601.
- J. Ophir, I. Cespedes, H. Ponnekanti, Y. Yazdi, and X. Li, Elastography: A quantitative method for imaging the elasticity of biological tissues. // Ultrasonic Imaging, 1991, v. 13(2), p. 111–134.
- A. A. Sovetsky et al., Manually-operated compressional optical coherence elastography with effective aperiodic averaging: demonstrations for corneal and cartilaginous tissues. // Laser Physics Letters, 2018, v. 15(8), p. 085602.
- E. V. Gubarkova et al., OCT-elastography-based optical biopsy for breast cancer delineation and express assessment of morphological/molecular subtypes. // Biomedical optics express, 2019, v. 10(5), p. 2244-2263.
- 9. A.A. Plekhanov et al., Histological validation of in vivo assessment of cancer tissue inhomogeneity and automated morphological segmentation enabled by Optical Coherence Elastography. // Scientific Reports, 2020, v. 10(1), p. 1-16.

TRACKING OF INTERPIXEL DISPLACERS FOR ESTIMATION OF DEFORMATIONS IN COMPRESSION OPTICAL COHERENT ELASTOGRAPHY

<u>A. A. Sovetsky</u>, L. A. Matveev, A. L. Matveyev, G. V. Gelikonov, A.A. Zykov, V. Y. Zaitsev

Institute of Applied Physics RAS, (Ul'yanov Street, 46, Nizhny Novgorod, Russia,603950) e-mail: alex.sovetsky@mail.ru

The paper considers a method for tracking pixel scale displacements of the scatterers in elastographic mapping using phase-sensitive compression optical coherent elastography (OCE). Such displacements registration is extremely important for the correct calculation of cumulative deformations, which is necessary for undistorted mapping of differing in stiffness regions. The proposed method assists in tracking the true elastic behavior of the biological tissue.

Keywords: OCT, elastography, scatter displacement.

МЕХАНИЗМ РАЗРУШЕНИЯ ФЕНИЛ-РАДИКАЛА В УСЛОВИЯХ ГОРЕНИЯ

<u>Г.И. Толстов</u>^{1,2}, Я.А. Медведков², Д.П. Порфирьев^{1,2}, М.В. Загидуллин^{1,2}, А.М. Мебель^{1,3}, В.Н. Азязов^{1,2}

¹Самарский университет,

(443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34) ²Самарский филиал Физического института им. П.Н. Лебедева РАН (443011, г. Самара, ул. Ново-Садовая, 221 ³Florida International University, (Miami, Florida, 33199, USA) e-mail: gitolstov@fian.smr.ru

Квантово-химические расчёты, методы вычислительной гидродинамики (CFD-моделирование), и изотермическое приближение были применены для интерпретации экспериментальных измерений реакции C₆H₅ + O₂ в высокотемпературном микрореакторе и падения давления в его трубке. Применение изотермического приближения позволяет вывести аналитические зависимости между кинетическими, газовыми и геометрическими параметрами микрореактора, которые, наряду с CFD-моделированием, точно предсказывают результаты эксперимента.

Ключевые слова: фенил-радикал, CFD-моделирование, ab initio расчёты.

1. ВВЕДЕНИЕ

Полициклические ароматические углеводороды (ПАУ) являются одними распространенных загрязнителей ИЗ самых И служат В качестве предшественников в образовании сажи при горении углеводородов [1, 2]. На первом этапе образуются простейшие ПАУ, такие как бензол, нафталин, фенантрен, пирен, в дальнейшем они укрупняются, образуя индин, фуллерены, наночастицы, твердофазные частицы, включая угольную пыль, частицы графена и наконец сажу. Одним из ключевых моментов в образовании ПАУ являются процессы В которых задействованы простейшие • ароматические соединения, это бензол (C₆H₆) и его активный радикал фенил (C₆H₅). Реакции окисления фенил-радикала снижают скорость образования ПАУ, тогда как реакции с углеводородными соединениями, такими как С₂H₂ и С₄Н₄ ведут к укрупнению размеров ПАУ [2,3]. Поэтому реакции радикал фенила занимают ключевые позиции в кинетических моделях ПАУ и сажи.

Перспективным экспериментальным методом исследования кинетики процессов распада и синтеза углеводородных соединений является использование высокотемпературного микрореактора (BTMP) из карбида кремния интегрированного в фотоионизационный масс-спектрометр (ФИМС) [4]. Однако, для извлечения кинетической информации из экспериментальных данных требуется, на первом этапе определение с помощью квантовохимических методов механизма реакции с константами скоростей реакций и построение физико-химической модели и с проведением CFD-моделирования, чему и посвящена данная работа.

2. АВ INITIO РАСЧЁТЫ

Зависящие от давления и температуры константы скоростей И коэффициенты ветвления продуктов для реакций окисления фенил-радикала находились с привлечением квантово-химических расчетов высокого уровня и метода RRKM-ME в комбинации с решением основного кинетического уравнения [5]. Геометрии реагентов, продуктов, различных промежуточных и переходных состояний, определяющих механизм реакции, были определены с использованием гибридного функционала плотности B3LYP/6-311G(d,p) [6]. Колебательные частоты и энергии нулевых колебаний E(ZPE) вычислялись этим же методом и использовались в окончательных расчётах кинетических констант. В то же время одноточечные энергии (E₀[G3(MP2,CC)]) для профиля поверхности потенциальной энергии уточнялись с использованием модифицированной комбинированной схемы G3(MP2,CC)//B3LYP:

$$E_{0}[G3(MP2,CC)] = E_{0}[CCSD(T) / 6 - 311G^{**}] + \Delta EMP2 + E(ZPE), \quad (1)$$

где E[CCSD(T)/6-311G^{**}] – энергия, полученная при помощи ограниченного метода связанных кластеров с одно- и двукратными возбуждениями и учётом методом теории возмущения тройных возбуждений, молекулярные орбитали для расчёта которых предварительно были определены с использованием ограниченного метода Хартри-Фока для открытых оболочек (RHF-RCCSD(T));

$$\Delta EMP2 = E[MP2/G3Large] - E[MP2/6-311G^{**}], \qquad (2)$$

где ΔЕМР2 – коррекция, обусловленная применением более широкого базиса и рассчитываемая на основе неограниченной теории возмущений Мёллера-Плессета (UMP2). Точность вычисленных значений относительных энергий составляет 1-2 ккал/моль. Все вычисления ab initio были выполнены с использованием программных пакетов GAUSSIAN 09 [7] и MOLPRO 2010 [8]. Вычисления констант скоростей производились в программном пакете MESS (Master Equation System Solver) [5].

3. СFD-МОДЕЛИРОВАНИЕ

Пакет программ COMSOL Multiphysics использовался для расчета распределения газодинамических параметров потока газа в ВТМР. При физико-химических моделировании процессов микрореакторе В одновременно решались следующие задачи: омический нагрев стенки реактора, теплообмен между узлами микрореактора, радиационный теплообмен в окружающее пространство, массо- и теплопередача в потоке газа процесса пиролиза. Начальные кинетика данные расчетов И ДЛЯ соответствовали условиям эксперимента. Электрическую мощность, идущую на нагрев реактора, подбирали так, чтобы обеспечить наблюдаемую на эксперименте температуру реактора T_r. Расчеты с включением теплообмена между трубкой и газовым потоком показывали, что потерями мощности, идущей на нагрев газа, можно пренебречь, что позволяло разделить явления и решать задачи омического нагрева трубки и теплопереноса между твердыми компонентами системы первыми, без учета динамики газовой фазы. Далее с заданным распределением температуры стенок реактора численно находились кинетические характеристики газодинамические И газового потока. Статическое входное и выходное давления подбирались методом итераций таким образом, чтобы расчетный и экспериментальные значения расхода газа совпадали с некоторой заданной точностью. Одновременно с этим обеспечивалось равенство осевой скорости газа на выходе ВТМР звуковой. Полученное распределение температуры, давления и скорости использовалось при решении задачи массопереноса компонентов, участвующих в реакциях.

В таблице 1 перечислены основные реакции, учтенные в кинетической схеме. Значения констант скоростей k_{1f} и k_{1r} взяты из NIST Chemistry WebBook [9]. Остальные значения констант были рассчитаны квантово-химическими методами высокого уровня и точности в ходе выполнения данной работы.

Nº	k i	Уравнение реакции	Выражение константы, см ⁶ ·моль ⁻² ·с ⁻¹ , см ³ ·моль ⁻¹ ·с ⁻¹ , или с ⁻¹
1	k_{1f}	$\begin{array}{c} C_6H_5NO \rightarrow \\ C_6H_5 + NO \end{array}$	$1,52 \times 10^{17} \times e^{\left(\frac{-55200}{1,987 \times T}\right)}$
2	k _{1r}	$\begin{array}{c} C_6H_5 + NO \rightarrow \\ C_6H_5NO \end{array}$	$6,18 \times 10^{12} \times e^{\left(\frac{-1940}{8,31 \times T}\right)}$
3	k _{2f} P2		$1,04\times10^{-2}\times T^{-2,5752}\times e^{\left(\frac{-5554,9}{T}\right)}+1,35\times10^{-14}\times T^{0,76696}\times e^{\left(\frac{-853,08}{T}\right)},$
			при давлении в 0.01 атм
	k _{2f} P3	$C_6H_5 + O_2 \rightarrow C_2H_2O + O_2$	$3 \times 10^{4} \times T^{-4,5312} \times e^{\left(\frac{-7945,4}{T}\right)} + 1,82 \times 10^{-11} \times T^{-0,0497} \times e^{\left(\frac{-2074,2}{T}\right)},$ при
		C	давлении в 0.1 атм
	k _{2f}		$k_{2f}P2 + \frac{(k_{2f}P3 - k_{2f}P2)}{\ln 10} \ln \left(\frac{p}{1333, 3 \times 7, 4}\right)$, при заданном
			давлении
4	k _{2r} P2	rP2	$6,454 \times 10^{6} \times T^{-5,2898} \times e^{\left(\frac{-7751,7}{T}\right)} + 8,6058 \times 10^{-7} \times T^{-1,2622} \times e^{\left(\frac{-6197,8}{T}\right)},$
		-	при давлении в 0.01 атм
	k _{2r} P3	$\begin{array}{c} C_6H_5O + O \rightarrow \\ C_6H_5 + O_2 \end{array}$	$2,2322 \times 10^{10} \times T^{-6,1322} \times e^{\left(\frac{.9635,6}{T}\right)} + 29,052 \times T^{-3,2021} \times e^{\left(\frac{.11862}{T}\right)},$
			при давлении в 0.1 атм
	k _{2r}		$k_{2r}P2 + \frac{(k_{2r}P3 - k_{2r}P2)}{\ln 10} \ln \left(\frac{p}{1333, 3 \times 7, 4}\right)$, при заданном
			давлении
5	k ₃ P2		5,38×10 ⁸⁶ × $T^{-21,671}$ × $e^{\left(\frac{-46200}{T}\right)}$ +3,46×10 ⁴⁷ × $T^{-10,621}$ × $e^{\left(\frac{-33050}{T}\right)}$, при
		-	давлении в 0.01 атм
	k ₃ P3	$\begin{vmatrix} C_6H_5O \rightarrow C_5H_5 \\ + CO \end{vmatrix}$	2,13×10 ¹⁸ × $T^{-1,3138}$ × $e^{\left(\frac{-28349}{T}\right)}$ - 2,48×10 ⁴³ × $T^{-8,0814}$ × $e^{\left(\frac{-41058}{T}\right)}$, при
		-	$(l_{z} \mathbf{P}_{z} - l_{z} \mathbf{P}_{z}) = (l_{z} \mathbf{P}_{z} - l_{z} \mathbf{P}_{z})$
	k 3		$k_{3}P2 + \frac{(k_{3}P3 - k_{3}P2)}{\ln 10} \ln \left(\frac{p}{1333, 3 \times 7, 4} \right)$, при заданном
			давлении
N⁰	k i	Уравнение	Выражение константы, см ⁶ ·моль ⁻² ·с ⁻¹ , см ³ ·моль ⁻¹ ·с ⁻¹ ,
		реакции	ИЛИ С-1 (_1757 1)
6	k4P2		$2,22 \times 10^{-9} \times T^{-1,3104} \times e^{\left(\frac{-1.57}{T}\right)}$, при давлении в 0.01 атм
	k ₄ P3	$C_6H_5 + O_2 \rightarrow$	$2,91 \times 10^{-7} \times T^{-1,8901} \times e^{\left(\frac{-2683,3}{T}\right)}$, при давлении в 0.1 атм
	k4	$C_{5115} + CO_2$	$k_4P2 + \frac{(k_4P3 - k_4P2)}{\ln 10} \ln \left(\frac{p}{1333, 3 \times 7, 4} \right)$, при заданном
			давлении

Таблица 1. Список реакций и их константы скорости в системе C₆H₅NO + O₂.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ

Распределение мольной доли молекул C_6H_5NO , C_6H_5 , C_5H_5 , при разных температурах, показано на рисунке 1. Анализ показал, что на первом этапе образуется преимущественно C_6H_5O в реакции (2f) и C_5H_5 в реакции (4). C_6H_5O распадается или с образованием C_5H_5 в реакции (5) или в другие компоненты, приведенные в таблице 1. Убыль C_5H_5 во вторичных реакциях незначительна.



*Рис. 1. Распределение мольной доли веществ в системе С*₆*H*₅*NO*+*O*₂ вдоль трубки реактора при разных температурах

В системе $C_6H_5NO + O_2$ при $T_r = 1000$ К распадается весь C_6H_5NO . Согласно расчету, отношение C_5H_5 к распавшемуся C_6H_5NO составляет 22%, что согласуется с полученными из экспериментальных данных 30,5±3,8%. Моделирование процесса при T_r = 873 К показывает, что, как и в эксперименте распадается не весь исходный C₆H₅NO. Найденный коэффициент ветвления для C_5H_5 равняется 21%, в то время как на эксперименте наблюдается 6,6%. Отметим, что точность значений констант скорости полученных квантовохимическими методами находится в пределах фактора 2 [10]. Если, использовать для $T_r = 873 \text{ K}$ константу скорости реакции $C_6H_5 + O_2 \rightarrow$ $C_{5}H_{5} + CO_{2}$, уменьшенную вдвое (k_4) при 873 K, 18,5 Topp равна $7,1 \times 10^{11}$ см³ моль⁻¹ с⁻¹), то коэффициент ветвления становится равным 12,5%, что с учетом точности измерения температуры в ВТМР близко к экспериментальному значению.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, показано, что CFD-моделирование является мощным инструментом для понимания сложных физических и химических процессов внутри BTMP и для количественного определения наблюдаемых коэффициентов ветвления. Дальнейшая работа с использованием BTMP будет направлена на систематическое исследование процессов роста ПАУ посредством HACA и HAVA механизмов, приводящих к образованию трех- и даже четырехчленных ПАУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. H. Richter, J.B. Howard Formation and consumption of single-ring aromatic hydrocarbons and their precursors in premixed acetylene, ethylene and benzene flames. // Phys. Chem. Chem. Phys., 2002, v. 4, pp. 2038-2055.
- 2. M. Frenklach Reaction mechanism of soot formation in flames. // Phys. Chem. Chem. Phys., 2002, v.4, pp. 2028-2037.
- L. Zhao et. al. VUV Photoionization Study of the Formation of the Simplest Polycyclic Aromatic Hydrocarbon: Naphthalene (C₁₀H₈). // J. Phys. Chem. Lett., 2018, v. 9, pp. 2620-2626.
- 4. D.S. Parker, R.I. Kaiser, T.P. Troy, O. Kostko, M. Ahmed, A.M. Mebel, Toward the oxidation of the phenyl radical and prevention of PAH formation in combustion systems. // J. Phys. Chem. A., 2014, v. 119, pp. 7145-7154.
- 5. Georgievskii, Y., Klippenstein S.J. Master Equation System Solver 2015
- 6. A.D. Becke, Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. // J. Chem. Phys., 1993, v. 98, pp. 5648-5652.
- M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, Gaussian 09, revision B.01 // Gaussian, Inc.: Wallingford, CT. – 2010
- H.-J. Werner, P.J. Knowles, G. Knizia, F.R. Manby, M. Schütz, MOLPRO, version 2010.1, a package of ab initio programs. // URL: http://www.molpro.net, (date of reference 10.01.2020).
- 9. NIST Chemistry WebBook: The National Institute of Standards and Technology, NIST URL: webbook.nist.gov. (date of reference: 10.01.2020)
- 10.A.W. Jasper, K.M. Pelzer, J.A. Miller, Predictive a priori pressure-dependent kinetics. // Science, 2014, v. 346, p. 1212-1215.

MECHANISM OF PHENYL RADICAL DESTRUCTION UNDER COMBUSTION CONDITIONS

<u>G.I. Tolstov</u>^{1,2}, I.A. Medvedkov², D.P. Porfiriev^{1,2}, M.V. Zagidullin^{1,2}, A.M. Mebel^{1,3}, V.N. Azyazov^{1,2}

¹Samara National Research University, (Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086) ²Lebedev Physical Institute, Samara Branch (Novo-Sadovaya str., 221, Samara, Russia, 443011) ³Florida International University (Miami, Florida, 33199, USA) e-mail: gitolstov@fian.smr.ru

chemical calculations, computational dynamics Quantum fluid (CFD-modeling) simulations, and isothermal approximation were applied for the interpretation of experimental measurements of the reaction of C₆H₅+O₂ in the hightemperature microreactor and of the pressure drop in the flow tube of the reactor. Applying isothermal approximation allows the derivation of analytical relationships between the kinetic, gas flow, and geometrical parameters of the microreactor, which, along with CFD simulations, accurately predict the experimental observations. The analysis showed that at the first stage, mainly C_6H_5O is formed in reaction $C_6H_5 + O_2 \rightarrow C_6H_5O + O$ and C_5H_5 in reaction $C_6H_5 + O_2 \rightarrow C_5H_5 + CO_2$. C_6H_5O decomposes either with the formation of C_5H_5 in reaction $C_6H_5O \rightarrow C_5H_5 +$ CO or into other components. The decrease in C_5H_5 in secondary reactions is insignificant. It has been demonstrated that CFD modeling is a powerful tool for understanding the complex physical and chemical processes inside a micro-reactor.

Keywords: phenyl radical, CFD-modeling, ab initio calculations.

ПРИМЕНЕНИЕ АПКОНВЕРСИОННЫХ НАНОЧАСТИЦ NAYF4:YB,ER ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА ДЕНАТУРАЦИИ ВНУТРИ БИОЛОГИЧЕСКИХ ТКАНЕЙ

<u>С.О. Усталков</u>¹, А.А. Скапцов¹, А.Х.М. Мохаммед¹, А.М. Захаревич¹, А.А. Козырев², Е.А. Сагайдачная¹, В.И. Кочубей^{1,3}

¹ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского» (410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83)
 ²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», (115409, г. Москва, Каширское ш., 31)
 ³Национальный исследовательский Томский государственный университет, (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36) е-mail: ustalkovsergey@gmail.com

В работе описан метод измерения динамики внутренней температуры биологических тканей и толщины денатурированного слоя в процессе лазерного термолиза по люминесценции апконверсионных наночастиц NaYF₄:Yb,Er. Исследованы общие закономерности денатурации овальбумина методом плазмонно-резонансной фототермотерапии.

Ключевые слова: плазмонно-резонансная фототермотерапия, яичный альбумин, нанотермометрия, люминесценция, апконверсионные наночастицы.

1. ВВЕДЕНИЕ

время разработка методов B настоящее адресной денатурации биологических тканей является актуальной задачей. Существует множество различных методов терапевтического воздействия на онкологические ткани, которых следует выделить плазмонно-резонансной среди метод $(\Pi \Phi TT)$ фототермотерапии [1]. Его суть заключается В лазерноиндуцированном нагреве плазмонно-резонансных наночастиц, накопленных в биологической определенной области ткани, гибель что вызывает злокачественных клеток.

В свою очередь, для благоприятного проведения ПФТТ существует необходимость в контроле над приведенной к биоткани дозой тепла. Одним из способов решения этой проблемы является люминесцентная нанотермометрия. Так, в область, которую необходимо подвергнуть

гипертермии, доставляются люминесцентные зонды, чей люминесцентный отклик обладает термочувствительными свойствами. Однако термическое воздействие в процессе ПФТТ приводит к денатурации биоткани, в связи с чем меняются и ее оптические свойства. Этот фактор создает препятствия для качественного измерения температуры люминесцентным методом, тем самым поднимается необходимость в решении данной проблемы.

В качестве цели данной работы поставлена разработка и апробация метода измерения объема денатурированной ткани и внутренней температуры яичного альбумина при его лазерной гипертермии. В качестве люминесцентных зондов выбраны наночастицы NaYF₄:Yb,Er.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

поставленной была Для выполнения цели проведена серия ΠΦΤΤ, экспериментов. Необходимо было провести установить температурные зависимости спектров люминесценции апконверсионных наночастиц NaYF₄:Yb,Er, определить коэффициент ослабления денатурированного яичного альбумина, а затем выполнить апробацию метода. В ходе работ интерес представляли длины волн 531, 546 и 666 нм.

ПФТТ проводилась следующим образом. Яичный альбумин смешивался с золотыми наностержнями [2], максимум плазмонного резонанса которых находится на длине волны 780 нм. Биологическая ткань размещалась в чашке Петри, толщина слоя образца составляла 3 мм. Возбуждение плазмонного резонанса осуществлялось диодным лазером с длиной волны 808 нм и диаметром пучка 5,1 мм, мощности излучения составляли от 0,5 до 2 Вт. В процессе ПФТТ фиксировались мощность прошедшего через образец пучка посредством измерителя мощности, поверхностная температура объекта посредством ИК тепловизора и динамика процесса денатурации посредством видеозаписи.

температурных Для установления зависимостей спектров люминесценции апконверсионные наночастицы NaYF₄:Yb,Er размещались на нагревательном элементе. Люминесценция возбуждалась лазерным излучением с длиной волны 980 нм и плотностью мощности 1 Вт/см². В процессе облучения с помощью ИК тепловизора регистрировалась температура наночастиц, люминесценция детектировалась волоконным полихроматором. Для установления температурных зависимостей использовалось следующее выражение:

$$\frac{I_{\lambda_1}}{I_{\lambda_2}} = \exp\left(C_{\lambda_1,\lambda_2} - \frac{\varepsilon_{\lambda_1,\lambda_2}}{kT}\right),\tag{1}$$

где I_{λ} – интенсивность люминесценции на длине волны λ , C_{λ_1,λ_2} – коэффициент подгонки, $\varepsilon_{\lambda_1,\lambda_2}$ – разность между энергетическими величинами, которым соответствуют энергии перехода с выделением квантов света с длинами волн λ_1 и λ_2 , k – постоянная Больцмана, T – термодинамическая температура.

Коэффициент ослабления денатурированного яичного альбумина измерялся в несколько этапов. Яичный альбумин помещался между двух предметных стекол, между которыми располагалась прокладка, задающая необходимую толщину биоткани. Предметные стекла, обернутые в защитную пленку, помещались в воду с температурой 95°C на 10 минут. После чего у денатурированного образца измерялись толщина при помощи оптического микроскопа и спектры пропускания при помощи волоконного полихроматора. При измерении спектров пропускания использовался вольфрамовый галогеновый источник света.

Апробация метода проводилась с использованием фантома биологической ткани [3] толщиной 2 мм и оптической плотностью на длине волны 980 нм более 2, размещенного на дне чашки Петри. На поверхности фантома размещались апконверсионные наночастицы NaYF₄:Yb,Er. Яичный альбумин толщиною 3 мм помещался в чашку Петри над фантомом. Люминесценция апконверсионных наночастиц возбуждалась лазерным излучением с длиной волны 980 нм и плотностью мощности 5 Вт/см². В процессе облучения с помощью ИК тепловизора регистрировалась температура поверхности биоткани, люминесценция наночастиц детектировалась волоконным полихроматором, динамика денатурации образца регистрировалась видеокамерой. Для данного метода был разработан следующий математический аппарат. Известно, что свет при прохождении через слой биоткани поглощается:

$$I_{\lambda} = I_{\lambda}^{0} \exp(-\alpha_{\lambda} l), \qquad (2)$$

где α_{λ} – коэффициент ослабления света, проходящего через биоткань толщиной l, на длине волны λ , I_{λ}^{0} – начальная интенсивность света на длине волны λ . При подстановке (2) в (1), использовании длин волн 531, 546 и 666 нм и решении получившейся системы получим:

$$\begin{cases} l = \frac{1}{\beta_{546,531}} \frac{\varepsilon^* (C_{666,531} - \ln(I_{666,531}^*)) - (C_{546,531} - \ln(I_{546,531}^*))}{1 - \varepsilon^* \beta^*}, \\ T = \frac{\varepsilon_{666,531}}{k} \frac{1 - \varepsilon^* \beta^*}{(C_{666,531} - \ln(I_{666,531}^*)) - \beta^* (C_{546,531} - \ln(I_{546,531}^*))} \end{cases}$$
(3)

где $\beta_{\lambda_1,\lambda_2} = \alpha_{\lambda_2} - \alpha_{\lambda_1}$, $\varepsilon^* = \varepsilon_{546,531} / \varepsilon_{666,531}$, $I_{\lambda_1,\lambda_2}^* = I_{\lambda_1} / I_{\lambda_2}$, $\beta^* == \beta_{666,531} / \beta_{546,531}$. Таким образом, из (3) видно, как, зная интенсивности люминесценции трех спектральных линий, можно определить температуру и толщину слоя денатурированной биоткани.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты ПФТТ яичного альбумина представлены на рисунке 1. Оценка объема денатурированной биоткани выполнялась по записанной видеозаписи. Объем рассчитывался исходя из того, что денатурация происходила равномерно во все стороны, т.е. область денатурации имела форму сферы. Как видно из рисунка 1, зависимость между объемом денатурированной ткани и поглощенной энергией носит линейный характер.

В ходе измерения температурных зависимостей спектров люминесценции апконверсионных наночастиц NaYF₄: Yb,Er и аппроксимации полученных данных по формуле (1) установлено, что $C_{546,531} = -2,331$, $\Delta \varepsilon_{546,531} = -0,07846$ эВ, $C_{666,531} = -8,912$, $\Delta \varepsilon_{666,531} = -0,1896$ эВ.



Рис. 1. Зависимость объема денатурированной ткани от поглощенной энергии для различных плотностей мощности лазерного облучения: ■ – 9,8 Вт/см², ● – 7,3 Вт/см², ▲ – 4,9 Вт/см²

После аппроксимации формулой (2) экспериментальных данных яичного альбумина установлено, что коэффициенты ослабления денатурированного яичного альбумина на длинах волн 531, 546 и 666 равны: $\alpha_{531} = 162 \text{ см}^{-1}$, $\alpha_{546} = 157 \text{ см}^{-1}$, $\alpha_{666} = 118 \text{ см}^{-1}$.

Последний эксперимент, проведенный в ходе данной работы, связанный с апробацией разработанного метода, дал следующие результаты. Динамика изменения температуры, восстановленной по спектрам люминесценции апконверсионных наночастиц NaYF₄:Yb,Er, представлена на рисунке 2. Для расчета температуры использовались как классический метод (формула (1)), широко используемый в настоящее время, так и разработанный метод (формула (3)). Аппроксимация изменения температуры ΔT с течением времени *t* выполнялась:

$$\Delta T(t) = \Delta T_m (1 - \exp(-t/\tau)), \qquad (4)$$

где ΔT_m – максимально возможное относительное изменение температуры, τ подгонки. Результаты аппроксимации коэффициент следующие: $(\Delta T_m)_1 = 43.1^{\circ}\text{C}, \ (\tau)_1 = 22.9 \text{ c}, \ (\Delta T_m)_2 = 56.5^{\circ}\text{C}, \ (\tau)_2 = 60.3 \text{ c}, \ (\Delta T_m)_3 = 352^{\circ}\text{C},$ $(\tau)_3 = 19,7$ с. Как видно, динамика относительного изменения температуры, полученного по спектрам люминесценции апконверсионных наночастиц NaYF₄:Yb,Er классическим методом (кривые 2 и 3 на рисунке 2), искажена, что является следствием отличия коэффициентов ослабления денатурированного яичного альбумина на разных длинах волн друг от друга. Причем, чем сильнее отличаются друг от друга коэффициенты ослабления для двух длин волн, тем сильнее искажение. При использовании классического метода расчета температуры для близлежащих полос люминесценции в зеленой области спектра скорость нагрева уменьшается по мере увеличения рассеивающего слоя, а максимально возможная относительная температура растет. Для полос люминесценции с длинами волн 531 и 666 nm максимально возможная относительная температура сильно завышается за счет большой разности коэффициентов ослабления для данных длин волн денатурированного альбумина. На рисунке 3 представлена зависимость объема денатурированной биоткани от поглощенной энергии. Объем рассчитывался исходя из того, что денатурированная область имела форму диска, где диаметр диска оценивался по видеозаписи, а толщина денатурированного слоя определялась по спектрам люминесценции апконверсионных наночастиц NaYF₄:Yb,Er с использованием формулы (3).



Рис. 2. Динамика относительного изменения температуры, определенному no: 1) ■ – разработанному методу (формула (3)), 2) • – классическому методу для длин волн 531 и 546 нм (формула (1)), 3) ▲ – классическому методу для длин волн 531 и 666 нм (формула (1))



Рис. 3. Зависимость объема денатурированной ткани, измеренного с помощью разработанного метода, от поглощенной энергии

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в ходе работы показано, что, в связи с денатурацией биоткани температура, измеренная люминесцентным методом, искажается. Разработанный метод по применению трех полос люминесценции прошел успешную апробацию и показал возможность одновременного определения температуры внутри биологического образца и толщины денатурированной ткани. Объем денатурированной ткани линейно зависит от дозы поглощенной энергии.

Исследование выполнено при поддержке гранта российского научного фонда (проект № 19-12-00118).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- X. Huang, P.K. Jain, I.H. El-Sayed, M.A. El-Sayed, Plasmonic photothermal therapy (PPTT) using gold nanoparticles // Lasers Med. Sci., 2008, v. 23, p. 217-228.
- Г.С. Терентюк, А.В. Иванов, Н.И. Полянская, И.Л. Максимова, А.А. Скапцов, Д.С. Чумаков, Б.Н. Хлебцов, Н.Г. Хлебцов // Квант. электрон., 2012, т. 42, № 5, стр. 380-389.
- 3. А.Х.М. Мохаммед, С.О. Усталков, Е.А. Сагайдачная, В.И. Кочубей, А.А. Скапцов, Создание и свойства фантомов биологической ткани, содержащих наночастицы. // Инженерный вестник Дона, 2019, №2, URL: http://www.ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2019/5750

APPLICATION OF NAYF4:YB,ER UPCONVERSION NANOPARTICLES TO STUDY THE PROCESS OF DENATURATION INSIDE BIOLOGICAL TISSUES

S.O. Ustalkov¹, A.A. Skaptsov¹, A.H.M. Mohammed¹, A.M. Zakharevich¹, A.A. Kozyrev², E.A. Sagaidachnaya¹, V.I. Kochubey^{1,3}

¹Saratov National Research State University (Astrakhanskaya str., 83, Saratov, Russia, 410012) ²National Research Nuclear University "MEPhI", (Kashirskoe hwy, 31, Moscow, Russia, 115409) ³National Research Tomsk State University, (Lenin Avenue, 36, Tomsk, Russia, 634050) e-mail: ustalkovsergey@gmail.com

A method of measuring the internal temperature dynamics of biological tissues and the denatured layer thickness during laser thermolysis by luminescence of NaYF₄:Yb,Er upconversion nanoparticles is described. The general patterns of ovalbumin denaturation were studied by plasmonic photothermal therapy.

Keywords: plasmonic photothermal therapy, ovalbumin, nanothermometry, luminescence, upconversion nanoparticles.

ГИГАНТСКОЕ УСИЛЕНИЕ РАМАНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА В БЛИЖНЕЙ ИК-ОБЛАСТИ СПЕКТРА

<u>Я.В. Федотова</u>, В.И. Кукушкин, Е.Н. Морозова, В.Е. Кирпичев, В.В. Соловьев, И.В. Кукушкин

Институт физики твердого тела РАН (142432, Московская область, г. Черноголовка, ул. Академика Осипьяна, 2) e-mail: grishina@issp.ac.ru

В данной работе были исследованы свойства металл-диэлектрических периодических структур, покрытых толстым слоем металла, которые обеспечивают усиление интенсивности рамановского рассеяния света вплоть до $2 \cdot 10^8$ при длине волны лазерного возбуждения 1064 нм. Было показано, что гигантское резонансное усиление рамановского сигнала В ближней инфракрасной области спектра достигается за счёт комбинации плазменного дополнительного геометрического резонанса между длиной волны И излучения размерами диэлектрического столбика. В лазерного И периодических диэлектрических структурах изучена зависимость коэффициента усиления сигнала неупругого рассеяния света от таких геометрических параметров, как высота, размер столбика и зазор между ними. Также устанавливалась зависимость усиления от толщины металлического покрытия. Обнаружены новые резонансные моды, соответствующие определённым размерам столбиков, периоду и высоте. Показано, что в ближней инфракрасной области спектра данные структуры демонстрируют рекордно большие коэффициенты усиления неупругого рассеяния света, что связано также с высокой добротностью плазменных волн в металлах при этих частотах.

Ключевые слова: SERS, ИК-возбуждение, плазмон-поляритонный резонанс, метаструктуры, нанофотоника.

1. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время в биофизику и в медицину все больше внедряются методы оптической спектроскопии, при этом основными являются задачи идентификации органических молекул, включая мониторинг их структурных изменений. Также эти методы широко используются для контроля процессов на химических производствах, для диагностики различных заболеваний и выявления вирусов и бактерий, в системах безопасности – для обнаружения

опасных взрывчатых и токсичных веществ, в промышленности – для контроля продуктов и сырья. Благодаря возбуждению разных специфических вращательных и колебательных мод, рамановская спектроскопия позволяет распознавать органические молекулы по спектрам неупругого рассеяния света, благодаря чему хорошо подходит для достижения этих целей.

Чтобы обеспечить одномолекулярную чувствительность SERS-методов, необходимо продолжать усиливать локальное электромагнитное (ЭМ) поле. Для этого недостаточно использовать лишь плазменный резонанс в металлических наноструктурах. Нужно комбинированное воздействие с использованием диэлектрического резонанса, имеющего место в диэлектрических метаматериалах. В диэлектрических структурах подобным образом работают брэгговские зеркала [1, 2], в которых локальное ЭМ поле усиливается в сотни раз [3, 4]. Совместное действие этих двух эффектов [5] поможет получить контролируемое усиление сигнала SERS на 8 порядков.

2. ПЕРВЫЕ ГИБРИДНЫЕ МЕТАЛЛ-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ

Основные результаты опубликованы в работе [6].

На рисунке 1 показана зависимость коэффициента k_D дополнительного счёт модуляции поверхности структуры) усиления SERS (3a ДЛЯ комбинированной структуры от параметра а (планарный размер столбика), измеренная при фиксированном значении h = 130 нм (высота столбика) и длинах волн лазера λ =488, 532 и 568 нм. Видно, что положения максимумов k_D (**a**) отслеживают длину волны лазера. Чем больше длина волны, тем при больших значениях параметра а наблюдаются максимумы усиления рамановского рассеяния света. На вставке к рисунку 16 представлена зависимость параметра amax от длины волны лазера, из которой видно, что наблюдаемый в эксперименте сдвиг **а**_{max} полностью соответствует формуле (1).



Рисунок 1. Зависимости дополнительного к SERS коэффициента усиления только за счёт диэлектрического резонатора от планарного размера кварцевого столбика, измеренные на структуре с h = 130 нм для длин волн лазера 488, 532 и 568 нм. На вставке показана зависимость размера a_{max}, при котором наблюдается основной максимум дополнительного усиления рассеяния om длины Пунктир рамановского света, волны лазера. соответствует зависимости, отвечающей формуле (1). Рисунок из работы [6].

Для квадратного резонатора указанная связь определяется соотношением:

$$a = \frac{\lambda}{2} \cdot \sqrt{\frac{n^2 + m^2}{\epsilon}},\tag{1}$$

где λ – длина волны лазера, $\epsilon = 2.6$ – диэлектрическая проницаемость окисла, определённая непосредственно из интерференционной картины, возникающей в спектре отражения от подложки Si/SiO₂, n и m – постоянные, характеризующие номер моды резонатора. При $\lambda = 532$ нм для основной моды (n=m=1) получается, что основной максимум соответствует параметру **a** = 233 нм, что неплохо соотносится с экспериментальным значением 210 нм. Наблюдение дополнительных максимумов на зависимости k_D (**a**) отвечает проявлению возбуждённых мод диэлектрического резонатора.

3. МОДУЛИРОВАННЫЕ ПЕРИОДИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ С ТОЛСТЫМ МЕТАЛЛИЧЕСКИМ ПОКРЫТИЕМ

Основные результаты опубликованы в работе [7].

Чтобы устранить проблему, связанную с неоднородностью коэффициента усиления рамановского рассеяния света по поверхности диэлектрической подложки, покрытой гранулированным слоем серебра, были исследованы периодические структуры с плавно меняющимися геометрическими параметрами. Избежать разбиения металлического покрытия на гранулы удалось благодаря последовательному увеличению толщины его слоя с 6 до 10-80 нм (в качестве наиболее перспективных использовались Ag, Au, Cu). На рисунке 2 показана зависимость абсолютного коэффициента гигантского усиления рамановского рассеяния от толщины металлического покрытия. В случае областей с диэлектрическими столбиками, покрытыми металлом толщиной **d**, в областях с оптимизированными геометрическими параметрами наблюдается практически постоянный коэффициент усиления рамановского рассеяния, имеющий слабовыраженный максимум при d = 40 нм и отвечающий усилению $(1-2) \cdot 10^6$, что не уступает случаю серебряных гранул.



Рисунок 2. Зависимости абсолютного коэффициента гигантского рамановского рассеяния света от толщины серебряного покрытия *d*, измеренные на гладкой (полые символы) и на модулированной частях структуры с максимальным рамановским сигналом (сплошные символы). λ = 532 нм, высота столбиков (*h* = 130 нм). Для сравнения показан уровень неусиленного рамановского сигнала, полученного с ровной диэлектрической (кварцевой) подложки. Рисунок из работы [7].

4. МЕТАСТРУКТУРЫ, ОБЕСПЕЧИВАЮЩИЕ SERS В БЛИЖНЕЙ ИК-ОБЛАСТИ СПЕКТРА

В данном разделе кратко описываются результаты исследований структур, обеспечивающих гигантское усиление рамановского рассеяния света в ближней ИК-области спектра. Основные результаты опубликованы в работе [8].

Для нахождения максимума SERS-усиления производился перебор по таким геометрическим параметрам, как размер столбика, зазор между ними, высота столбика и толщина металлического покрытия.

Для определения абсолютной величины SERS-усиления при длине волны лазерного возбуждения 1064 нм, использовалась стандартная процедура, описанная в работе [9]. На рисунке 3 тёмными символами показана измеренная зависимость (линейная) объёмного рамановского сигнала от концентрации аналита (в данном случае показаны результаты для тиофенола – хорошего SERS-репортера), а также пересчитанная зависимость от числа молекул тиофенола в лазерном луче (при этом толщина раствора была равна глубине фокусировки лазерного луча). С другой стороны, была измерена интенсивность рамановского сигнала на однородных SERS-подложках большого размера (5 х 5 мм²) в зависимости от концентрации тиофенола.

Из рисунка 3 видно, что при использовании SERS-подложки удаётся измерять рамановский сигнал от тиофенола с концентрацией вплоть до 10⁻⁹ и ниже.



Рисунок 3. Зависимости интенсивности рамановского SERS-сигнала от концентрации тиофенола, измеренные на однородных SERS-подложках большого размера (5 х 5 мм²) для оптимизированной и неоптимизированной подложек. Тёмными символами также показана измеренная зависимость (линейная) рамановского сигнала от концентрации в случае объёмного тиофенола. На рисунке представлены эти результаты в зависимости от числа молекул тиофенола в лазерном луче. Рисунок из работы [8].

Этот факт однозначно свидетельствует о гигантской величине коэффициента усиления рамановского сигнала на исследованных SERS-подложках, которая при накачке 1064 нм значительно превышала 10 миллионов раз. Аккуратные измерения показывают, что при оптимальных

параметрах **a**, **d**, **h** и **t** абсолютное значение коэффициента SERS-усиления при лазерной накачке с длиной волны 1064 нм составляет $2 \cdot 10^8$.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате выполнения работы были разработаны комбинированные диэлектрические и металлические резонаторы для колоссального усиления неупругого рассеяния света и исследованы их свойства. Показано, что коэффициент усиления при использовании этих структур достигает рекордных значений 2 · 10⁸ для длины волны лазерной накачки 1064 нм.

В структурах с пространственной модуляцией высоты и латеральных размеров диэлектрика, покрытых толстым металлическим слоем (10-80 нм), обнаружено резонансное усиление гигантского рамановского рассеяния света и показано. Эффективность данного преобразования определяет соизмеримость планарного размера металлического покрытия и длины волны плазмон-поляритонной моды.

Были изготовлены и исследованы периодические диэлектрические структуры, покрытых толстым слоем металла, обеспечивающие усиление сигнала неупругого рассеяния света более чем на восемь порядков при длине волны лазерного возбуждения 1064 нм.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Greenletch, N. G., Blaber, M. G., Schatz, G. C., & Van Duyne, R. P. (2013). Plasmon-Sampled Surface-Enhanced Raman Excitation Spectroscopy on Silver Immobilized Nanorod Assemblies and Optimization for Near Infrared Studies. J. Phys. Chem. C, 117, 25.

2. Joannopoulos, J., Meade, R., & Winn, J. (1995). Molding the Flow of Light -Second Edition. Photonic Crystals, Princeton University Press, Princeton, NJ.

3. Karl, M., Kettner, B., Burger, S., Schmidt, F., & Ka, H. (2009). Dependencies of micro-pillar cavity quality factors calculated with finite element methods. Opt. Express 17, 1144.

4. Lagarkov, A. N., Kurochkin, I. S., Ryzhikov, I. A., Afanasiev, K. N., Bykov, I. V., Budashov, I., . . . Sarychev, A. K. (2014). Nanophotonic materials XI, Proceedings of SPIE, 9161.

5. Reitzenstein, S., Hoffman, C., Gorbunov, A., Strauss, M., Kwon, S. H., Schneider, C.,...Forchel, A. (2007). AlAs/GaAs micropillar cavities with quality factors exceeding 150.000. Appl. Phys. Lett., 90, 251109.

6. V. I. Kukushkin, Y. V. Grishina, S. V. Egorov, V. V. Solov'ev and I. V. Kukushkin, "Combined Dielectric and Plasmon Resonance for Giant Enhancement of Raman Scattering," JETP Letters, 103, 508, 2016.

7. V. I. Kukushkin, Y. V. Grishina, V. V. Solov'ev and I. V. Kukushkin, "Size Plasmon-Polariton Resonance and Its Contribution to the Giant Enhancement of the Raman Scattering," JETP Letters, 105, 677, 2017.

8. Y. V. Fedotova, V. I. Kukushkin, V. V. Solov'ev and I. V. Kukushkin, "Spoof plasmons enable giant Raman scattering enhancement in Near-Infrared region," Optics Express, 27(22), 2019.

9. Yablonovitch, E. (1987). Inhibited Spontaneous Emission in Solid-State Physics and Electronics. Phys. Rev. Lett. 58, 2059.

SURFACE ENHANCED RAMAN SCATTERING UNDER NEAR INFRARED EXCITATION

<u>Ya.V. Fedotova</u>, V.I. Kukushkin, E.N. Morozova, V.E. Kirpichev, V.V. Solovyev, I.V. Kukushkin

Institute of Solis State Physics RAS (Akademika Osipyana str., 2, Chernogolovka, Moscow region, Russia, 142432) e-mail: grishina@issp.ac.ru

In this work, we investigated the properties of metal-dielectric periodic structures with a thick metal coating, providing enhanced Raman scattering signal up to 2×10^8 at a laser excitation wavelength of 1064 nm. It was shown that the giant resonant enhancement of the Raman signal in the near infrared region of the spectrum is achieved due to a combination of plasma and additional geometric resonance between the laser radiation wavelength and the dielectric pillar's size. In periodic dielectric structures, the dependence of the enhancement factor of Raman scattering on such geometric parameters as the height, pillar's size and the gap between them were studied. The dependence of the enhancement on the thickness of the metal coating was also established. New resonance modes that correspond to certain column sizes, periods, and heights have been found. It was shown that in the near infrared region of the spectrum, these structures demonstrate record-high enhancement coefficients of inelastic light scattering, which is also associated with the high Q-factor of plasma waves in metals at these frequencies.

Key words: SERS, IR excitation, plasmon-polariton resonance, metastructures, nanophotonics.

ВЛИЯНИЯ ТЕРМООБРАБОТКИ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК Ge2Sb2Te5 ДЛЯ МНОГОУРОВНЕВЫХ УСТРОЙСТВ НАНОФОТОНИКИ

<u>М.Е. Федянина</u>¹, А.А. Дедкова², А.О. Якубов¹

¹Национальный исследовательский университет «МИЭТ» (124498, г. Москва, г. Зеленоград, площадь Шокина, д.1) ²ЦКП «Микросистемная техника и электронная компонентная база» МИЭТ, г. Москва, Россия (124527, г. Москва, г. Зеленоград, Солнечная аллея, д. 6) e-mail: mahamaha1996@gmail.com

Изменение оптических параметров тонких пленок Ge₂Sb₂Te₅ во время фазового перехода обуславливает перспективы ИХ применения В элементах нанофотоники. В работе энергонезависимых установлены зависимости между степенью кристалличности, оптическими свойствами и шириной запрещенной зоны тонких $Ge_2Sb_2Te_5$. оптической пленок Определены особенности процесса кристаллизации и продемонстрирована возможность многоуровневого изменения оптического сигнала, что может быть применено в элементах нейроморфных вычислительных систем.

Ключевые слова: тонкие пленки, Ge₂Sb₂Te₅, кристаллизация, степень кристалличности, оптические свойства.

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время скорость передачи и обработки информации является одним из основных параметров, определяющих быстродействие современных устройств. Уменьшение топологических размеров и проявление квантоворазмерных эффектов в элементах памяти, работающих с использованием электрических импульсов, существенно ограничивает дальнейшее развитие и усовершенствование электрических видов памяти. Одним из возможных путей повышения быстродействия является переход к оптическим способам передачи информации и полностью оптическим системам ее обработки.

Тонкие пленки GST225 под действием лазерного импульса, электрического тока или температурного воздействия изменяют фазовое состояние и, как следствие, оптические свойства, что стало основой принципа работы различного вида устройств оптической фазовой памяти. Один из таких

видов полностью оптической энергонезависимой фазовой памяти, позволяющий осуществлять управление оптическим сигналом, был изготовлен на основе тонкопленочных волновода и халькогенидного полупроводника [1]. При этом возможность формирования состояний с частичной степенью кристалличности тонких пленок Ge₂Sb₂Te₅ открывает широкие перспективы по созданию прототипов многоуровневых энергонезависимых элементов и их применения в полностью оптических нейронных вычислительных системах [2].

Однако отсутствие детальных исследований оптических свойств состояний с частичной степенью кристалличности и разброс имеющихся в научно-технической литературе данных является проблемой создания прототипов многоуровневых элементов нанофотоники, что требует проведения моделирования и отработки режимов исследования оптических параметров.

В связи с этим, целью данной работы являлось определение влияния термообработки тонких пленок материала фазовой памяти Ge₂Sb₂Te₅ на их оптические свойства и оптическую ширину запрещенной зоны, а также оценка их зависимости от степени кристалличности.

2. МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

2.1. Методика формирования образцов тонких пленок Ge₂Sb₂Te₅

Аморфные тонкие пленки $Ge_2Sb_2Te_5$ были сформированы методом магнетронного распыления мишени с использованием источника постоянного тока. Давление аргона во время распыления составляло $5,7\cdot10^{-1}$ Па, мощность - 25 Вт. В качестве подложек использовались кремниевые пластины КДБ-12 для проведения эллипсометрических исследований и стекла corning glass 1737F для спектрофотометрических.

Выбор температур для формирования состояний с частичной степенью кристалличности был сделан по результатам анализа измеренной температурной зависимости удельного сопротивления исследуемых тонких пленок Ge₂Sb₂Te₅, представленной на рисунке 1 [3].



*Puc. 1. Температурная зависимость удельного сопротивления тонкой пленки Ge*₂*Sb*₂*Te*₅ *с выбором температур термообработки*

Скорость нагрева образцов до выбранных температур составляла 5°С/мин, выдержки при достижении выбранных температур не проводилось. Измерение оптических свойств осуществлялось в диапазоне от 200 до 2500 нм с применением спектрофотометра Agilent Cary 5000 и эллипсометра Horiba Uvisel 2

2.2. Методики расчета оптических параметров и оценки оптической ширины запрещенной зоны

Оценка оптической ширины запрещенной зоны (E_g^{ont}) по результатам спектрофотометрии проводилась с помощью метода Тауца, который основан на анализе зависимостей ($\alpha h\nu$)^{1/2}, в частности на определении точки пересечения линейного участка графика с осью абсцисс В данной работе коэффициент поглощения (α) рассчитывался по формуле:

$$\alpha = -\frac{1}{x} \cdot \ln\left(\frac{T}{1-R}\right),\tag{1}$$

где x – толщина пленки, а T, R – пропускание и отражение, полученные с помощью спектрофотометрии.

Для проведения моделирования И оценки спектров показателя преломления коэффициента экстинкции (k) (n) И с применением эллипсометрии требуется задавать слоевую и математическую модели. В данной работе для тонких пленок GST225 применялась математическая модель Тауца-Лоренца. В свою очередь в качестве слоевой модели была выбрана модель Si / SiO_x / Ge₂Sb₂Te₅ / Ge₂Sb₂Te₅ и воздух (1:1), учитывающая наличие тонкого оксидного слоя на поверхности подложки до напыления (SiO_x) и шероховатость пленки (Ge₂Sb₂Te₅ и воздух (1:1).

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

На рисунке 2 представлены результаты измерения пропускания (а) и отражения (б) тонких пленок Ge₂Sb₂Te₅ с помощью спектрофотометрии. Термообработка выше 150 °C приводит к существенному смещению пиковых значений пропускания и отражения в сторону больших длин волн. Дальнейшее изменение значений после 200 °C может быть объяснено увеличением размеров зерен поликристаллической структуры [4].



Рис. 2. Спектральные зависимости пропускания (а) и отражения (б) для тонких пленок GST225

Кроме того, с применением метода Тауца проведена оценка влияния термообработки на оптическую ширину запрещенной зоны по спектрам поглощения. Установлено, что оптическая ширина запрещенной зоны изменяется от ~ 0,72 до ~ 0,40 эВ в процессе кристаллизации.

На рисунке 3 представлены результаты моделирования показателя преломления коэффициента экстинкции, И полученные с помощью результатов эллипсометрии. Термообработка тонких пленок Ge₂Sb₂Te₅ приводит к изменению значений оптических параметров (на длине волны 1550 нм n и k увеличиваются приблизительно в 1,5 раза) и смещению пиков в область больших длин волн. При этом результаты эллипсометрического анализа позволили выявить, что в процессе кристаллизации происходит уменьшение толщины тонкой пленки GST225 на 8 %, что связано с изменением плотности материала с 5,87 г/см³ для аморфного состояния до 6,33 г/см³ для кристаллического.



Рис 3 Спектральные зависимости показателя преломления (a) и коэффициента экстинкции (б) тонкой пленки Ge₂Sb₂Te₅ 215

Дополнительно была рассчитана степень кристалличности (α_{κ}) по формуле (2), характеризующая долю закристаллизованного материала.

$$\alpha_{\kappa} = \frac{\ln(\sigma) - \ln(\sigma_a)}{\ln(\sigma_c) - \ln(\sigma_a)},\tag{2}$$

где σ – проводимость исследуемой тонкой пленки, σ_a , σ_c – проводимость для 100 % аморфного образца, взятого при температуре начала фазового перехода, и 100 % кристаллического состояния для тонкой пленки с термообработкой при 250 °C соответственно. На рисунках 4 (а-в) представлены полученные зависимости показателя преломления, коэффициента экстинкции и оптической шириной запрещенной зоны тонких пленок Ge₂Sb₂Te₅ от степени их кристалличности.



Рис. 4. Влияние степени кристалличности пленок Ge₂Sb₂Te₅ на показатель преломления (а) и коэффициент экстинкции (б) на длине волны 1550 нм, а также на оптическую ширину запрещенной зоны (в)

Определено, что в диапазоне температур от 170 до 250 °C зависимости показателя преломления, коэффициента экстинкции и оптической ширины запрещенной зоны от степени кристалличности близки к линейным. Таким образом, управляя уровнем программируемого сигнала и достигая различной степени кристалличности тонких пленок можно достичь формирования набора логических состояний, различающихся друг OT друга на фиксированную величину рабочего параметра, к примеру, коэффициента экстинкции. Это позволит обеспечить надежное прогнозирование и воспроизведение результата операций программирования ячейки многоуровневой фазовой памяти.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе исследованы оптические свойства тонких пленок Ge₂Sb₂Te₅, а также их зависимости от режимов термообработки и различной
степени кристалличности. Определено, что оптическая ширина запрещенной зоны тонких пленок Ge₂Sb₂Te₅ при кристаллизации уменьшается с 0,72 эВ до 0,4 эВ, при этом существенно изменяются значения пропускания, отражения, показателя преломления и коэффициента экстинкции. Полученные результаты оценки зависимостей оптических параметров тонких пленок Ge₂Sb₂Te₅ от степени кристалличности свидетельствуют 0 возможности надежного формирования набора логических уровней. Это позволит осуществлять прогнозирование и воспроизведение промежуточных состояний в ячейках этапе разработки фазовой памяти на И создания многоуровневых запоминающих устройств нанофотоники.

Исследование выполнено при финансовой поддержке проекта РФФИ в рамках научного проекта № 18-33-20237.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- C. Rios, M. Stegmaier, P. Hosseini, D. Wang, T. Scherer, C. D. Wright, H. Bhaskaran, W. H. P. Pernice, Integrated all-photonic non-volatile multilevel memory. // Nature Photonics, 2015, v. 9, p. 725-732.
- X. Li, N. Youngblood, C. Rios, Z. Cheng, C. D. Wright, W. H. P. Pernice, H. Bhaskaran, Fast and reliable storage using a 5 bit, nonvolatile photonic memory cell. // Optica, 2019, v. 6, № 1, p. 1-6.
- P. I. Lazarenko, Yu. V. Vorobiev, M. E. Fedyanina, A. A. Sherchenkov, S. A. Kozyukhin, A. O. Yakubov, A. V. Kukin, Yu. S. Sybina, I. V. Sagunova, Peculiarities of estimating the optical band gap of thin films of phase change memory materials. // Inorganic Materials: Applied Research, 2020, v. 11, № 2, p. 330-337.
- 4. М. Е. Федянина, П. И. Лазаренко, Ю. В. Воробьев, С. А. Козюхин, А. А. Дедкова, А. О. Якубов, В. С. Левицкий, И. В. Сагунова, А. А. Шерченков, Влияние степени кристалличности на дисперсию оптических параметров тонких пленок фазовой памяти Ge₂Sb₂Te₅. // Известия вузов. Электроника, 2020, т. 25, № 3, с. 203-218.

INFLUENCE OF HEAT TREATMENR ON THE OPTICAL PROPERTIES OF Ge₂Sb₂Te₅ THIN FILMS FOR MULTI-LEVEL NANOPHOTONICS DEVICES

M.E. Fedyanina¹, A.A. Dedkova², A.O. Yakubov¹

National Research University of Electronic Technology «MIET» (Shokin sq., 1, Moscow, Zelenograd, Russia, 124498) e-mail: mahamaha1996@gmail.com

Changes in the optical parameters of Ge_2Sb_2Te5 thin films during the phase transition cause their use in non-volatile elements of nanophotonics. In this paper, the dependencies between the degree of crystallinity, optical properties, and the optical band gap of the $Ge_2Sb_2Te_5$ material are established. The features of the crystallization process are determined, and the possibility of multi-level changes in the optical signal is demonstrated, which can be applied in elements of neuromorphic computing systems.

Keywords: thin films, Ge₂Sb₂Te₅, crystallization, degree of crystallinity, optical properties.

ФОРМИРОВАНИЕ БЕЗДИФРАКЦИОННЫХ ПУЧКОВ С ЗАДАННЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ НА ОСНОВЕ ИНТЕГРАЛА УИТТЕКЕРА

П.А. Хорин

Самарский национальный исследовательский университет, (443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34) e-mail: paul.95.de@gmail.com

В работе выполнен расчет и исследование дифракционных оптических элементов (ДОЭ) для формирования бездифракционного пучка с заданным распределением на основе интеграла Уиттекера и фундаментальных свойств дифракционной оптики. Для моделирования бездифракционного пучка предложено исследовать интеграл Уиттекера и сформировать бездифракционные пучки с заданным распределением на основе бесконечно тонкого кольца.

Ключевые слова: бездифракционные пучки, интеграл Уиттекера, кольцевой спектр.

1. ВВЕДЕНИЕ

Классическими бездифракционными пучками являются моды Бесселя. Несколько менее известны пучки Матье, параболические пучки и их обобщения. Все они представляют собой решения уравнения Гельмгольца в разделимых координатных системах [1].

Общим свойством классических бездифракционных пучков является сосредоточенность пространственного спектра на узком кольце. Известны также пучки, спектр которых существенно отличается от узкого кольца, но они обладают свойствами, близкими к бездифракционным пучкам. К таким пучкам относятся пучки Эйри, Олвера и их модификации.

Особенное свойство пространственного спектра классических бездифракционных часто используется при генерации таких пучков: фокусировка излучения, ограниченного узкой кольцевой щелью впервые была использована именно для генерации пучка Бесселя. Аналогичный подход с модификацией светового был некоторой кольца использован для формирования и других бездифракционных пучков.

Очевидно, при экспериментальной генерации пучков на основе кольцевого распределения можно сформировать бездифракционные пучки лишь приближенно, так как ширина кольца не является бесконечно узкой и не обладает бесконечной энергией, как теоретически предполагается. Более того, некоторые спектральные распределения, например, у параболических пучков, имеют сингулярные точки проблематичные для экспериментальной реализации, поэтому часто формирование бездифракционных пучков осуществляется с помощью рефракционных или дифракционных оптических элементов [2].

Рассчитать комплексную функцию пропускания таких оптических элементов можно численно на основе произвольно заданного распределения на спектральном кольце, применяя преобразование Фурье или на основе интеграла Уиттекера [3].

В данной работе рассмотрена генерация различных бездифракционных пучков, имеющих заданное (аналитически или численно) распределение на кольцевом спектре с целью анализа соответствия спектрального распределения и поперечной структуры формируемых бездифракционных пучков.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ

Рассчитать произвольное поле, обладающее бездифракционными свойствами, можно на основе интеграла Уиттекера [3]:

$$U(u,v,z) = \exp[ik_z z] \int_0^{2\pi} A(\varphi) \exp[ik_t(u\cos(\varphi) + v\sin(\varphi))] d\varphi, \qquad (1)$$

где $A(\varphi)$ – функция распределения на спектральном кольце, зависящая только от угла φ , k_t – варьируемый параметр в диапазоне от 0 до k, $k = 2\pi/\lambda = k_t^2 + k_z^2$ – волновое число, λ – длина волны, z – расстояние на которое распространяется поле U(x, y).

Из преобразования (1) видно, что интеграл не зависит от пространственной переменной z, следовательно, для расчёта дифракционного рельефа можно воспользоваться следующей формулой:

$$U(x, y) = \int_{0}^{2\pi} A(\varphi) \exp\left[ik_{t}(x\cos(\varphi) + y\sin(\varphi))\right] d\varphi, \qquad (2)$$

Таким образом можно получить некоторый бездифракционный пучок, если задать любую функцию $A(\varphi)$. В широком круге задач встаёт вопрос о поиске обратного преобразования к интегралу Уиттекера с целью расчёта бездифракционного пучка с заданным поперечным распределением

интенсивности. Так как нет строго аналитического решения этой задачи, то обычно применяют различные итерационные подходы и алгоритмы перебора.

3. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Очевидно, сформировать бездифракционные пучки на основе (2) можно лишь приближенно, так как теоретически поле U(x, y) предполагается заданным на бесконечной области. При экспериментальной реализации неизбежно происходит ограничение области задания поля U(x, y). Одной из целей исследования также является определение влияния ограничений области задания поля, а также параметра k_i на сохранение бездифракционных свойств рассчитанного пучка.

Для численного моделирования распространения ограниченного поля U(x, y) используется оператор распространения в свободном пространстве:

$$U(u,v,z) = -\frac{ik}{2\pi z} \exp[ikz] \int_{-a-b}^{a-b} U(x,y) \exp\left[\frac{ik}{2z}((x-u)^2 + (y-v)^2)\right] dxdy.$$
(3)

Рассчитаем поле U(x, y) для $A_0(\varphi) = 1$ и различных значений параметра k_t (рисунок 1). Для этого случая интеграл (2) берется аналитически и соответствует функции Бесселя $J_0(k_t r)$.



Рис. 1. Амплитуда и фаза поля U(x, y), k_{t} : 5 – (а), 10 – (б) и 20 – (в)

Очевидно, что параметр k_t , который соответствует радиусу пространственных частот, также определяет масштаб функции Бесселя. Аналогичная ситуация будет и в других случаях, т.е. с увеличением k_t детали в пучке будут масштабно уменьшаться.

Ввиду гипотезы общности $A(\varphi)$, зададим функцию в каждой точке при помощи генератора случайных чисел rand(φ) в диапазоне от 0 до *P*. Будем варьировать параметр *P* для одного и тоже значения R = 15 и рассчитаем U(x, y) (рисунок 2).

Распространим полученное распределение при помощи преобразования Френеля (3) на расстояние 500 мм, покажем продольное и поперечное сечение на расстоянии 200 мм (рисунок 3).



Рис. 2. Амплитуда и фаза поля U(x, y): P=1 (a), P=2 (б), P=3 (в), P=4 (г), P=9 (д)



Рис. 3. Продольное и поперечное распределение амплитуды поля U(x, y): P=1 (a), P=2 (б), P=3 (в), P=4 (г), P=9 (д)

Из графиков амплитуды (рисунок 3) видно, что рассчитанное поле является бездифракционным и это свойство не зависит от параметра Р. Из этого можно сделать вывод, что гипотеза об общности $A(\varphi)$ верна и любая функция одной переменной порождает формулой Уиттекера бездифракционный пучок.

Рассмотрим ряд функций $A(\varphi)$ одной переменной и рассчитаем соответствующие им бездифракционные пучки U(x, y) (таблица 1).

По строкам 1-4 можно сделать вывод, что для тригонометрических функций: соѕ и sin при R = 5 и 10 закономерность сохраняется, а поперечный срез при x=0 и y=0 соответствует $A(\varphi)$. Было выявлено, что суперпозиция тригонометрических функций с различными аргументами и весовыми коэффициентами функциями порождают при помощи интеграла Уиттекера не только осесимметричные и радиально симметричные бездифракционные поля (строки 5-7). При анализе прямой. квадратичной и кубической зависимости от угла φ было показано, что поля U(x, y)имеют схожий вид по своей структуре амплитуды, но отличаются по фазе (строки 8-10).

	$A(\varphi)$	U(x,y)			$A(\phi)$	U(x, y)	
		Ампл. О	Фаза		\ <i>T</i> /	Ампл.	Фаза
1	$A(\varphi) = \sin(\varphi)$	θ	\bullet	10	$A(\varphi) = \varphi^3$	6	\odot
2	$A(\varphi) = \sin(\varphi)$		\odot	11	$A(\varphi) = \exp[\varphi]$	5	0
3	$A(\varphi) = \cos(\varphi)$	Φ	\mathbf{O}	12	$A(\varphi) = \exp[in\varphi]$	\bigcirc	0
4	$A(\varphi) = \cos(\varphi)$		\bigcirc	13	$A(\varphi) = \exp[in\varphi]$		
5	$A(\varphi) = \cos(\varphi) + \sin(\varphi)$	6	0	14	$A(\varphi) = \sum_{n \in \mathbb{N}} \exp[in\varphi]$:0	6
6	$A(\varphi) = 2\sin(\varphi) + \sin(3\varphi)$	0	\odot	15	$A_{a}^{\pm}(\varphi) = \exp[i\alpha(\cos(\varphi) \pm \sin(\varphi))]$	0)))	
7	$A(\varphi) = 4\cos(\varphi) + \sin(3\varphi)$	()	0	16	$A_{a}^{\pm}(\varphi) = \exp[i\alpha(\cos(\varphi) \pm \sin(\varphi))]$		
8	$A(\varphi) = \varphi$	6	\odot	17	(4)		
9	$A(\varphi) = \varphi^2$	6	\odot	18	(5)		33

Таблица 1. Результаты численного моделирования.

Вещественная экспонента $A(\varphi) = \exp[\varphi]$ даёт схожий результат, а именно структура бездифракционного пучка является подобной и имеет ярко выраженную вихревую форму с точки зрения анализа амплитудных значений (строка 11). Комплексная экспонента создает вихревую структуру фазы, ввиду связи между интегралом Уиттекера и результатом преобразование Фурье от кольца с бесконечно малой толщиной. Был получен бездифракционный пучок с кольцеобразным сечением, где не целое число n отвечает за ширину центрального кольца: n=1.1 и 5.1. Из графиков амплитуды видно (строки 12-13), что поле не повторяет строго форму кольца, а имеет некоторые артефакты, «стремящиеся» в центральную область. Данные факт обусловлен дробной степенью экспоненты. В результате интеграл Уиттекера при n – не целое число, формирует функцию Бесселя не целого порядка. Однако суперпозиция к периодической экспонент приводит структуре на радиусе пропорциональном n и отличном от 1. Для суперпозиции двух экспонент $A(\varphi) = \exp[\varphi] + \exp[10\varphi]$ на радиусе с соотношением n=10 формируется периодическая структура, которую можно рассмотреть, как суперпозицию точечных источников (строка 14). Данные результат приводит к гипотезе о том, что суперпозиция одинаковых кольцевых структур с разными радиусами дают в результирующей плоскости аналог интерференционной картины, где разность фаз формирует минимумы максимумы интенсивности. И на полученной Основываясь гипотезе – воспользуемся свойствами преобразования Фурье и зададим $A(\varphi)$, как ядро интеграла Уиттекера с без зависимости некоторыми изменениями И ОТ пространственных переменных х и у.

интегральное преобразование Подадим ВХОД В функцию на $A^{\pm}_{\alpha}(\varphi) = \exp[i\alpha(\cos(\varphi) \pm \sin(\varphi))]$ с варьируемым параметром $\alpha = 10$ и 15 (строки 15-16). В результате в полученном поле U(x, y) наблюдается сдвиг единичного сигнал $A_0(\varphi) = 1$ на расстояние пропорциональное α по оси х и оси у. При $A(\varphi) = A_0 \sum_{\alpha \in A} A_{\alpha}^+(\varphi)$ суперпозиции формировании точечных источников происходит накладывание амплитуд заданных функций, что согласуется с результатами волновой теории при распространении пучка в пространстве и косвенно подтверждает гипотезу. При увеличении числа близко источников расположенных точечных появляются новые локальные максимумы в амплитудном спектре.

Следовательно, предложенный подход может быть актуален для формирования бездифракционных полей со структурой ярко выраженных максимумов удалённых друг от друга. В качестве заданного расспределения было предлжено сформирвать бездифракционный пучок с поперченым сечением в виде вершин треугольника (строка 17). На основе представленных выше свойств были рассчитаны необходимые слогаемые для каждого из точечных источников:

$$A(\varphi) = A_0 exp[-7i \left(\cos(\varphi) - \sin(\varphi)\right)]exp[7i \left(\cos(\varphi) + \sin(\varphi)\right)] + A_0 exp[10i \left(\cos(\varphi) - \sin(\varphi)\right)] + A_0 exp[-10i \left(\cos(\varphi) + \sin(\varphi)\right)]$$
(4)

На основе полученного результата было предложено в каждой вершине треугольника задать такие функции, чтобы погасить излишнюю интенсивность в центральной зоне пучка (строка 18):

$$A(\varphi) = 2(\cos(\varphi)) \times exp[-7i (\cos(\varphi) - \sin(\varphi))]exp[7i(\cos(\varphi) + \sin(\varphi))] + (\cos(\varphi) + \sin(\varphi)) \times exp[10i(\cos(\varphi) - \sin(\varphi))] + (\cos(\varphi) - \sin(\varphi)) \times .$$
(5)

$$\times exp[-10i(\cos(\varphi) + \sin(\varphi))]$$

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате было проведено исследование интеграла Уиттекера, рассмотрены поля порождаемые этим преобразованием и получены некоторые законы зависимости функции $A(\varphi)$ от U(x, y).

При помощи генератора случайных чисел и оператора распространения Френеля была доказана гипотеза о порождении интегралом Уиттекера бездифракционных полей в общем случае. По результатам исследования удалось сформировать бездифракционный пучок со структурой окружности и минимальной интенсивностью в заданной области, который можно использовать в прикладных задачах в качестве оптической ловушки при микроманипуляциях с органическими частицами.

На основе представленного теоретического базиса можно сформировать любого рода бездифракционный пучок, состоящий из вершин с закодированными функциями одного аргумента и заданными координатами.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- J. Durnin Exact solutions for nondiffracting beams. I. The scalar theory // J. Opt. Soc. Am. A, 1987, v. 4, p. 651–654.
- S.N. Khonina Generating a couple of rotating nondiffarcting beams using a binary-phase DOE / S.N. Khonina, V.V. Kotlyar, V.A. Soifer, J. Lautanen, M. Honkanen, J. Turunen // Optik., 1999, v. 110, p. 137-144.
- 3. Yiqi Zhang et al Three-dimensional nonparaxial accelerating beams from the transverse Whittaker integral // EPL, 2014, v. 107, p. 34001

THE FORMATION OF DIFFRACTION-FREE BEAMS WITH A GIVEN DISTRIBUTION BASED ON THE WHITTAKER INTEGRAL

P.A. Khorin

Samara National Research University, (Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086) e-mail: paul.95.de@gmail.com

In the work, the calculation and study of diffractive optical elements (DOE) for the formation of a diffractionless beam with a given distribution based on the Whittaker integral are performed. To simulate a diffraction-free beam, it is proposed to study the Whittaker integral, as well as to form diffraction-free beams with a given distribution based on an infinitely thin ring.

Keywords: diffraction-free beams, Whittaker integral, ring spectrum.

ПОДАВЛЕНИЕ МОДУЛЯЦИОННОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ В ШИРОКОАПЕРТУРНЫХ ЛАЗЕРАХ С ПОМОЩЬЮ ИНЖЕКЦИИ ВНЕШНЕГО ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

<u>Е.А. Ярунова^{1,2}, А.А. Кренц^{1,2}, Н.Е. Молевич^{1,2}</u>

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 работе исследована пространственно-временная линамика полупроводниковых широкапертурных лазеров с инжекцией внешнего оптического излучения и учетом фактора уширения спектральной линии лазера (альфа фактора). Показано, что ненулевой альфа фактор приводит к модуляционной поперечной неустойчивости, которая, как известно, приводит к филаментации лазерного излучения. Показано, что инжекция внешнего излучения подавляет модуляционную неустойчивость оптического И позволяет добиться устойчивой пространственно-однородной приосевой генерации.

Ключевые слова: широкоапертурные лазеры, модуляционная неустойчивость, оптическая инжекция.

1. ВВЕДЕНИЕ

Полупроводниковые лазеры вертикальным резонатором являются с ключевыми источниками когерентного света, основное их преимущество высокой эффективности заключается в компактных размерах, В преобразования света и низком пороге генерации. Но VCSEL обычно подвержены динамическим пространственно-временным нестабильностям, которые представляют собой хаотические колебания и приводят к плохому пространственному качеству луча даже при отсутствии любого внешнего очередь возмущения. Это В первую связано с модуляционной неустойчивостью, возникающей из-за сильных нелинейных эффектов внутри резонатора [1,2]. В результате выходная мощность этих лазеров сильно ограничена, что уменьшает возможности их применения.

Современные подходы к стабилизации пространственной структуры выходного луча связаны как с периодической модуляцией накачки [3], так и с

воздействием: оптическая обратная внешним связь В различных конфигурациях – пространственно-структурированная обратная связь [4,5], обратная связь от внешних резонаторов [6,7] и оптическая инжекция [8]. Недавно была предложена идея подавления модуляционной неустойчивости в пространственно-распределенных нелинейных динамических системах путем введения одновременной периодической модуляции в пространстве и времени [9]. Так же, метод оптической инжекции успешно зарекомендовал себя как метод подавления поперечных неустойчивостей в широкоапертурных лазерах класса В с однородно уширенной линией [10,11]. Во всех этих методах использование внешних элементов снижает надежность устройства, в то время как оно становится менее компактным, но оптическая инжекция в отличие от других методов позволяет получать однородный профиль интенсивности. В данной работе впервые исследовано стабилизирущее влияние инжекции на широкоапертурный лазер с учетом фактора уширения спектральной линии лазера (альфа фактора), который характерен именно для полупроводниковых сред.

Цель работы: провести численное моделирование системы, анализ ее устойчивости. Показать, что внешняя оптическая инжекция эффективно подавляет модуляционную неустойчивость и стабилизирует лазерное излучение.

2. МОДЕЛИРОВАНИЕ

2.1. Математическая модель

Для описания динамики лазера с вертикальным резонатором (VECSEL) воспользуемся системой уравнений [9]:

$$\begin{cases} \frac{\partial E}{\partial t} = -[1 + i\theta + 2C(i\alpha - 1)(N - 1)]E + i\Delta_{\perp}E + E_{inj}, \\ \frac{\partial N}{\partial t} = -\gamma \Big[N - I_p + |E|^2(N - 1) \Big] + \gamma d\Delta_{\perp}N, \end{cases}$$
(1)

где Е, N- безразмерные огибающие электрического поля и инверсии населённости соответственно. θ – отстройка частоты резонатора, α – Фактор Генри, $\gamma = \frac{\tau_p}{\tau_N}$,где τ_N - скорость релаксации инверсии населенности. Время нормировано на время жизни фотона $\tau_p = 2L_c / \upsilon T_c$, где T_c - коэффициент пропускания, υ -скорость света, L_c - длина полости резонатора. Координаты (x, y) нормированы на $\sqrt{\lambda_0 L_c / 2\pi T_c}$, где λ_0 -центральная линия усиления. Параметр С определяет взаимодействие между носителями и полем. Δ_{\perp} - двумерный поперечный Лапласиан, описывает дифракцию и диффузию носителей в поперечном направлении. Ток накачки I_p генерирует носители внутри активной области, а d- коэффициент диффузии.

Оптическая инжекция, которая характеризуется амплитудой E_{inj} , подается в систему вдоль поперечной моды с волновым числом q = 0, что приводит к тому, что фундаментальная поперечная мода выигрывает конкуренцию у поперечных мод высшего порядка, что и является основным механизмом подавления поперечных неустойчивостей с помощью инжекции.

2.2. Результаты численного моделирования

Проведем численное исследование динамики системы (1) и анализ ее устойчивости. Исследуем вопрос о возможности стабилизации излучения с помощью инжекции.

Чтобы исследовать устойчивость немодулированного VECSEL, выполнялся стандартный линейный анализ устойчивости. Было найдено пространственно-однородное стационарное решение (N_0, E_0) системы (1):

 $N_0 = 1 + /2C$ и $E_0 = \sqrt{\frac{I_p - N_0}{N_0 - 1}}$, при этом с помощью выбора опорной частоты

можно получить $\theta = -\alpha$. В свободно работающем широкоапертурном лазере отсутствие инжекции $(E_{ini} = 0)$ режим пространственно-однородной В приосевой генерации оказывается неустойчив по отношению к малым При пространственно-временным возмущениям. добавлении малого возмущения в стационарное состояние системы, подставляя полученные выражения в систему (1), можно вычислить собственные значения полученных эволюционных уравнений. Показатели Ляпунова Л, являющиеся действительными частями корней характеристического уравнения, изображены на рисунке 1. Такой вид кривых соответствует модуляционной неустойчивости [9].

Численное моделирование системы уравнений проводилось с помощью алгоритма переменных направлений методом прогонки при параметрах $\theta = -1.5, a = 1.5, C = 0.6, I_p = 1.9, d = 0.052, \gamma = 1$, которые соответствуют VECSEL в режиме при $\tau_N = \tau_p$ [9]. На рисунке 2 представлена полученная численно пространственно-временная зависимость интенсивности.







При введении в систему оптической инжекции выше порогового значения $(E_{inj} \approx 0.1)$ наблюдается стабилизация лазерного излучения (рис.3).



Рис.. 3. а) Зависимость интенсивности от времени. б) Лазерная динамика в поперечном профиле пучка при $E_{ini} = 0.1$

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полупроводниковые лазеры довольно нестабильны по сравнению с другими лазерами, и их стабилизация является важной проблемой. Такие устройства имеют большое значение в оптической связи, оптических системах хранения данных и оптических измерениях. Полупроводниковые VECSEL демонстрируют модуляционную неустойчивость, развитие которой приводит к филаментации излучения и значительному ухудшению качества пучка. Предложенный метод оптической инжекции позволяет успешно стабилизировать лазерное излучение И обеспечить генерацию на фундаментальной поперечной моде с поперечным волновым числом q=0 (пространственно-однородная генерация). Он реализует контроль излучения извне, что является преимуществом перед методами, для реализации которых необходимо усложнять структуру схемы.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (государственное задание по теме 0023-2019-0003, FSSS-2020-0014)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- J. Ohtsubo, Semiconductor Lasers: Stability, Instability and Chaos. // Springer, Berlin, 2013, 666 p.
- 2. G. H. M. Van Tartwijk, G. P. Agrawal, Laser instabilities: a modern perspective. //Prog. Quantum Electron, 1998, v. 22, p. 43-122.
- S. Kumar, R. Herrero, M. Botey, and K. Staliunas, Taming of Modulation Instability by Spatio-Temporal Modulation of the Potential. // Sci. Rep, 2015, v. 5.
- S. K. Mandre, I. Fischer, W. Elsaßer, Control of the spatiotemporal emission of a broad-area semiconductor laser by spatially filtered feedback. //Opt. Lett, 1998, v. 28, p. 1135-1137
- 5. C. Simmendinger, D. Preisser, O. Hess, Stabilization of chaotic spatiotemporal filamentation in large broad area lasers by spatially structured optical feedback. //Opt. Express, 1999, v. 5, p. 48-54.
- J. Martin-Regalado, G. H. M. van Tartwijk, S. Balle, M. San Miguel, Mode control and pattern stabilization in broad-area lasers by optical feedback. //Phys. Rev. A, 1996, v. 54, p. 5386-5393.

- M. Munkel, F. Kaiser, O. Hess, Stabilization of spatiotemporally chaotic semiconductor laser arrays by means of delayed optical feedback. //Phys. Rev. E, 1997, v. 56, p. 3868-3875.
- S. Takimoto, T. Tachikawa, R. Shogenji, J. Ohtsubo, Control of Spatio-Temporal Dynamics of Broad-Area Semiconductor Lasers by Strong Optical Injection. //IEEE Photon, 2009, v. 21, p. 1051-1053.
- Ahmed, W. W., Kumar, S., Herrero, R., Botey, M., Radziunas, M., &Staliunas, K,Stabilization of flat-mirror vertical-external-cavity surface-emitting lasers by spatiotemporal modulation of the pump profile. // Physical Review A, 2015, v. 92, p. 043829-1 -043829-8.
- 10.E.A. Yarunova, A.A. Krents, N.E. Molevich, D.A. Anchikov, Stabilization of Broad-Area Laser Emission by Optical Injection. //Bulletin of the Lebedev Physics Institute, 2019, v. 46, p. 130-132.
- 11.D.A. Anchikov, A.A. Krents, N.E. Molevich, A.V. Pakhomov, Suppression of spatio-temporal instabilities in broad-area class-B lasers. // Computer Optics, 2016, v. 40, p. 31-35.

SUPPRESSION OF MODULATION INSTABILITY IN BROAD-AREA LASERS BY INJECTION OF EXTERNAL OPTICAL RADIATION

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

The spatial-temporal dynamics of semiconductor broad-area lasers with the injection of external optical radiation and taking into account the alpha factor is studied. It is shown that a non-zero alpha factor leads to a modulation transverse instability, which is known to lead to filamentation of laser radiation. It is shown that the injection of external optical radiation suppresses the modulation instability and makes it possible to achieve stable spatially homogeneous near-axis generation.

Keywords: broad-area lasers, modulation transverse instability, optical injection.

СТУДЕНЧЕСКАЯ СЕКЦИЯ

ЭФФЕКТ ВОЗДЕЙСТВИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ВСХОЖЕСТЬ СЕМЯН ПАСЛЕНОВЫХ

О.А. Васильева, Н.В. Васильев, О.М. Алыкова, В.В. Смирнов

Астраханский государственный университет (4140561, г. Астрахань, ул. Татищева, 20 «А»)

Положительное влияние когерентного оптического излучения на всхожесть семян и рост растений известный факт. Такие исследования проводились и проводятся сравнительно-аналитическим методом. В данной работе результаты воздействия изучались методом ИК спектроскопии, проведен анализ структурных изменений, которые произошли в семенах томата «Розовый гигант».

Ключевые слова: культурные растения, когерентное оптическое излучение, ИК спектроскопии.

1. ВВЕДЕНИЕ

В современных научных центрах большое внимание уделяется современным технологиям выращивания культур, разработан ряд способов воздействия на семена культурных растений физическими методами, такими как сильные магнитные или электрические поля, ионизирующее излучение или плазма, разные дозы гамма лучей и т.д. Особое место среди методов воздействия занимает излучение видимой области спектра – лазерное излучение, оказывающее стимулирующее влияние на рост и развитие растений и, в конечном счете, на урожайность самих культур. При этом следует подчеркнуть, что такая обработка совершенно безопасна, она полностью исключает генетическую мутацию и не приводит к отложенным опасным последствиям для человеческого организма [1-4].

По одной из гипотез эффективность использования лазерного излучения для стимуляции роста растительных тканей обусловлена тем, что лазерный луч активирует процессы фотосинтеза, обусловлен высокой восприимчивостью фитохрома семян и хлорофилла вегетирующих растений к лазерному свету красной области спектра. Под воздействием лазерных лучей живые ткани становятся источником вторичного излучения, которое стимулирует клеточное деление, ускоряет обменные и окислительные процессы и активирует соседние ткани, не испытавшие прямого воздействия лазерного луча. Предпосевная лазерная обработка обеспечивает повышение

урожайности зерновых культур за счет повышения всхожести и энергии прорастания семян, подавления ряда экономически значимых болезней на уровне, сопоставимом с обработкой фунгицидами, и даже более высоком [1-4]. В настоящее время делаются попытки воздействовать на семена культурных растений лазерным излучением. Полученные результаты такого воздействия анализируются сравнительно-аналитическим методом. В данной работе впервые исследуется результат воздействия на семена томата сорта «Розовый инфракрасной гигант» оптическим методом _ методом спектроскопии (ИК спектроскопии).

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Из широко разнообразия сельскохозяйственных культур было выбрано семейство пасленовых, так как это наиболее распространённые растения нашей области. Из того семейства мы выбрали томаты, потому они наиболее устойчивы к погодным изменениям в отличие от перца и др.

Семена томата «Розовый гигант» были получены из плодов, которые были выращены в нашей области. Предварительно семена были вымыты, высушены и подготовлены к обработке.

Установка для обработки семян была собрана на базе АГУ студентами второго курса. Общий вид установки приведен на рисунке 1. Прибор представляет собой деревянный корпус на пластиковых ножках с металлическим штативом. Источником питания – свинцово-кислотный аккумулятор на 3В. На штативе крепится жестяной цилиндр с системой линз и лазерными модулями в количестве 3 шт (красный, зелёный и синий). Максимальная мощность лазеров: синий – 50 мВт, зеленый – 10 мВт, красный – 20 мВт. Диаметр лазерного пятна на образце составлял 1,5 см. Длины волн каждого различны: красный - 650 нм, зеленый – 532 нм, синий – 450 нм [5,6].

Исследуемые образцы помещаются в чашу Петри под объектив лазерного модуля (D = 3,5см). Установка приводится в действие крайним тумблером. Лазеры приводятся в действия 3 тумблерами, соответственно подключенные к каждому лазеру. Мощность лазеров регулируется потенциометром (R _{max}= 5 кОм). Для изменения регулировки мощности лазера необходимо повернуть ручку регулировки вправо, чтобы поставить половину или полную мощность установки.



Рис. 1. Установка для обработки семян: 1) лазерный модуль; 2) объектив; 3) чашка Петри с семенами томата; 4) подъемный столик

Семена разделялись на три группы – контрольная и две группы для облучения (5 и 10 мин). Семена томата испытуемой группы, помещались в рабочую зону на подъемном столике установки и подвергались облучению. Обзор литературы по теме исследования позволил выбрать время облучения семян – оно составило 5, 10 минут.

Первая серия экспериментов осуществилась в декабре-январе 2018 года. Все облученные семена вместе с контрольной группой были высажены в питательный грунт для прорастания. Но первые эксперименты не дали результатов, т.к. начало эксперимента пришлось на зимний период и не удалось создать для выращивания необходимые условия (освещенность, температурный режим). Вторая попытка серия экспериментов была проведена в марте-апреле 2019 года. Семена, посаженные весной, проросли через 7 дней, а через 14 дней уже были первые ростки. Но подсчет количества ростков показал, что после облучения в течение 10 минут было намного меньше чем 5 минут. Эксперимент, повторенный через 14 дней при высадке одинакового количества семян, показал такой же результат. Контрольная группа семян, не обработанные лазерным излучением дала всходы. Подсчет показал, что взошли все семена.

Итак, наши наблюдения показали, облученные лазером длиной волны 650 нм в течение 5 минут семена прорастают быстрее, т.е. такая обработка семян влияет на их всхожесть. Обработка семян в течение 10 минут лазером с длиной волны 650 нм «угнетает» семена и имеет в некотором смысле губительное действие на некоторые из них. Семена, которые не получили облучения (контрольная группа), оказались намного устойчивее и дали полные всходы, а также по мере растения таких семян были более крепче чем другие.

4. ОБСУЖДЕНИЯ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Анализ ИК-спектров (рис. 2.) необлученных семян томата и этих же семян пророщенных в течение 7 дней с помощью спектрального анализа показали, что пик, приходящийся на 3285 см⁻¹, сместился на 9 см⁻¹ назад (при этом интенсивность данного пика возросла).



Рис. 2. Результаты исследований семян томата необлученных и необлученных, и пророщенных в течение пяти дней. Снятые спектры с увеличенным пиком на 3285 см⁻¹.

Пик, приходящийся на 3010 см⁻¹, исчез (рис. 3.).



Рис. 3. Снятые спектры с увеличенным пиком на 3010 см⁻¹.

Пик, приходящийся на 1640 см⁻¹ снятый с семян, пророщенных в течение 5 дней не смещается (интенсивность пика резко уменьшилась). Пик, приходящийся на 1535 см⁻¹ не смещается (интенсивность пика резко уменьшилась). Пик, приходящийся на 1455 см⁻¹ снятый с семян, сместился на 10 см⁻¹ назад (при этом интенсивность данного пика уменьшилась) (рис. 4).



Рис. 4. Снятые спектры с увеличенными пиками на 1745, 1640, 1535, 1455

 CM^{-1} .

Можно сказать, что семена, которые проращивались в течение пяти дней, не сильно изменились в своей структуре. По всей видимости, семена направляют свою энергию на процессы роста, что и отражается на их ИК – спектрах.



Рис. 5. Результаты исследований семян томата необлученных и облученных лазером мощностью 20 мВт на длине волны 650 нм в течение пяти минут, а также семян, облученных в течение пяти минут и пророщенных в течение пяти дней.

При спектральном анализе семян томата необлученных и облученных лазером мощностью 20 мВт на длине волны 650 нм в течение пяти минут и пророщенных в течение пяти были проанализированы результаты по аналогичным полученным пикам (рис. 4).

Хорошо известно, что красный свет – лазер мощностью 20 мВт и длиной волны 650 нм – растениями хорошо поглощается. Однако, по проведенному анализу можно сделать вывод о том, что красный свет поглощается и при

облучении в течение пяти минут имеет положительный эффект. Но при длительном облучении в семенах изменяется их структура (что можно проследить на спектральной диаграмме), что может губительно сказать на дальнейшем развитии. Итак, при облучении семян красным светом лазера в них меняется структура от первоначальной, но при проращивании семян их структура пытается вернутся к первоначальной. У семян, облученных в течение пяти минут этот процесс протекает в положительную сторону и намного быстрее, чем у других. Но у семян, облученных в течение 10 минут, такой процесс протекает сложнее, в виду этого они плохо растут или погибают пока не проросли.

При дальнейшем спектральном анализе семян томата выяснилось, что семена томата, которые не подвергались воздействию, немного изменили свою структуру. Большая часть пиков ушла, остались только основные, которые наблюдались и до этого.

Как показал спектральный анализ семян томата облученных лазером красного цвета с длиной волны 650 нм в течение 5 и 10 минут, которые прорастали в течение двух недель, как показано на рисунке 3.8, их состав и структура практически не изменились. Все пики практически совпадают с пиками необлученных семян, которые были пророщены в течение такого же времени. Интенсивность пиков, показала большее содержание в них накопленных веществ. Отсюда можно сделать вывод о том, что в них большее содержание веществ для развития ростков, но этого запаса не хватает для дальнейшего роста и развития. Поэтому можно сделать вывод, что облучение лазером красного цвета с длиной волны 650 нм в течение 5 или 10 минут не влияет на дальнейших рост растений. Влияние такого излучения происходит на уровне семян, когда в них уничтожается вредоносные микробы, споры и т.д. при этом изменяется структура самого семени, способствующая дальнейшему ее прорастанию. Скорее всего дальнейший рост растений зависит от почвы (ее насыщенности, кислотности и т.д.), внешних факторов (например, освещённости, проветриваемости помещения и т.д.).

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По полученным результатам можно сделать вывод о том, что когерентное оптическое излучение в большинстве случаев влияет на семена и ростки томата. Но такое излучение, практически не влияет на рост растений. Т.е. возможна вторичная обработка ростков и дальнейшее исследование воздействия лазерного облучения. В большинстве случаев наблюдается

увеличение биоэнергетических параметров – энергии прорастания семян и повышение всхожести. Но на дальнейшее развитие растений лазерное облучение семян практически воздействия не оказывает.

В результате проведенного исследования были установлены некоторые параметры одного из наиболее эффективных, технологически достаточно безопасных, с экологической точки зрения, методов обработки семян, которые позволяют биоэнергетические показатели, в том числе увеличить количество и качество выращиваемых овощей. Полученные результаты могут быть использованы в фермерском, приусадебном хозяйствах Астраханской области, и, возможно Южного Федерального округа.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. М.В. Беляков Оптико-электронная технология и средства управления биологической активностью семян: автореф. дис. на соиск. степ. к.т.н.: Спец. 05.20.02., 2008. 18 с. Режим доступа: http://www.msau.ru
- 2. В.Е. Илларионов Основы лазерной терапии. //М. РЕСПЕКТ, 1992. 122 с.
- 3. Н.Д. Девятков, М.Б. Голант, О.В. Бецкий Миллиметровые волны и их роль в процессах жизнедеятельности. //М.: Радио и связь. 1991. 168 с.
- А.Н. Малов, С.Н. Малов, В.В. Черный Лазерная биостимуляция как самоорганизующийся неравновесный процесс / Тезисы IV Межд. Конгресса "Проблемы лазерной медицины" - Москва-Видное, 1997, с.278-279.
- 5. А.Ж. Амиржанова, А.А. Уталиева, О.М. Алыкова, А.В. Поплевин, П.Г. Селин Анализ результатов воздействия лазерного излучения на жизнедеятельность элементов агрофитоценоза // Современные проблемы физики и технологий. V-я Международная молодежная научная школаконференция. М: Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», 2016, С. 199-202.
- 6. О.М. Алыкова, А. С. Коваль, О.А. Васильева Изучение влияния когерентного оптического излучения на всхожесть и рост культурных растений методом ИК спектроскопии // Физическое образование в вузах.— 2019.— май.— Т. 25, № 1С.— С. 228-230.

THE EFFECT OF LASER RADIATION ON THE GERMINATION OF NIGHTSHADE SEEDS

O.A. Vasil'eva, N.V. Vasil'ev, O.M. Alykova, V.V. Smirnov

Astrakhan State University, (414056, Astrakhan, Tatishcheva 20a)

The positive effect of coherent optical radiation on seed germination and plant growth is known. Such studies have been conducted and are conducted by comparative analytical method. In this paper, the results of exposure were studied by IR spectroscopy, the analysis of structural changes that occurred in the seeds of the "Pink giant" tomato was carried out.

Keywords: cultivated plants, coherent optical radiation, IR spectroscopy.

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУР В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ МАТЕРИАЛА ФАЗОВОЙ ПАМЯТИ GE₂SB₂TE₅.

<u>В.В. Веретенников</u>¹, М.П. Смаев², Ю.В. Воробьев³.

¹Национальный исследовательский университет «МИЭТ» (124498, г. Москва, г. Зеленоград, площадь Шокина, дом 1) ²Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева (125047, г. Москва, Миусская площадь, д. 9) ³Рязанский государственный радиотехнический университет (390005, г. Рязань, ул. Гагарина, 59/1) e-mail: revosierra@gmail.com

В работы рамках данной продемонстрирована возможность формирования периодических структур («риплов»), состоящих ИЗ чередующихся полос с различным фазовым состоянием, на поверхности тонких пленок Ge₂Sb₂Te₅ под воздействием лазерных импульсов фсдлительности. Определено отсутствие влияния на период формируемых «риплов» количества импульсов, плотности энергии лазерного излучения, частоты следования импульсов. Выявлено, что вариация материала подслоя тонкой пленки Ge₂Sb₂Te₅ приводит к изменению необходимого для формирования «риплов» числа импульсов.

Ключевые слова: тонкие пленки, GST225, фс-лазерное излучение, поверхность, риплы.

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время одним из наиболее перспективных и активно развивающихся направлений в нанофотонике становится формирование массивов плотноупакованных субволновых элементов - метаповерхностей. Использование метаповерхностей позволяет управлять такими параметрами отраженного и пропускаемого электромагнитного излучения как фаза, амплитуда, поляризация и частота излучения. При этом характер изменения параметров электромагнитного излучения при взаимодействии с метаповерхностью будет определяться ее геометрическими параметрами и функциональными материалами структуры.

Одним из перспективных вариантов функционального материала для метаповерхностей выступают халькогенидные полупроводники, характерным представителем которых является Ge₂Sb₂Te₅ (GST225). Важной особенностью

данного материала является его способность к быстрым и обратимым переходам между кристаллическим и аморфным состоянием в результате воздействий. низкоэнергетических внешних При ЭТОМ аморфная И кристаллическая фазы В халькогенидных полупроводниках обладают химическими И физическими свойствами, том отличными В числе оптическими свойствами, что обуславливается различным пространственным расположением атомов и электронным строением. В результате применение данных материалов в качестве функционального слоя метаповерхностей позволяет обеспечить возможность высокоскоростного и многоуровневого управления параметрами электромагнитного излучения.

С распространением среди исследователей лазеров с пс- и dcдлительностью импульсов появился целый ряд работ, где демонстрируется возможность инициации фазовых переходов в GST225 с использованием ультракоротких лазерных импульсов. При воздействии на тонкие пленки GST225 набором фс-лазерных импульсов могут проявляться следующие эффекты: лазерная кристаллизация и реаморфизация, полная или частичная абляция материала, а также образование периодических поверхностных структур [1], называемых в рамках данной работы «риплами». Одним из возможных механизмов, объясняющих возникновение «риплов», является теория об образовании стоячей электромагнитной волны вследствие интерференции падающего излучения, а также индуцированной поверхностной электромагнитной волны. Рядом автором описывается возникновение поверхностной электромагнитной волны на начальном этапе образования периодических структур, что объясняется рассеянием света на поверхности образца. В результате поглощения падающего излучения и его интерференции, возникают минимумы и максимумы энергии, что приводит к неравномерному разогреву материала и к инициации фазовых переходов. Это, в свою очередь, обуславливает появление набора из периодических кристаллических полос на поверхности аморфной пленки [2].

В работе [1] было установлено, что период формируемых периодических поверхностных структур в пределах погрешности совпадает с длиной волны излучения лазера.

При этом, авторами работы [3] сообщается о значительном различии скоростей травления аморфной и кристаллической фазы GST225, что обеспечивает высокую селективность при проведении данной технологической операции. Данные особенности открывают перспективу формирования метаструктур на основе GST225 без использования

традиционно применяемой для этих целей технологии электронной литографии, обладающей ограничениями использования в производительном цикле, а также высокой себестоимостью.

В этом случае строение «риплов» будет является главным фактором, определяющим свойства метаповерхностей, однако на данный момент влияние параметров излучения (частоты следования импульсов и их количества, плотности энергии), а также материалов функционального слоя и подложки на формируемые периодические структуры остается малоизученным.

Таким работы образом целью данной являлось выявление технологических. a также экспериментальных параметров излучения, оказывающих влияние на особенности формирования периодических структур на поверхности $Ge_2Sb_2Te_5$.

2. ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

2.1. Методика проведения эксперимента

Аморфные пленки Ge₂Sb₂Te₅ (130 нм) были получены при помощи магнетронного распыления мишени. Осаждение GST225 проводилось на мультислойные структуры W\TiN\SiO₂\Si и SiO₂\Si.

Для облучения применялся Yb:KGW лазер с длиной волны 1030 нм. Нормально падающий лазерный луч фокусировался при помощи оптической системы с фокусным расстоянием 75 мм. Во время лазерного облучения, смещение пленок осуществляется в плоскости, перпендикулярной лазерному лучу. Для каждого образца были получены матрицы пятен, в которых варьировалось количество импульсов, приходящих в одну точку, в диапазоне от 2⁰ до 2²⁰ и плотность потока энергии в пределах 1.3 – 51.6 мДж/см². Кроме того, частота следования импульсов изменялась в диапазоне от 1 кГц до 1 МГц. Для каждого значения частоты следования записывалась отдельная экспериментальная матрица.

2.2. Анализ экспериментальных данных

Оптическое изображение полученной экспериментальной матрицы представлено на рисунке 1. При облучении пленки малым количеством импульсов с невысокой плотностью энергии (правый нижний угол матрицы) изменения отражательной способности не наблюдается. По мере увеличения количества импульсов излучения и их мощности (в направлении левого верхнего угла матрицы) наблюдается повышение отражательной способности,

что проявляется в появлении более ярких пятен на оптическом изображении и может быть объяснено кристаллизацией аморфной тонкой пленки. Дальнейшее увеличение изменяемых параметров приводит к появлению спотов с очень низкой отражательной способностью, что связано с протеканием процессов абляции.



Рис. 1. Общий вид полученной экспериментальной матрицы. В нижнем левом углу указано направление вектора поляризации лазерного излучения

Пунктирной линией на рисунке 1. выделена область появления периодических структур – «риплов». Изображения, представленные на рисунке 2, для точки соответствующей плотности энергии 3.6 мДж/см² и числу импульсов 5 ·10³ (рисунок 1) были получены с использованием различных методов микроскопии. Установлено, что полосы в «риплах» отличаются оптическим контрастом, морфологией поверхности и электрической проводимостью. Данный результат подтверждает тот факт, что они находятся в различных фазовых состояниях – кристаллическом и аморфном.



Рис. 2. Изображение «риплов», полученное при помощи различных методов микроскопии: а) изображение РЭМ; б) изображения, полученные с

a)

б)

использованием оптической микроскопии (OM), атомно-силового микроскопа в режиме измерения топографии (AFM) и тока (C-AFM)

Для исследуемых экспериментальных образов были получены оптические изображения всех спотов с «риплами» и определены профили относительной отражательной способности $\Delta R/R$, где ΔR – изменение коэффициента отражательной способности после воздействия, а R - коэффициент отражательной способности исходной аморфной пленки. Выбор линий для оценки профиля отражательной способности представлен на рисунке 3, а.



Рис. 3. Определение периода «риплов»: а) оптическое изображение спота с указанием линий, выбранных для получения профилей отражательной способности; б) профили, использованные для получения величины периодичности

На основании анализа профилей был определен период «риплов». Значения периода «риплов» определялось для выборки из точек, полученных для различного количества, энергии и частоты следования импульсов. По результатам анализа полученных данных было выявлено отсутствие влияния данных параметров на период формируемых периодических структур.

На рисунке 4 представлены матрицы, полученные для тонких пленок GST225 на различных мультислойных структурах, с указанием областей появления «риплов».



Рис. 4. Оптические изображения матриц, полученных для тонких пленок GST225 на подложках W\TiN\SiO₂\Si и SiO₂\Si. Штрих - пунктирной линией выделены области появления «риплов»

Установлено, что при наличии металлического подслоя формирование «риплов» начинает происходить при большем значении числа импульсов. Данная особенность может быть объяснена более эффективным теплоотводом от облучаемых областей халькогенидных пленок в случае использования металлического подслоя, обладающего более высокой теплопроводностью по сравнению с диэлектрическим слоем SiO₂.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты работы показали, что воздействие фс-лазерного излучения позволяет формировать «риплы», состоящие из чередующихся полос с различным фазовым состоянием. При этом изменение основных параметров эксперимента (количества импульсов, плотности энергии лазерного излучения, частоты следования импульсов и материала подложки) не оказывают влияния на период «риплов». Величина периода формируемых «риплов» приблизительно равняется 1,03 мкм, что близко к длине волны используемого в эксперименте лазерного излучения. Изменение материала подслоя тонкой пленки GST225 приводит к увеличению необходимого для формирования «риплов» числа импульсов, что может быть обусловлено

различной теплопроводностью нижележащих слоев и должно быть учтено в дальнейшем при отработке технологии безлитографического формирования метаповерхностных структур на основе GST225.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФИИ (проект № 20-07-01-01092) и гранте Президента РФ (внутренний номер МК-727.2020.3).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. S. Kozyukhin, P. Lazarenko, Y. Vorubyov, A. Baranchikov, M. Smayev, A. Sherchenkov, Y. Sybina, A. Polohin, V. Sigaev, Laser-induced modification and formation of periodic surface structures (ripples) of amorphous GST225 phase change materials. // Opt. Laser. Technol., 2019, v. 113, p. 168-175.
- R. Buividas, M. Mikutis, S. Juodkazis, Surface and bulk structuring of materials by ripples with long and short laser pulses: Recent advances. // Prog. Quantum. Electron., 2014, v. 38, p. 119-156.
- C. Deng, Y. Geng, Y. Wu, Selective wet etching of Ge₂Sb₂Te₅ phase-change thin films in thermal lithography with tetramethylammonium. // Appl. Phys. A-Mater., 2011, v. 104, p. 1091-1097.

SPECIFIC FORMATION FEATURES OF PERIODIC SURFACE STRUCTURES ON AMORPHOUS GE₂SB₂TE₅ THIN FILMS

V.V. Veretennikov¹, M.P. Smayev², Y.V. Vorobyov³.

 ¹National Research University of Electronic Technology (Shokin Square., 1, Zelenograd, Moscow, Russia, 124498)
 ²Mendeleev University of Chemical Technology of Russia (Miusskaya Sq., 9, Moscow, Russia 125047)
 ³Ryazan State Radio Engineering University (Gagarin St., 59/1, Ryazan, Russia, 390005) e-mail: revosierra@gmail.com

In this paper, the formation of periodic surface structures ("ripples") on amorphous Ge₂Sb₂Te₅ thin films upon the irradiation with femtosecond laser pulses is shown. A distinctive feature of the formed "ripples" is the alternation of regions with different phase states. The period of formed "ripples" is close to the used laser wavelength. We have determined that neither of the considered irradiation parameters (number of pulses, energy density, frequency) affects the period of "ripples". As our results indicate, the substitution of sublayer material leads to a significant change of laser-pulses number required for periodic structure formation on the GST225 surface.

МУЛЬТИМОДАЛЬНАЯ ВИЗУАЛИЗАЦИЯ В ЗАДАЧАХ ЛАПАРОСКОПИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

<u>Н.В. Голубова</u>¹, Д.Д. Ставцев¹, В.В. Шуплецов¹, Е.В. Потапова¹, В.В. Дремин^{1,2}

¹Орловский государственный университет им. И.С. Тургенева (302026, г. Орел, ул. Комсомольская, 95) ²College of Engineering and Physical Sciences, Aston University (B4 7ET, Aston Triangle, Birmingham, United Kingdom) e-mail: potapova_ev_ogu@mail.ru

Ключевые слова: лапароскопия, лазерная спекл-контрастная визуализация, флуоресцентная визуализация, гиперспектральная визуализация.

Ряд острых хирургических заболеваний органов брюшной полости сопровождается резким ухудшением или полным прекращением локального микрокровотока. Актуальными остаются проблемы своевременной диагностики и выбора тактики при острых ишемических поражениях кишечника и несостоятельности анастомозов [1].

Для оценки жизнеспособности тканей кишечника возможно проведение лапароскопического исследования, зачастую позволяющего минимизировать операционную травму, избежать повторных оперативных вмешательств и сократить сроки пребывания в стационаре. Однако оценка состояния кишечной стенки при стандартной лапароскопии достаточно субъективна и визуальной Инструментальные основана на оценке. критерии жизнеспособности тканей быть ишемизированных кишечника могут получены при использовании оптических методов диагностики.

В этом исследовании мы демонстрируем доказательство концепции мультимодального лапароскопа с использованием метода мультиплексирования с разделением длин волн.

Предлагаемый подход реализован на основе методов лазерной спеклконтрастной (ЛСКВ), флуоресцентной (ФВ) и гиперспектральной (ГВ) визуализации. Система регистрации изображений совмещена с коммерчески доступным пятимиллиметровым ригидным лапароскопом, что упрощает ее внедрение в клиническую практику.

В канале ЛСКВ использовался лазерный источник излучения LASER-785-LAB-ADJ (Ocean Optics Inc., США) с длиной волны 785 нм. Спекл-картина регистрировалась монохромной КМОП-камерой UI-3360CP-NIR-GL Rev 2 (IDS GmbH, Германия) [2]. Изображение проецировалось на матрицу камеры через ахроматическую линзу AC254-050-B-ML (Thorlabs, Inc., США). Для каналов ФВ и ГВ использовались лазерный источник M450LP1 (Thorlabs, США) 450 нм и эндоскопический осветитель OSV-01 (ELEPS, Россия), соответственно. Для выделения флуоресценции на длине волны 500 нм и создания гиперспектрального массива изображений использовался перестраиваемый фильтр KuriosVB1 (Thorlabs, США) с диапазоном длин волн 430-720 нм и минимальной шириной полосы пропускания 10 нм.

Характеристики прототипа лапароскопа оценивались для каждой модальности визуализации. Исследования, проведенные на фантомах, показали чувствительность предложенной системы к изменению скорости движения жидкости в капиллярах, к содержанию в фантомах флуорофоров и хромофоров. Таким образом, мультимодальная лапароскопия имеет высокий потенциал в диагностике ишемических нарушений кишечника.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда в рамках проекта №18-15-00201.

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.
- Потапова Е.В., Серёгина Е.С., Дрёмин В.В., Ставцев Д.Д., Козлов И.О., Жеребцов Е.А., Мамошин А.В., Иванов Ю.В., Дунаев А.В. Лазерная спеклконтрастная визуализация микроциркуляции крови в тканях поджелудочной железы при лапароскопических вмешательствах // Квантовая электроника. – 2020. – Т.50, №1. – С. 33–40.

MULTIMODAL IMAGING FOR LAPAROSCOPY

<u>N.V. Golubova¹</u>, D.D. Stavtsev¹, V.V. Shupletsov¹, E.V. Potapova¹, V.V. Dremin^{1,2}

¹Orel State University named after I.S. Turgenev (Komsomolskaya st., 95, Orel, Russia, 302026) ²College of Engineering and Physical Sciences, Aston University (B4 7ET, Aston Triangle, Birmingham, United Kingdom) e-mail: potapova_ev_ogu@mail.ru

The paper shows the substantiation of multimodal imaging concept for laparoscopy based on integration of laser speckle contrast, fluorescence and hyperspectral imaging modalities into commercially available rigid laparoscope.

Keywords: laparoscopy, laser speckle contrast imaging, fluorescence imaging, hyperspectral imaging.

ЦВЕТ КОЛЛОИДОВ ПОЛИДИСПЕРСНЫХ ЗОЛОТЫХ НАНОЧАСТИЦ

Ю.Д. Гудова, А.А. Скапцов

Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

Применение наночастиц золота широко распространено в различных областях микроэлектроники, химического катализа И биомедицины. Существует ряд направлений диагностики и терапии онкологических новообразований с их помощью. Золотые наночастицы обладают уникальным эффектом рассеяния и поглощения света на основе плазмонного резонанса. Спектральное положение максимума плазмонного резонанса частиц зависит от их формы и размера и лежит в пределах от зелёной до инфракрасной областей (рисунок 1). Совокупность многих факторов оказывает влияние на форму и размер наночастиц золота, среди них концентрации реагентов, температура и время синтеза, время, прошедшее между добавлением реагентов. Поэтому наличие легко измеряемого параметра коллоидной системы может упростить оценку хода процесса роста золотых наночастиц.

В данной работе проводится теоретический расчет цветов смесей золотых наночастиц. Задачей работы было исследование влияния на цвет коллоида полидисперсности формы наночастиц и наличия фракции побочно образующихся при синтезе золотых наносфер.

Цвета рассчитывались по спектрам пропускания и отражения в соответствии со стандартом МКО 1964 года [1]. Спектры пропускания Бера – Ламберта. рассчитывались ПО закону Спектры отражения методу однократного рассеяния. Для рассчитывались ПО учета наностержней использовалось полидисперсности золотых нормальное распределение по форм-фактору. Коэффициенты рассеяния и экстинкции рассчитывались в приближении Рэлея [2]. Показатель преломления золота взят из [3].




Рис. 1. Спектры сечений экстинкций золотых наностержней для различных форм-факторов: (1) – 2, (2) – 3, (3) – 4

Рис. 2. Зависимость интенсивности цвета коллоида золотых наностержней для прошедшего (красный) и отраженного (черный) света от форм-фактора.



Рис. 3. Диаграмма распределения цвета коллоида золотых наностержней от формфактора и полидисперсности форм-фактора.



Рис. 4. Диаграмма распределения цвета смеси золотых наностержней и наносфер от форм-фактора и доли золотых наносфер.

В результате расчетов были получены следующие закономерности:

1. Цвет коллоидов золотых наночастиц обусловлен преимущественно спектром пропускания, а не спектром отражения (рисунок 2).

2. Монодисперсный коллоид золотых наностержней, имеющий форм-фактор в интервале от 2 до 3, обладает синим окрасом.

3. Увеличение полидисперсности форм-фактора золотых наностержней приводит к приобретению коллоидом синего оттенка (рисунок 3).

4. Увеличение доли золотых наносфер в смеси с золотыми наностержнями приводит к приобретению смесью красного оттенка (рисунок 4).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Джадд Д., Вышецки Г. Цвет в науке и технике. М.:Мир, 1978. 592с.
- Борен К., Хафмен Д. Поглощение и рассеяние света малыми частицами -М.:Мир, 1986 – 624с.
- McPeak K.M., Jayanti S.V., Kress S.J.P., Meyer S., Iotti S., Rossinelli A., Norris D.J. Plasmonic films can easily be better: rules and recipes // ACS Photonics, 2015, V.2, I.3, P. 326-333

АНАЛИЗ СПЕКТРОВ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ, ИХ ХАРКАТЕРИСТИК И КАЧЕСТВА СИГНАЛОВ ОТ ОБЪЕКТОВ РАЗЛИЧНЫХ КЛАССОВ

В.В. Евстифорова, Д.Н. Артемьев

Самарский национальный исследовательский университет, (443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34) e-mail: evst5377@gmail.com

Спектроскопия комбинационного рассеяния (рамановская спектроскопия) является важным методом, позволяющим получать точную информацию о биохимических особенностях образца. Спектроскопия комбинационного рассеяния находит свое применение в диагностических исследованиях и терапии. Для биологических объектов характерна низкая интенсивность рамановского сигнала относительно упругого рассеяния 10^{-6}), (порядка поэтому при регистрации сигналов важна высокая чувствительность детектора, а для определения точного положения спектральных полос – спектрограф с высоким разрешением.

Строгое выполнение вышеописанных требований необходимо для регистрации низкоинтенсивных сигналов от многокомпонентных объектов. Способность извлекать аналитическую информацию из любого спектроскопического метода обычно ограничена отношением сигнал / шум (SNR) [1]. Это отношение позволяет оценить сигнал относительно шума или флуоресценции для точной регистрации спектральной полосы.

Ключевые слова: рамановская спектроскопия, комбинационное рассеяние, цеолитные имидазолатные структуры, отношение сигнал–шум.

1. ВВЕДЕНИЕ

В данной работе проведено исследование спектров комбинационного рассеяния веществ из группы цеолитных имидазолатных структур (ZIF–8, ZIF–6, ZIF–3, ZIF–2) с молекулярной формулой $C_8H_{10}N_4Zn$. Цеолитные имидазолатные структуры представляют собой класс металлоорганических каркасов (MOF), которые топологически изоморфны цеолитам. ZIF состоят из тетраэдрически координированных ионов переходных металлов, связанных имидазолатными линкерами (Рис. 1). Из–за их прочной пористости, устойчивости к тепловым изменениям и химической стабильности ZIF

255

исследуются для таких применений, как улавливание углерода, а также применяются в качестве катализаторов [2].



Рис. 1. Молекулярная струткура ZIF-8 [3]

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Регистрация рамановского рассеяния осуществлялась с помощью измерительной системы, в состав которой входят узкополосный источник возбуждения – лазер LML-785.0RB-04 (мощность излучения на выходе из зонда 200 мВт, длина волны излучения 785 нм), оптический модуль фильтрации (RPB785 фирмы InPhotonics) и регистрирующий приемник – спектрограф Sharmrock SR-500i с интегрированной камерой ANDOR DV-420А-ОЕ с охлаждаемой матрицей до -65 °C, обеспечивающий регистрацию оптических сигналов низкой интенсивности. Регистрация сигнала осуществлялась в спектральном интервале 250–2000 см⁻¹ с разрешением 0.05 нм при низком уровне собственных шумов (рис. 2). Для каждого образца было произведено 5 измерений в одной точке. Объект располагался в фокусе оптического модуля (7,5 мм).



L – линзы, М– зеркала, DM–дихроичные зеркала, F – фильтры *Рис. 2. Оптическая схема экспериментальной установки [4]*

В ходе последовательной регистрации были получены Рамановские ZIF-8, ZIF-6, ZIF-3 3). В спектрах И ZIF-2 спектры (рис. наблюдаются близкие значения максимумов полос, что объясняется схожей структурой молекул, в основе которой лежит имидазольное кольцо $C_3H_4N_2$. Однако Рамановские спектры ZIF-8 отличаются более существенно и положением пиков (см. рис. 4) (из-за иной структуры молекул), и уровнем флуоресценции.



Рамановские спектры группы веществ ZIF

Рис. 3. Рамановские спектры группы веществ ZIF



Рис. 4. Отклонения положений пиков Рамановских спектров

ZIF –8	ZIF–6	ZIF–3	ZIF–2
282	255		258
	312	311	
		404	403
		616	
	647	647	647
683	676		661
834	762		
	847	841	838
			868
945	951	954	956
	974	979	979
1023	1092		1091
1143	1107	1105	1111
1182	1173	1176	1177
			1246
1312	1279	1282	1282
1385	1320	1319	1324
1460			1403
1507	1487	1495	1490

Таблица 1. Спектральные полосы образцов ZIF

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

Исследуя регистрируемые спектры комбинационного рассеяния, на примере были выявлены основные положения пиков (таблица 1). Рассмотрим основные положения полос для образца ZIF-8: 282 см -1 (растяжение Zn-N), 683 см -1(сжатие имидазольного кольца + изгиб H),

834 см -1 (изгиб групп С–Н в связях с С4–С5), 945 см -1 (изгиб группы С–Н в связи С2–Н), 1023 см -1 (изгиб группы С–Н), 1143 см -1 (растяжение С5–N), 1182 см -1 (растяжение С–N + колебание N–H), 1312 см -1 (расширение имидазольного кольца + колебание N–H), 1385 см -1 (изгиб СH₃), 1460 см -1 (колебание С–H), 1507 см -1 (растяжение С4–С5) [5].

Из полученных Рамановских спектров оценим отношение сигнал-шум для пиков с низкой и высокой интенсивностью. Для первого метода оценки воспользуемся формулой:

$$SNR_1 = \frac{s}{\sigma_y},\tag{1}$$

где S – средняя высота пика,

$$\sigma_{y} = \sqrt{\frac{(S_{i}-S)^{2}}{n-1}}$$
 – стандартное отклонение высоты пика [1]

n – число измерений.



Рис. 5. Определение высоты пика

		-	-
Образец	Рамановский сдвиг, см ⁻¹	SNR ₁	
ZIF-8	758	8,3	
	688	11,2	
ZIF–6	762	4,5	
	1278	155	
ZIF–3	750	9,3	
	1283	81	
ZIF–2 763		5,8	
	1281	141	

Таблица 2. Значения SNR₁ для образцов ZIF

В результате вычислений для низкоинтенсивных сигналов на 758 см⁻¹, 762 см⁻¹, 750 см⁻¹, 763 см⁻¹ значения SNR были близки. Для сигналов с высокой интенсивностью на Рамановском сдвиге 1278 см⁻¹, 1283 см⁻¹, 1281 см⁻¹ значения SNR для трех веществ были также близки, но для ZIF–8 на 688 см⁻¹ значение SNR составило 11,2 единиц. Это объясняется тем, что одно измерение из серии имело большее отклонение от среднего значения, поэтому SNR оказался ложно низким.

Для второго метода оценки воспользуемся формулой:

$$SNR = \frac{S}{6\sqrt{DS_N}},\tag{2}$$

где S – уровень Рамановского сигнала,

 DS_N – дисперсия шума в области от 801 до 809 нм (18-135 см⁻¹) [6]

Образец	Рамановский сдвиг, см -1	SNR ₂
ZIF-8	758	11,6
	688	427
ZIF–6	762	17,5
	1278	463
ZIF–3	750	29
	1283	185
ZIF–2	763	1,55
	1281	140

Таблица 3. Значения SNR₂ для образцов ZIF

В результате расчетов отношения сигнал-шум для сигналов с высокой интенсивностью на Рамановском сдвиге 688 см⁻¹, 1278 см⁻¹, 1283 см⁻¹, 1281 см⁻¹ значения SNR оказались одного порядка. Для сигналов с малой интенсивностью на Рамановском сдвиге 758 см⁻¹, 762 см⁻¹ и 750 см⁻¹ значения SNR для трех веществ были близки. Для ZIF-2 на 763 см⁻¹ значение SNR составило всего 1,55 единиц. Такое низкое отношение сигнал-шум получилось из-за того, что пик был слабо выражен, то есть имел малый уровень Рамановского сигнала, сравнимый с дисперсий шума в области лазерной линии.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе исследования качества регистрации полезного сигнала были получены отношения сигнал-шум для пиков малой и высокой интенсивности.

При расчете SNR_1 следует обращать внимание на такие аспекты, как большой разброс значений интенсивности пиков и большое количество измерений с малыми отклонениями пиков от средних значений. Эти аспекты могут привести к ложным значениям SNR или переоценке. Также данный метод расчета не является оптимальным, так как он позволяет оценить SNR только при проведении серии измерений.

Расчет *SNR*₂ значительно проще, с его помощью можно оценить SNR, произведя лишь одно измерение. Такой метод более точно позволяет отличить пики малой интенсивности от шума.

В зависимости от цели оценки SNR и полученных экспериментальных данных, стоит выбирать соответствующий способ расчета отношения сигналшум.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Richard L. McCreery Raman Spectroscopy for Chemical Analysis. Copyright 2000 John Wiley & Sons, Inc

2. Электронный

pecypc

[https://ru.qaz.wiki/wiki/Zeolitic_imidazolate_framework]

3. Захаров В.П., Братченко И.А., Артемьев Д.Н., Мякинин О.О., Корнилин Д.В., Козлов С.В., Морятов А.А. Диагностика новообразований легкого с использованием спектроскопии комбинационного рассеяния и автофлуоресцентного анализа. – Самара: JBPE, 2014 – 12 с. 3

4. Matthew R.Ryder, Bartolomeo Civalleri, Thomas D.Bennett, Sebastian Henke, Svemir Rudić, Gianfelice Cinque, Felix Fernandez-Alonso, Jin-Chong the Role Terahertz Vibrations TanIdentifying of in Metal-Organic Frameworks:From Gate-Opening Phenomenon Shear-Driven Structural to Destabilization.// PHYSICAL REVIEW LETTERS (2014)

5. Gayatri Kumari, Kolleboyina Jayaramulu, Tapas Kumar Maji, Chandrabhas Narayana Temperature Induced Structural Transformations and GasAdsorption in the Zeolitic Imidazolate Framework ZIF-8: A Raman Study// THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY (2013)

6. Khristoforova, Y. A., Bratchenko, I. A., Myakinin, O. O., Artemyev, D. N., Moryatov, A. A., Orlov, A. E., Zakharov, V. P. Portable spectroscopic system for in vivo skin neoplasms diagnostics by Raman and autofluorescence analysis // Journal of Biophotonics (2018) – 11 c. 3.

ANALYSIS OF RAMAN SPECTRA CHARACTERISTICS AND THE QUALITY OF SIGNALS FROM OBJECTS OF VARIOUS CLASSES

V. V. Evstiforova, D. N. Artemyev

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

Raman spectroscopy is an important technique for obtaining accurate information about the biochemical characteristics of a sample. Raman spectroscopy is used for diagnostic research and therapy. Biological objects are characterized by a low intensity of the Raman signal relative to elastic scattering (on the order of $10^{-7} - 10^{-6}$), therefore, when registering signals, a high detector sensitivity is important, and a high–resolution spectrograph is important for determining the exact position of spectral bands.

Strict fulfillment of the above described requirements is necessary to register low-intensity signals from multicomponent objects. The ability to extract analytical information from any spectroscopic method is usually limited by the signal-to-noise ratio (SNR) [1]. This ratio allows for evaluating the Raman signal against noise or fluorescence for accurate spectral band recording.

Keywords: Raman spectroscopy, Raman scattering, zeolite imidazolate structures, signal-to-noise ratio

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ РЕГУЛЯРНЫХ И СЛУЧАЙНЫХ ДВИЖЕНИЙ РАССЕИВАТЕЛЕЙ НА ЭВОЛЮЦИЮ СПЕКЛ-СТРУКТУРЫ ОКТ-СКАНОВ В КОНТЕКСТЕ РАЗВИТИЯ ОКТ-АНГИОГРАФИИ

<u>А.А. Зыков</u>, 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

Для задач ОКТ-ангиографии необходимо понимание характера эволюции временной корреляции ОКТ-сигналов при различных типах движений рассеивателей. Их аналитическое рассмотрение требует ряда упрощающих предположений. Нами проведено численное моделирование серий ОКТсканов для основных типов движений, характерных для эритроцитов. Корректность модели подтверждена согласованием с результатами для ранее известных случаев. Для броуновского вращательного движения эритроцитов выявлена функциональная зависимость, ранее неизвестная для ОКТ сигналов.

Ключевые слова: оптическая когерентная томография, ангиография, моделирование движения эритроцитов, корреляционный анализ.

1. ВВЕДЕНИЕ

Оптическая томография (OKT) когерентная находит широкое применение в медицинской диагностике. При этом полезную информацию о биоткани можно извлекать не только из непосредственно получаемых структурных ОКТ изображений, но и проводя более глубокий анализ статистических свойств спекловой структуры ОКТ сканов. Например, на основе корреляционного анализа серий ОКТ-сканов визуализируют сеть кровеносных сосудов [1], определяют вязкость жидкостей [2], размеры частиц, плавающих в жидкости [3], и др. Для этого необходимо связать реконструируемые характеристики с тем, как функция корреляции изменяется во времени. Влияние броуновского и потокового движений точечных рассеивателей на закон изменения корреляции хорошо изучено [4]. Для кровотока ситуация является более сложной. Основными реального рассеивателями в крови являются эритроциты. Их размеры не малы по сравнению с длиной волны, геометрия существенно анизотропна (т.к. по форме они напоминают диски), и закон их движения также довольно сложен.

263

На практике невозможно организовать эксперимент, в котором можно изолированно изучить, как влияют те или иные типы движений эритроцитов на закон изменения корреляции в широком диапазоне различных параметров. Поэтому предлагается сделать ЭТО эксперименте. В численном Преимуществом такого подхода является то, что можно не только изменять параметры в широком диапазоне значений, но и разделить «неразделимые» виды движений, как броуновское вращательное и поступательное движения частиц. В данной работе исследовались простейшие типы движений потоковое смещение, броуновское эритроцитов: поступательное И вращательное движения. Результаты согласуются с известными аналитическими формулами И с экспериментально получаемыми результатами, а также показывают новую функциональную зависимость при броуновском вращении эритроцитов.

2. ОПИСАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

Для моделирования ОКТ изображений применяется модель получения одномерных ОКТ изображений - А сканов, описанная в [5]. Для спектра зондирующего сигнала с центральным волновым числом k₀ и набора точечных рассеивателей с амплитудой рассеивания A_j и координатами z_j комплексная амплитуда q-го пикселя A скана будет определяться как:

$$A(q) = \sum_{j} \sum_{n} S(k_n) A_j exp\left(-i2k_n z_j\right) exp\left(i\frac{2\pi n}{H} z_q\right), \text{ где}$$
(1)

H – максимальная глубина зондирования, $k_n = k_0 + 2n\pi/H$ - волновое число n-ой гармоники спектра зондирующего сигнала, n изменяется в пределах от - (N-1)/2 до (N-1)/2, z_q – координата центра q-го пикслеля, S(k_n) – аподизационный множитель. Суммирование происходит по всем гармоникам и рассеивателям.

Получаемые А сканы являются одномерными, поэтому двумерное изображение состоит из соседних неперекрывающихся А сканов. Поэтому в горизонтальной плоскости возможно только дискретное движение рассеивателей. Как следствие, в ходе численного эксперимента



Рис. 1. Модель эритроцита

рассматриваются только вертикальные движения рассеивателей, т. к. их координата может меняться непрерывно. Несмотря на простоту данного приближения, такая модель позволяет наблюдать все качественные зависимости корреляционной функции от времени.

Как упоминалось выше, в кровеносных сосудах наибольший вклад во флуктуации регистрируемого сигнала и следственно декорреляцию сигнала вносит движение эритроцитов. Они имеют двояковогную форму, у которой нет точного аналитического описания. Но основное рассеяние оптического сигнала происходит «на краях» эритроцитов. Поэтому разумной аппроксимацией эритроцита, позволяющей учесть основные типы движений в двумерной модели, будет «гантель» длины равной средней длине эритроцита с двумя точечными рассеивателями на краях (Рис. 1а).

В модели [5] пучок оптического зондирующего сигнала аппроксимируется цилиндром, у которого амплитуда и фаза не зависят от поперечной координаты. Поэтому горизонтальные координаты гантели не учитываются, принимаемый сигнал зависит только от вертикальных координат рассеивателей. Это означает, что при невертикальном положении эритроцита берётся проекция его положения на вертикальную ось (Рис. 1б). Положение эритроцита с номером п задаётся двумя координатами: координатой центра (z_{Cn}) и углом поворота относительно вертикальной оси (φ_n) (Рис. 1б).

Основными элементарными типами движения эритроцитов в сосудах являются потоковое смещение и броуновское движение, которое можно разделить на броуновское вращательное и броуновское поступательное движения. Рассмотрим подробнее их моделирование:

1. Потоковое смещение эритроцитов. Все эритроциты смещаются

с постоянной скоростью, не поворачиваясь ($\varphi_n = const$):

 $z_{Cn}(t + \tau) = z_{Cn}(t) + V * \Delta t$, где V - скорость потока, Δt - временной интервал между последующими В сканами.

2. Броуновское поступательное движение эритроцитов. В этом случае отсутствует вращательное движение ($\varphi_n = const$), а положение центров гантелей изменяется случайным образом с гауссовым распределением вероятности смещения:

$$z_{Cn}(t+\tau) = z_{Cn}(t) + \Delta z_n$$

$$\rho(\Delta z_{Cn}) = \frac{1}{\sigma_{\Delta z}\sqrt{2\pi}} * \exp\left(\frac{-(\Delta z_{Cn} - z_{Cn})^2}{2\sigma_{\Delta z}}\right),$$
где

 $\sigma_{\Delta z}$ - дисперсия смещений эритроцитов

 Броуновское вращательное движение эритроцитов. Центры эритроцитов остаются неподвижными (*z_{cn} = const*), а их ориентация изменяется случайным образом с гауссовым распределением вероятности изменения угла:

 $\sigma_{\Delta \varphi}$ - дисперсия изменения углов поворотов эритроцитов.

Начальные положение и ориентация эритроцитов во всех трёх моделируемых случаях - случайные.

Коэффициент корреляции вычисляется по всему сосуду между первым В сканом (t=0) и каждым последующм В сканом (t=t_n):

$$K(\tau) = \frac{\langle B^*(t)B(t+\tau)\rangle}{\sqrt{\langle |B(t)|^2\rangle\langle |B(t+\tau)|^2\rangle}}, c\partial e$$
(2)

 $\langle \rangle$ - усреднение по окну размером MxN, B*(t) - комплексное сопряжение, B(t) - B скан в момент времени t, τ - временной интервал между изображениями.

Ожидаемыми результатами были зависимости вида $K \sim \exp(-at^n)$. Для более наглядной демонстрации соответствия аппроксимируещей зависимости и расчетного коэффициента межкадровой корреляции их графическое представление приводилость к виду линейной зависимости с использованием логарифмических осей и представлением коэффициента корреляции в зависимости от времени оси времени в масштабе t^n .



Рис. 2. Результаты численного эксперимента

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

На Рис. 2 представлены результаты численного эксперимента. На графиках изображены «распрямлённые» зависимости логарифма модуля коэффициента корреляции от времени в различной степени. Синие линии - рассчитанные значения, красные - линейная аппроксимация.

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Приведённые выше аналитические аппроксимации находят подтверждение в литературе. В работах [2-3] экспериментально полученная корреляционная функция для сферических частиц в жидкости аппроксимируется как $K \sim \exp(-at)$. В работе [5] аналитически получают приближенное выражение для временной зависимости корреляционной функции ОКТ сигнала точечных рассеивателей, испытывающих потоковое и Броуновское движение:

$$g(t) = exp\left(-\frac{t}{\tau_b}\right)exp\left(-\frac{t^2}{\tau_t^2}\right)exp(2ikv_z t)$$
(3)

$$|g(t)| = \left| exp\left(-\frac{t}{\tau_b}\right) exp\left(-\frac{t^2}{\tau_t^2}\right) \right|, \ exp\left(-\frac{t^2}{\tau_t^2}\right) \right|$$
(4)

g(t) - корреляционная функция ОКТ сигнала, τ_b - время корреляции для Броуновского движения, а τ_t - время корреляции для потокового движения.

Результаты нашего численного эксперимента находятся в полном соответствии с приведёнными выше формулами, ЧТО подтверждает предложенного метода моделирования. Более корректность того, В эксперименте было исследовано Броуновское вращательное движение, для которого были получены аналитические аппроксимации при малых и средних временах. Выявленная корневая зависимость корреляционной функции ранее не рассматривалась и встречается только в более сложных моделях при многократном рассеянии и невращательных типах движений.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе проведённых численных экспериментов по моделированию динамики спекл-структуры при различных типах движения эритроцитов в сосуде для каждого типа движения была получена аналитическая аппроксимация для межкадровой корреляционной функции. Полученные результаты согласуются с известными частными случаями. Также был выявлен не рассматривавшийся ранее закон спадания корреляционной функции при броуновском вращении эритроцитов.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 19-02-00645.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Jianbo Tang, Sefik Evren Erdener, Smrithi Sunil, David A Boas // Journal of biomedical optics. 2019. Vol. 24, № 3. P. 036005.
- Blackburn, B. J., Gu S. Ford, V. Jenkins, M. W. Dupps, W. J. & Rollins, A. M.
 // Investigative Ophthalmology & Visual Science, 2019. Vol. 60, № 1. P. 41
- Hagen-Eggert, M., Hillmann, D., Koch, P., & Hüttmann, G. // Optical Coherence Tomography and Coherence Domain Optical Methods in Biomedicine XV. 2011. Vol. 7889, P. 78892B
- Ivan Popov, Weatherbee A. S., Vitkin A.I. // Journal of Biomedical Optics. 2014. Vol. 19(12), 127004.
- 5. Zaitsev V.Y., Matveev L.A., Matveyev A.L., Gelikonov G.V., Gelikonov V.M. // Laser Phys. Lett. 2014.Vol. 11, № 10, P. 10560.

NUMERICAL SIMULATION OF THE INFLUENCE OF REGULAR AND RANDOM SCATTERERS MOTION ON EVOLUTION OF THE SPECKLE STRUCTURE OF OCT-SCANS IN THE CONTEXT OF OCT ANGIOGRAPHY DEVELOPMENT

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

Development of OCT-angiography based of the correlation analysis of OCT signals requires sufficiently ample understanding of laws of time evolution of the OCT-signal correlation function for various types of scatterers motions. Based on numerical simulations, analytical approximations of the time evolution of the correlation function of OCT signals were obtained for several main types of erythrocytes movements. Results are consistent with known analytical formulas and also show a new functional dependence for Brownian rotation of erythrocytes.

Keywords: optical coherent tomography, angiography, modelling RBC motion, correlation analysis.

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕПЛОВЫХ СВОЙСТВ СУСПЕНЗИЙ НАНОЧАСТИЦ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ИЗЛУЧЕНИЙ РАЗЛИЧНОЙ ЧАСТОТЫ И ПРИМЕНЕНИЕ ИХ В БИОМЕДИЦИНСКИХ ЦЕЛЯХ

А.В. Кошелева¹, Е.А. Бобков²

^{1,2}Национальный исследовательский ядерный университет «Московский инженерно-физический институт» (115409, г. Москва, Каширское шоссе, 31) e-mail: anjelickos-2013@yandex.ru

Существующие в настоящее время подходы к лечению рака, включающие в себя хирургическое вмешательство и облучение высокоэнергетическими пучками, не всегда дают удовлетворительные результаты для ряда онкологических новообразований. Одним из перспективных направлений в онкологии является использование наночастиц в качестве средств как диагностики, так и терапии рака. Использование нагрева тканей посредством электромагнитного излучения повышает эффективность терапии раковых заболеваний с использованием наночастиц. Нагрев производился с помощью модернизированного устройства для электромагнитной высокочастотной терапии, ультрафиолетового и инфракрасного излучений.

Ключевые слова: наночастицы микропористого кремния, терапия раковых опухолей, электромагнитное излучение.

1. ВВЕДЕНИЕ

Важным свойством наночастиц (НЧ) Si является их эффективный разогрев в поле высокочастотного (ВЧ) электромагнитного излучения стандартных медицинских приборов, что можно использовать для гипертермии при лечении злокачественных образований.[1] Благодаря тому, что НЧ адресно доставляются в опухоль и сильно нагреваются под воздействием ВЧ поля, обеспечивается локальность гипертермического воздействия при слабом нагреве окружающих здоровых тканей.[2]

Для создания ВЧ поля можно использовать стандартный прибор УВЧ терапии «Стрела», работающий на частоте 27 МГц с максимальной мощностью 60 Вт [3]. Однако для эффективной терапии опухолей, требуется поддержание уровня температуры, именно поэтому прибор был усовершенствован. В данной работе был разработан и реализован

программный контроль за уровнем температуры в процессе ВЧ гипертермии. Контроль и управление производятся с помощью тепловизора и платы с установленным на неё микроконтроллером ATmega 8, подключенным к кнопкам управления прибора УВЧ терапии «Стрела» [4].

Тепловизор измеряет температуру нагрева тканей, затем данные поступают на компьютер, где программа проверяет находится ли температура в необходимых пределах (41-45°C). Если температура ниже или выше заданного порога, то программа отправляет команду контроллеру, который в свою очередь посылает сигнал ВЧ прибору и возвращает температурные показатели в заданные границы. Контроль осуществляется в температурном коридоре вплоть до одного градуса.

Был проведен ряд опытов, связанных с описанием поведения кремниевых наночастиц под воздействием различных видов излучения. Основным воздействия наночастицы В данной работе методом на является высокочастотное (ВЧ) электромагнитное излучение. Для сравнения также исследовалось разогрев водных суспензий кремниевых наночастиц при их фотовозбуждении. Как было установлено недавно, такое вид возбуждения позволяет эффективно реализовать пространственно-локализованную фотогипертермию для биомедицинских применений [5,6].

2. МЕТОД ЛОКАЛЬНОЙ ФОТОГИПЕРТЕРМИИ

Суть метода фотогипертермии заключается в том, что поглощённое тканями оптическое излучение превращается в тепло, которое при достаточно высокой температуре разрушает раковые клетки. Известно, что НЧ Si с размерами от 10 до 100 нм, которые достаточно хорошо поглощают свет в видимом и ближнем ИК диапазонах спектра, могут накапливаться в области опухоли вблизи клеточных мембран и проникать внутрь клеток. Установлено, что поглощённая наночастицами энергия оптического излучения преобразуется в тепло, при этом раковые клетки в области локализации НЧ подвергаются термическому разрушению.

Широкому внедрению метода фотогипертермии в медицинскую практику способствует также применение надёжных, недорогих и компактных излучателей на основе мощных одиночных лазерных диодов спектрального диапазона 800 – 808 нм, излучающих в окне прозрачности биотканей. Для таких излучателей разработаны режимы квазинепрерывной и импульсной генерации, а также решены задачи обеспечения надёжности, простоты конструкции и невысокой стоимости требуемых драйверов питания и

271

охлаждения. Однако при фотогипертермии в непрерывном режиме облучения существует риск повреждения здоровых тканей, окружающих опухоль, что ограничивает использование этого метода. Для повышения эффективности и безопасности применения метода фотогипертермии перспективным представляется использование импульсно-периодического режима облучения, препятствующего значительному повышению средней температуры ткани. При этом вследствие селективного поглощения энергии наночастицами локальная температура в зоне облучения может превысить 42 °C, что достаточно для уничтожения раковых образований.

2.1. Определение величины нагрева слоя микропористого кремния при совместном воздействии инфракрасного и ультрафиолетового излучений

В данной серии опытов, был также использован концентрированный микропористый кремний с высушенным водным раствором декстрана в объёме 25 мл на тонкой стеклянной подложке.

Исходные условия: комнатная температура 21 С°.

Лабораторное оборудование: Инфракрасный лазер, ультрафиолетовый светодиодный фонарь, белая бумажная подложка под стеклянный образец.

Первое измерение было проведено с использованием ИК лазера с длиной волны 980 нм. Данный лазер светил на образец, расположенный на бумажной белой подложке, в течение 1 минуты. В результате тепловое равновесие было достигнуто через 30 секунд и соответствовало 45 градусам. График зависимости температуры нагрева образца от времени представлен на рисунке 1:



Рис. 1. Зависимость температуры образца от времени нагрева под воздействием ИК излучения

Второе измерение было проведено с использованием ультрафиолетового светодиодного фонаря. УФ фонарик светил на образец, расположенный на

бумажной белой подложке, также в течение 1 минуты. В результате тепловое равновесие было достигнуто через 30 секунд и равнялось 32 градусам.

Второе измерение было проведено с использованием ультрафиолетового светодиодного фонаря. УФ фонарик светил на образец, расположенный на бумажной белой подложке, также в течение 1 минуты. В результате тепловое равновесие было достигнуто через 30 секунд и равнялось 32 градусам.



Рис. 2. Зависимость температуры образца от времени нагрева под воздействием УФ-излучения

Третье измерение было проведено с использованием одновременно ультрафиолетового светодиодного фонаря и ИК лазера. Образец освещался в течение 1 минуты. В результате тепловое равновесие было достигнуто через 30 секунд и равнялось 54 градусам. График зависимости температуры образца от времени представлен на рисунке 3:



Рис. 3. Зависимость температуры образца от времени нагрева под воздействием УФ и ИК излучений одновременно

Следующая серия опытов проводилась исключительно с белой бумажной подложкой, чтобы установить величину её нагрева за минуту.

Сначала нагрев подложки производился с помощью ИК лазера в течении одной минуты. Температурное равновесие было достигнуто через 40 секунд и равнялось 27 градусам. График зависимости температуры нагрева подложки от времени представлен на рисунке 4:



Рис. 4. Зависимость температуры подложки от времени нагрева под воздействием ИК излучения

Затем нагрев подложки производился уже с помощью УФ фонарика также в течении одной минуты. Температурное равновесие было достигнуто через 30 секунд и равнялось 25 градусам. График зависимости температуры нагрева подложки от времени представлен на рисунке 5:



Рис. 5. Зависимость температуры подложки от времени нагрева под воздействием УФ излучения

И наконец нагрев подложки был произведен уже с помощью УФ фонарика и ИК лазера одновременно. Температурное равновесие было достигнуто через 40 секунд и равнялось 31 градусам. График зависимости температуры нагрева подложки от времени представлен на рисунке 6:



Рис. 6. Зависимость температуры подложки от времени нагрева под воздействием УФ и ИК излучений одновременно

Можно заключить, что образец микропористого кремния с водным раствором декстрана в объёме 25 мл нагревается под воздействием УФ излучения и ИК излучения за одно и то же время, а именно за 30-40 секунд. Наименьший нагрев был достигнут с помощью УФ излучения ($32 \, \text{C}^{\circ}$), чуть больший нагрев с помощью ИК-излучения ($45 \, \text{C}^{\circ}$). Соответственно наибольший нагрев был достигнут с помощью одновременного воздействия двух видов излучения, максимальная температура равнялась 54 С°. Данные представлены на рисунке 7:



Рис. 7. Зависимость температуры образца от времени нагрева под воздействием УФ и ИК излучений

Величина нагрева под воздействием УФ излучения за вычетом нагрева подложки равнялась 7 градусам за 30 секунд. Под воздействием ИК излучения за вычетом нагрева подложки равнялась 18 градусам за 30 секунд. А под воздействием ИК и УФ излучения за вычетом нагрева подложки равнялась 23 градусам за 30 секунд. Данные представлены на рисунке 8:



Рис. 8. Зависимость температуры подложки от времени нагрева под воздействием УФ и ИК излучений.

Таким образом наибольшая результативность достигается при комбинации двух методов излучения.

2.2. Определение величины нагрева водной суспензии микропористого кремния при воздействии ВЧ излучения (27 МГц)

В данной серии опытов были использованы растворы микропористого кремния(µPSi) с концентрацией 6 г/л и 3 г/л, а также дистиллированная вода. Каждый образец нагревался в течение 5 минут и остывал в течение 1 минуты. Измерение температуры производилось непрерывно термометром сопротивления. Целью опыта было установление зависимости скорости роста температуры образца от времени в зависимости от концентрации частиц микропористого кремния.

Исходные условия: комнатная температура 19 С°, которая затем вычиталась для наглядности графиков.

Лабораторное оборудование: аппарат для УВЧ терапии, медицинский термометр сопротивления.

На рисунке 9 представлены результаты эксперимента.



Рис. 9. Зависимость температуры водных суспензий микропористого кремния с концентрацией 6 г/л и 3 г/л, а также дистиллированной воды от времени облучений ВЧ излучением с частотой 27 МГц

Вывод: чем больше концентрация частиц µPSi тем выше скорость нагрева, а также выше конечная температура нагрева.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе были рассмотрены различные виды излучений, воздействующие на раствор микропористого кремния. На основании проведённых опытов можно сделать ряд выводов: 1) Скорость разогрева водной суспензии наночастиц пористого кремния с концентраций 3 г/л и 6 г/л в поле ВЧ излучения 27-40 МГц и мощностью 60 Вт составляет около 0,7 и 1,2 К/мин соответственно, что указывает на аддитивный вклад НЧ в разогрев суспензий.

2) Совместное воздействие ИК и УФ излучений увеличивает нагрев образца микропористого кремния, при этом величины нагревов практически аддитивно складываются.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kargina Yu.V. at al. Silicon Nanoparticles Prepared by Plasma-Assisted Ablative Synthesis: Physical Properties and Potential Biomedical Applications // Phys. Stat. sol. A- 2019, 1800897, p.1-6.

2. Kabashin A.V., Timoshenko V.Yu. What theranostic applications could ultrapure laser-synthesized Si nanoparticles have in cancer? // Nanomedicine – 2016, p 2247-2250.

3. Tamarov K.P. et al., Radio frequency radiation-induced hyperthermia using Si nanoparticle-based sensitizers for mild cancer therapy. // Scientific reports -2014, 4 : 7034, p 1-7.

 4. Техническая документация на микроконтроллер «АТmega 8».

 [Электронный ресурс].
 –
 Режим доступа:

 http://lib.chipdip.ru/083/DOC001083586.pdf –(Дата обращения: 25. 11. 2019).

4. В.А.Олещенко и др. Разогрев водных суспензий наночастиц кремния при воздействии излучения лазерного диода с длиной волны 808 нм для применений в методе локальной фотогипертермии.// Квантовая электроника - 2020, 50, № 2.

5. V.A.Oleshenko et al., Localized infrared radiation-induced hyperthermia sensitized by laserablated silicon nanoparticles for phototherapy applications.// Applied Surface Science – 2020, 516, p.1-7.

STUDY OF THERMAL PROPERTIES OF NANOPARTICLE SUSPENSIONS UNDER THE ACTION OF ELECTROMAGNETIC RADIATIONS OF DIFFERENT FREQUENCIES AND THEIR APPLICATION FOR BIOMEDICAL PURPOSES

A.V. Kosheleva¹, E.A. Bobkov²

^{1,2} National Research Nuclear University "Moscow Engineering Physics Institute" (115409, Moscow, Kashirskoe highway, 31) e-mail: anjelickos-2013@yandex.ru

The current approaches to cancer treatment, including surgery and high-energy beam irradiation, do not always give satisfactory results for a number of oncological neoplasms. One of the promising areas in oncology is the use of nanoparticles as a means of both diagnostics and cancer therapy. The use of tissue heating by means of electromagnetic radiation improves the effectiveness of cancer therapy using nanoparticles. Heating was carried out using a modernized device for electromagnetic high-frequency therapy, ultraviolet and infrared radiation.

Key words: microporous silicon nanoparticles, cancer therapy, electromagnetic radiation.

ЭНЕРГИИ И МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ПАРАМЕТРЫ СОЕДИНЕНИЙ, ЗАДЕЙСТВОВАННЫХ В РЕАКЦИЯХ ВИНИЛАЦЕТИЛЕНА И 1,3-БУТАДИЕНА С РАДИКАЛАМИ Н, ОН И СН₃

<u>Л.И. Крикунова¹</u>, А. Николаев¹, А.М. Мебель^{1,2}

¹Самарский национальный исследовательский университет им. С.П. Королёва, (443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34) ²Кафедра химии и биохимии, Международный институт Флориды, (Майами, Флорида 33199, США) e-mail: lubov_markova@inbox.ru

В данной работе подробно рассмотрены реакции взаимодействия радикалов H, OH и CH₃ с молекулами винилацетилена (C₄H₄) и 1,3-бутадиена (C₄H₆). В результате взаимодействия реагентов получены молекулы водорода (H₂), воды (H₂O) и метана (CH₄). Для всех реакций найдены оптимальные геометрии, частоты колебаний и значения потенциальных энергий с использованием методов квантовой химии, определены оптимальные пути течения реакций.

Ключевые слова: винилацетилен, 1,3-бутадиен, оптимизация геометрии, поверхности потенциальной энергии.

1. ВВЕДЕНИЕ

Целью данной работы является поиск оптимальных путей течения реакций молекул 1,3-бутадиена и винилацетилена с атомом водорода, гидроксильной группой и метилом. К основным задачам относится изучение вероятных путей реакций, оптимизация геометрий реагентов, продуктов и переходных состояний систем (барьеров), нахождение относительных энергий для всех найденных изомеров.

Выбранные углеводороды обладают высокой реакционной способностью, а так же способны участвовать в реакциях с образованием полициклических ароматических углеводородов. Реакции с простейшими радикалами дают возможность увидеть, как из молекулы винилацетилена и 1,3-бутадиена появляются радикалы, способные в дальнейшем объединяться во всё более сложные структуры.

В данной статье рассмотрены реакции с атомом водорода, гидроксильной группой и метилом.

279

2. ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ И МЕТОДИКА РАСЧЕТОВ

Для расчета энергий реагентов, продуктов реакций и переходных состояний была использована теория функционала плотности (ТФП или DFT английской аббревиатуре). Оптимизация геометрии И расчеты В колебательных частот проводились для выявления всех стационарных точек на пути реакций с использованием метода B3LYP [1, 2], который является гибридным методом теории функционала плотности, использующий обменный функционал Беке и корреляционный потенциал Ли-Янга-Парра. Расчёты проводились с использованием базисного набора G311**.

На последней стадии более точные значения энергий реагентов, продуктов и переходных состояний рассчитывались с использованием метода более высокого порядка CCSD(T) с базисным набором 6-311G** с химической точностью около 4 кДж/моль [4, 5]. При этом использовались оптимальные геометрии и частоты, рассчитанные методом B3LYP.

Структуры соединений построены с использованием программы ChemDraw Ultra 8.0. Квантово-химические расчеты проводились с использованием программных пакетов Gaussian версии 09 [6], и MOLPRO [4] установленных на вычислительном центре Самарского университета «Сергей Королев».

3. ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИЙ С МОЛЕКУЛАМИ ВИНИЛАЦЕТИЛЕНА (С4Н4)

При взаимодействии с различными радикалами исследованы три пути течения реакций, с различными вариантами отрыва атома водорода от молекулы винилацетилена, обусловленные структурной формулой молекулы.

В результате отрыва атома водорода от молекулы винилацетилена получен радикал C₄H₃ и продукты: молекула водорода H₂, молекула воды H₂O и молекула метана CH₄. Для различных вариантов отрыва атома водорода внешний вид радикала C₄H₃ так же имеет различную форму.

Оптимизация геометрии для реакций с участием водорода и гидроксильной группы позволяет рассмотреть все три случая течения реакции, с различными вариантами отрыва. Однако при взаимодействии реагентов наиболее вероятный путь течения реакции должен быть энергетически выгодным.

Поверхности потенциальной энергии для всех случаев течения реакции будут выглядеть следующим образом (рис. 1).



Рис. 1. Поверхности потенциальной энергии 1) C₄H₄+H=C₄H₃+H₂ 2) C₄H₄+OH=C₄H₃+H₂O 3)C₄H₄+CH₃=C₄H₃+CH₄

Заметим, что в реакции с метилом единственно возможным способом образования радикала C_4H_3 является отрыв концевого атома водорода. В реакциях с гидроксильной группой и атомом водорода энергетически выгодным является отрыв этого же атома от молекулы винилацетилена.

Таким образом в каждой реакции наиболее энергетически выгодным оказывается отрыв концевого атома водорода с разрывом углеводородной связи и образованием радикала C₄H₃.

4. ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИЙ С МОЛЕКУЛАМИ 1,3-БУТАДИЕНА (С4Н6)

При взаимодействии с различными радикалами исследованы два пути течения реакций, с различными вариантами отрыва атома водорода от молекулы 1,3-бутадиена, обусловленные его структурной формулой.

В результате отрыва атома водорода от молекулы 1,3-бутадиена получен радикал C₄H₅ и продукты: молекула водорода H₂, молекула воды H₂O и метан CH₄. Для различных вариантов отрыва атома водорода внешний вид радикала C₄H₅ так же имеет различную форму.

При оптимизации геометрии в реакциях с участием водорода и метила получены энергии для переходных состояний и продуктов для двух случаев отрыва водорода от молекулы 1,3-бутадиена.

Поверхности потенциальной энергии для всех случаев течения реакции будут выглядеть следующим образом (рис. 2).



*Рис. 2. Поверхности потенциальной энергии 1) С*₄*H*₆+*H*=*C*₄*H*₅+*H*₂ *2) C*₄*H*₆+*OH*=*C*₄*H*₅+*H*₂*O 3)C*₄*H*₆+*CH*₃=*C*₄*H*₅+*CH*₄

Образование радикала C_4H_5 может происходить различными способами, в зависимости от исходных реагентов. В реакциях с метилом и атомом водорода энергетически выгодным является отрыв не концевого атома от молекулы 1,3-бутадиена. В реакции с гидроксильной группой возможен только вариант с отрывом концевого атома.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе изучены реакции винилацетилена и 1,3-бутадиена с простейшими радикалами Н, ОН и СН₃. Рассмотрены различные случаи разрыва С-Н связи.

Таким образом для винилацетилена при взаимодействии с различными радикалами энергетически выгоден отрыв концевого атома водорода. Полученный радикал С₄H₃ имеет одинаковую структуру в каждой реакции. Для 1,3-бутадиена взаимодействие с различными радикалами может происходить разными способами. Так реакция 1,3-бутадиена с атомом водорода и метилом завершается отрывом не концевого атома водорода, а реакция с гидроксильной группой – отрывом концевого атома.

Полученные радикалы C₄H₃ и C₄H₅ могут вступать в дальнейшие взаимодействия и образовывать более сложные ароматические структуры, встречающиеся в процессах горения и в астрохимических процессах.

Научно-исследовательская работа в Самарском университете выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках гранта № 14. Y26.31.0020.

282

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Becke, A.D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange / A.D. Becke // The Journal of Chemical Physics. – 1993. – T. 98, № 7. – C.5648– 5652.
- Lee, C. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density / C. Lee, W. Yang, R.G. Parr // Physical Review B. 1988. T. 37, № 2. C.785–789.
- 3. Frenklach M. Reaction Mechanism of Soot Formation in Flames // PCCP. 2002.
 № 4. P. 2028–2037.
- 4. Frisch, M.J. Gaussian 09, revision B.01 / M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel et al. // Gaussian, Inc.: Wallingford, CT. 2010.
- 5. MOLPRO, version 2010.1, a package of ab initio programs, Werner H.-J., Knowles P.J., Knizia G., Manby F.R., Schütz M. and others // http://www.molpro.net.
- Schuchardt K.L. Basis Set Exchange: A Community Database for Computational Sciences / K.L. Schuchardt, B.T. Didier, T. Elsethagen, L. Sun, V. Gurumoorthi, J. Chase, J. Li, T.L. Windus // J. Chem. Inf. Model. – 2007. – T. 47, № 3. – C.1045–1052.

THE ENERGIES AND MOLECULAR PARAMETERS INVOLVED IN THE REACTION OF H, OH AND CH3 WITH 1,3-BUTADIENE AND VINYLACETYLENE

L.I. Krikunova¹, A. Nikolayev¹, A.M. Mebel^{1,2}

¹Samara National Research University, (Russia, Samara, Moskovskoye shosse, 34, 443086) ²Department of Chemistry and Biochemistry, International Florida Institute, (Miami, Florida 33199, USA) e-mail: lubov_markova@inbox.ru

In this work, the reactions of the interaction of radicals H, OH and CH₃ with vinyl-acetylene (C₄H₄) and 1,3-butadiene (C₄H₆) molecules are considered in detail. As a result of the interaction of reactants, molecules of hydrogen (H₂), water (H₂O), and methane (CH₄) were obtained. For all reactions, the optimal geometries, vibrational frequencies and values of potential energies were found using the methods of quantum chemistry, and the optimal paths of the reactions were determined.

Keywords: vinyl-acetylene, 1,3-butadiene, geometry optimization, potential energy surfaces.

ДИНАМИКА ПЕРЕПУТАННЫХ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ В СИСТЕМЕ ТРЕХ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ КУБИТОВ, УПРАВЛЯЕМЫХ ЛАЗЕРНЫМ ПОЛЕМ

<u>А.А. Кузьминых</u>¹, В.В. Семин²

^{1,2} Самарский национальный исследовательский университет, (443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34) ¹e-mail: alinakuzminyhk@gmail.com ²e-mail: semin@ssau.ru

В работе исследуется динамика перепутывания квантовых состояний трех взаимодействующих кубитов, расположенных в вершинах равностороннего треугольника. На основе решения ОКУ исследуется перепутывание системы.

Ключевые слова: кубит, квантовая динамика, запутанность.

1. ВВЕДЕНИЕ

Опираясь на открытие нескольких эффективных квантовых алгоритмов в середине 1990-х годов, квантовые вычисления стали активной областью исследований. Например, с использованием современных экспериментальных методов стало возможным готовить и контролировать квазиизолированные квантовые системы, которые неклассически коррелированы, то есть запутаны. Сегодня квантовая запутанность признана новым физическим ресурсом, который важен не только для квантовых вычислений, но и для квантовой криптографии, квантовой телепортации, квантовой передачи информации и других приложений [1, 2, 3, 4].

На пути исследования запутанности многокубитных систем встает множество трудностей, так как с ростом числа кубитов в системе происходит экспоненциальное увеличение размерности связанных с ней гильбертовых пространств. Более того, из-за хрупкой природы квантовой запутанности экспериментальные исследования все еще трудны для проведения и, таким образом, требуют проведения символьного и / или численного моделирования эволюции во времени и свойств многокубитных систем.

Ранее в [5, 6, 7] рассматривалась система из трех кубитов, но в данной статье не учитывались температура термостата, взаимодействие атомов между собой и влияние внешнего лазерного поля.

Целью данной работы является исследование динамики перепутывания квантовых состояний трех взаимодействующих кубитов, расположенных в вершинах равностороннего треугольника.

2. СИСТЕМА ТРЕХ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ КУБИТОВ

На рисунке 1 изображена модель из 3 взаимодействующих двухуровневых атомов, расположенных в вершинах равностороннего треугольника. Атомы взаимодействуют как между собой, так и с термостатом и внешним лазерным полем.



Рис. 1. Система из трех кубитов

Гамильтониан системы может быть записан в следующем виде:

$$H = H_{A} + H_{B} + H_{C} + H_{D} + H_{E}, (1)$$

где

$$H_A = \hbar \sum_k \omega_k b_k^{+} b_k \tag{2}$$

- гамильтониан термостата, b_k, b_k^+ - бозонные операторы рождения и уничтожения, ω_k - частота;

$$H_B = \hbar \omega_0 \sum_p \sigma_p^{\ z} \tag{3}$$

- гамильтониан свободных атомов, ω_0 - частота переходов в атоме, σ_p^z - матрица Паули для р-го атома;

$$H_{c} = \hbar \sum_{k,p} \left(g_{kp} b_{k} \sigma_{p}^{+} e^{ikR_{p}} + h.c. \right)$$

$$\tag{4}$$

- гамильтониан взаимодействия атомов с термостатом, $g_{kp} = \frac{\omega_0}{\omega_k} \sqrt{\frac{2\pi\omega_k}{\hbar V}} \mu_p e_\lambda$ - константа атом-полевого взаимодействия [8], V - объем квантования, μ_p - дипольный момент атома, e_λ - направление поляризации, σ_p^{+} - повышающий оператор;

$$H_{D} = \hbar \sum_{k,p} \left(\Omega_{R} \sigma_{p}^{+} e^{\left(ikR_{p} - i\omega_{L}t \right)} + h.c. \right)$$
(5)

- гамильтониан взаимодействия атомов с лазерным полем, Ω_R - частота Раби, \vec{k} - волновой вектор, \vec{R}_p - радиус вектор атома, ω_L - частота внешнего излучения;

$$H_{E} = \sum_{p \neq p'} V_{pp'} \sigma_{p}^{+} \sigma_{p'}^{-}$$
(6)

- гамильтониан диполь-дипольного взаимодействия атомов, $V_{pp'}$ - константа диполь-дипольного взаимодействия.

2.1. Операторно – кинетическое уравнение

Для удобства дальнейших вычислений перейдем к представлению взаимодействия, в котором от времени зависят как вектора состояний, так и операторы физических величин.

$$H_{I} = \sum_{p \neq p'} V_{pp'} \sigma_{p}^{+} \sigma_{p'}^{-} + \hbar \sum g_{k,p} \left(\sigma_{p}^{+} b_{k} e^{ikR_{p} - it(\omega_{k} - \omega_{0})} + \sigma_{p}^{-} b_{k}^{+} e^{-ikR_{p} + it(\omega_{k} - \omega_{0})} \right)$$
(7)

Обозначим комбинированный оператор плотности как ρ_{RS} . Приведенный оператор плотности получим, взяв след по переменным резервуара:

$$\rho_s = Tr_R(\rho_{RS}) \tag{8}$$

Уравнение движения для матрицы плотности будет выглядеть следующим образом:

$$i\hbar \frac{\partial \rho_{RS}}{\partial t} = \left[H^{I}(t), \rho_{RS}(t) \right]$$
(9)

Формально проинтегрировав, получим:

$$\rho_{RS}(t) = \rho_{RS}(0) - \frac{i}{\hbar} \int_{0}^{t} \left[H^{I}(s^{*}), \rho_{RS}(s^{*}) \right] ds^{*}$$

$$\tag{10}$$

Здесь и далее будем опускать индексы у матрицы плотности всей системы. Подставим (10) в (9):

$$\dot{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar} \Big[H_I(0), \rho(0) \Big] - \frac{i}{\hbar^2} \int_{o}^{t} \Big[H_I(t), \Big[H_I(s^*), \rho(s^*) \Big] \Big] ds^*$$

$$\tag{11}$$

Правая часть уравнения движения все еще содержит оператор плотности полной системы. Чтобы получить замкнутое уравнение движения только для ρ_s , предположим, что взаимодействие слабое, так что влияние на систему мало. Такое допущение известно как приближение Борна.

$$\rho(t) = \rho_s(t) \otimes \rho_B,$$

где $\rho_{\scriptscriptstyle B}\,$ - некое стационарное состояние окружения.

Взяв след по переменным резервуара, получим следующее выражение:

$$\dot{\rho}_{s}(t) = -\frac{i}{\hbar} Tr_{B} \Big[H_{I}(0), \rho_{s}(0) \otimes \rho_{B} \Big] - \frac{1}{\hbar^{2}} Tr_{B} \int_{0}^{t} \Big[H_{I}(t), \Big[H_{I}(s^{*}), \rho_{s}(s^{*}) \otimes \rho_{B} \Big] \Big] ds^{*}$$
(12)

В результате преобразований получим операторно - кинетическое уравнение:

$$\dot{\rho} = -i\sum_{p\neq p'} \Omega_{p,p'} \left[\sigma_{p}^{+} \sigma_{p}^{-}, \rho \right] - i\sum_{p} \Omega_{R} \left[\sigma_{p}^{+} e^{-i(kR_{p} + \Delta\omega_{L}t)} + \sigma_{p}^{-} e^{i(kR_{p} + \Delta\omega_{L}t)}, \rho \right] -\sum_{p,p'} \gamma_{p,p'} \left\{ \begin{pmatrix} N+1 \end{pmatrix} \left(\sigma_{p}^{+} \sigma_{p'}^{-} \rho - 2\sigma_{p'}^{-} \rho \sigma_{p}^{+} + \rho \sigma_{p}^{+} \sigma_{p'}^{-} \right) + \\ + N \left(\sigma_{p}^{-} \sigma_{p'}^{+} \rho - 2\sigma_{p'}^{+} \rho \sigma_{p}^{-} + \rho \sigma_{p}^{-} \sigma_{p'}^{+} \right) \right\}$$
(13)

где $N = \frac{1}{\left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_k}{k_bT}\right) - 1\right]}$ - среднее число фотонов при температуре *T* на

частоте ω_k .

Константы в выражении (13) определяются следующим образом [9]:

$$\Omega_{p,p'} = \frac{|d|^2 \omega_0^3}{c^3} \Biggl\{ \left(1 - 3\cos^2\theta\right) \Biggl[\frac{\sin\left(kR_{p,p'}\right)}{\left(kR_{p,p'}\right)^2} + \frac{\cos\left(kR_{p,p'}\right)}{\left(kR_{p,p'}\right)^3} \Biggr] - \left(1 - \cos^2\theta\right) \frac{\cos\left(kR_{p,p'}\right)}{\left(kR_{p,p'}\right)} \Biggr\}$$
(14)
$$\gamma_{p,p'} = \frac{2\omega_0^3 |d|^2}{3c^3} \Biggl\{ j_0 \Bigl(kR_{p,p'}\Bigr) + \Bigl(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\Bigr) j_2 \Bigl(kR_{p,p'}\Bigr) \Biggr\},$$
(15)

где |d| - модуль дипольного момента атома, $R_{p,p'}$ - радиус-вектор между р и р' атомом, θ - угол между дипольным моментом атома и его радиусвектором, $k = \frac{\omega}{c}$ - волновое число, $j_{0,2}$ - сферические функции Бесселя нулевого и второго порядка соответственно.

2.2. Перепутанность

Для оценки перепутывания будем использовать критерий, предложенный в [10]

$$E = E_A + E_B + E_C = 2\left[\sqrt{\det\left(\rho^A\right)} + \sqrt{\det\left(\rho^B\right)} + \sqrt{\det\left(\rho^C\right)}\right],\tag{16}$$

где $\rho^{A,B,C}$ – частично – транспонированные матрицы плотности для трех случаев: А – степень запутанности первого кубита по отношению к оставшейся подсистеме, В – второго, С – третьего.

На сегодняшний день существуют два наиболее известных запутанных состояния - $|W\rangle_3$ с параметром E = 2.828 и $|GHZ\rangle_3$, которое является максимально запутанным трехкубитным состоянием, параметр E равен 3.

2.3. Результаты работы

Подставив матрицы Паули в уравнение (13) и приняв, что система в начальный момент времени находится в GHZ состоянии, получим систему из шестидесяти четырех уравнений, численное решение которой получено в Wolfram Mathematica и представлено на рисунках 2 и 3.



Рис. 2. Вероятность нахождения системы в запутанном состоянии в отсутствии действия внешнего поля: T = 0 (красный), T = 0.1 (синий), T = 0.5 (черный), T = 1.5 (желтый)



Рис. 3. Вероятность нахождения системы в запутанном состоянии в момент действия внешнего поля: $T = 0.1, \Omega_R = 1$ (синий), $\Omega_R = 5$ (малиновый), $\Omega_R = 8$ (красный), $\Omega_R = 10$ (голубой)

Из графика на рисунке 2 видно, что с ростом температуры окружения, система все сильнее запутана и стремится к максимальному для данного состояния значению запутанности. Когда температура термостата равна нулю, кубиты, провзаимодействовав между собой, отдают всю энергию в окружение, соответственно запутанность быстро спадает на нет.

На рисунке 3 показан момент, когда температура окружения не равна нулю, система начинает обмениваться с термостатом энергией, что приводит к «поддержанию» запутанности. На данном графике с ростом частоты Раби растет и степень квантовой запутанности системы. Здесь прослеживается такой же принцип взаимодействия кубитов и окружения.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ
В работе рассмотрены три идентичных двухуровневых атома, расположенных в вершинах равностороннего треугольника.

Построено и решено операторно-кинетическое уравнение для данной системы, которая взаимодействует с термостатом и внешним лазерным полем. На основе численного решения исследована мера запутанности системы. Показано, что при росте температуры окружения или частоты Раби система кубитов стремится к максимальному значению запутанности для GHZ состояния.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- M.A. Nielsen, I.L. Chuang, Quantum Computation and Quantum Information. // Lecture Notes on Quantum Information and Quantum Computation, Physics, 1998, v. 219.
- 2. L. Gyongyosi , S. Imre, A Survey on quantum computing technology. // Computer Science Review, 2019, v. 31, p. 51-71.
- 3. S. Agrawal, Post-quantum Cryptography: An Introduction. // Cyber Security in India, Springer, 2020, v. 4.
- 4. S. Pirandola, J. Eisert, C. Weedbrook , Advances in quantum teleportation. // Nature Photonics, 2015, v. 9, p. 641–652.
- 5. C. Radhakrishnan, Po-Wen Chen, S. Jambulingam, Time dynamics of quantum coherence and monogamy in a non-Markovian environment. // Scientific Reports, 2019, v. 2363.
- 6. Wen-Bin He, Xi-Wen Guan, Exact Entanglement Dynamics in Three Interacting Qubits. // Chinese Physics Letters, 2018, v. 35.
- 7. S. Ghose, N. Sinclair, Tripartite Entanglement versus Tripartite Nonlocality in Three-Qubit Greenberger-Horne-Zeilinger-Class States. // Physical review letters, 2009, v. 102.
- G. Kurizki, Theory of cooperative fluorescence from products of reactions or collisions: Identical neutral atomic fragments. // Physical Review, 1987, v. 1, p. 90 - 104.
- 9. S. Agrawal, Quantum Statistical Theories of Spontaneous Emission and Their Relation to Other Approaches. // Springer-Verlag, 1974, v. 70.
- 10. Vineeth S. Bhaskara, Prasanta K. Panigrahi, Generalized concurrence measure for faithful quantification of multiparticle pure state entanglement using Lagrange's identity and wedge product. // Springer, 2017, v. 118.

DYNAMICS OF ENTANGED QUANTUM STATES IN A SYSTEM OF THREE INTERACTING QUBITS CONTROLLED BY A LASER FIELD

<u>A.A. Kuzminykh¹</u>, V.V. Semin²

^{1,2}Samara National Research University (34 Moskovskoe shosse, Samara, Russia, 443086) ¹e-mail: alinakuzminyhk@gmail.com ²e-mail: semin@ssau.ru

This paper investigates the dynamics of entanglement of quantum states of three interacting qubits located at the vertices of an equilateral triangle. The entanglement of the system is investigated based on the solution to the master equation.

Keywords: qubit, quantum dynamics, entanglement.

ДИАГНОСТИРОВАНИЕ МЕЛАНОМ С ПОМОЩЬЮ ЛАЗЕРНОГО ДАЛЬНОМЕРА

А.А. Лактионов, О.М. Алыкова

Астраханский Государственный Университет (414056 г.Астрахань ул. Татищева, 20a) e-mail: artemchiklak@mail.ru

Работа посвящена решению общей человеческой проблемы 21-го века – противодействию онкологическим заболеваниям, в работе рассматривается, возможный вариант решения проблемы ранней диагностики такого рода заболевания как меланома.

Ключевые слова: меланома, лазерное излучение, медицина, оптика, лазерная физика.

1. ВВЕДЕНИЕ

1.1. Новизна и актуальность данной работы

Меланома (melanoma) представляет собой злокачественную опухоль кожи, которая развивается из меланоцитов — клеток кожи, производящих пигмент меланин. Как известно, меланин определяет цвет кожи.

Злокачественная опухоль развивается из клеток с поврежденной ДНК. Происходит такое повреждение в результате воздействия различных негативных внешних факторов.

К основным факторам развития меланом относят:

 генетическую предрасположенность. Наследуется не само заболевание, а вероятность его возникновения при определенных условиях жизни;

 избыточная инсоляция, то есть чрезмерное пребывание на солнце.
 Именно поэтому врачи настоятельно не рекомендуют загорать в опасное время (с 11 до 16 часов) и советуют наносить на тело крем с SPF защитными факторами;

 наличие на коже большого количества родинок или, говоря медицинским языком, невусов, которые представляют собой доброкачественные пигментные образования. При травматизации, облучении или воздействии ряда других факторов возможно озлокачествление родинок;

 светлая кожа и рыжие волосы являются предрасполагающим фактором к развитию этого грозного заболевания;

 диспластические и врожденные невоклеточные невусы считаются предраковым состоянием и требуют постоянного контроля специалиста [1-3].

Основной темой данного исследования является ранняя диагностика и обнаружение злокачественных опухолей, а именно меланом. Важность работы представляется плачевной статистикой данного заболевания и его скоростью распространения заболевания среди остальных раковых заболеваний в современном мире. Согласно статистике ИЗ онкологического республиканского научного центра ОГИИ и медицинской радиологии Н.Н. Александрова меланома встречается примерно в 10 раз реже, чем рак кожи и составляет 1-4 % в общей структуре злокачественных новообразований человека. Эта опухоль является одной из наиболее злокачественных и характеризуется быстрым ростом и ранним бурным лимфогенным и гематогенным метастазированием [1-3].

Около половины случаев развития меланомы приходится на лиц в возрасте 30–50 лет. Крайне редко опухоль может развиваться у детей. Меланома может развиваться на коже любой области тела, но излюбленной ее локализацией у женщин являются нижние конечности (голень), а у мужчин – туловище (спина). У пожилых людей опухоль несколько чаще локализуется на коже лица.

Основными изученными параметрами и характеристиками меланом являются преимущественно геометрические и цветовые. К основным геометрическим параметрам меланом относят:

1) ассиметричную форму родинки;

2) изменение размера родинки;

3) изменение конфигурации по периферии;

4) «размывание» контура скопления пигментообразующих клеток

5) для более поздней стадии заболевания характерно появление трещин, кровоточивость и другие формы деформации.

Говоря о цветовых характеристиках, стоит отметить, что основными волнующими факторами являются неравномерность окраса, и наличие нескольких цветов, так же отмечается возможность злокачественного перерождения после увеличений родинки, в особенности диаметром более 0,5 см (рис. 1).

Базалиома



Рис. 1. основные способы геометрического и цветового отличия

Согласно исследованиям 2017 года проведенным коллективом из ученых самарского национального исследовательского университета имени академика С.П. Королева и Самарского государственного медицинского университета возможно исследование меланом методом органической спектроскопии, однако данный метод и в настоящее время не получил должного внимания. Основными действующими способами обнаружения меланом является осмотр родинок на приеме у врача с помощью дермоскопии, диагностически верным критерием является гистологическое исследование. Для его проведения в зависимости от размеров и локализации образования его либо иссекают целиком, либо производят биопсию [4,5].

Метод, предложенный в данном докладе, имеет большие перспективы в будущем, т.к. обладает большей простотой и высокой экономической эффективностью.

Цель работы: разработка способа замера, определения стадии и диагностирования меланом путем лазерного измерения опухоли, обнаружение меланом.

Задачи:

1) изучить аспекты и особенности заболевания;

2) собрать теоретический материал и сведения для перехода к практической части.

2. ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

2.1. Методика

Общая теория предлагаемого метода состоит в измерении толщины углубления опухоли методом проникновения лазера или другого источника света путем замера времени его прохода через опухоль и обратного отклика от здоровых тканей или вводимого в организм наноматериала (в нашем случае, нанокремния), т.к. злокачественное образование имеет отличную от здоровых тканей плотность и проводимость для света, что с свою очередь, позволит рассчитать по времени и длине пройденного пути световым (лазерным) лучом ее геометрические размеры (параметры углубления и метастазирования (при наличии такового)). Благодаря полученным данным врач сможет достоверно установить стадию и оценить тяжесть конкретного случая, сформулировать направление и дозировку лечения.

2.2. Источник излучения

В качестве необходимого источника света приоритетно использовать лазерное излучение, подходящим для данной задачи является излучение с длиной волны от 800 до 1100 нанометров (рис.2), такая длина волны позволит проникнуть лазерному лучу на необходимую глубину, вплоть ЛО лимфатических узлов человека. Подобные лазерные устройства используются в косметических целях и медицине. Важным вопросом в случае использования лазерного излучения является непосредственное изучение влияния на злокачественную опухоль его волн. Так же вопросом является отражение волн в теле, в случае необходимости дополнительного отражения рассматривается использование дополнительно вводимого материала, предположительно частиц нанокремния, в частности, благодаря их свойствам не пропускать и задерживать излучения подобной длины и частоты [4].



Рис.2 Проницаемость волн в зависимости от длины

3. ОБЩЕЕ УСТРОЙСТВО

Общее устройство предполагаемого прибора будет достаточно компактным и мобильным, сочетаясь с простотой эксплуатации схематично схоже с устройством активного лазерного геодезического дальномера (рис. 3).

дальномеров времени, которо	з активно ре затрач	ого тиг чивает	послан	ит в и ный д	змерен альном	ии ером	
сигнал для п	рохожде	ния ра	сстоян	ия до с	бъекта	ай	
обратно. Скоро	сть расг	ростра	анения	сигнал	а (скор	ость	
света	или звука	а) счит	ается и	звестн	юй.		
	Рассеивающая среда				Непрозрачное тел		
			-h -hd-				
14			1			1	
излучатель		• •	Concerna and		The	Z	
Излучатель							
О				_	\rightarrow	2	
			-		2	N	
Приёмник		• •	7		2	N	
Приёмник		11	r		2	N	
приёмник Расстояние до цели	1 M	10 M	100 M	1 км	10 км	100 KM	

Рис.3 Предполагаемая схема работы устройства

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На данный момент известна статистика, геометрические и цветовые характеристики меланом. В виду распространения онкологических

заболеваний и их непосредственной опасности на данный момент и в ближайшем обозримом бедующем, требуется расширение человеческого арсенала для защиты от возникшей угрозы. Данное устройство при создании прототипа, доработке и должной отладке, возможно, станет одним из востребованных инструментов врача-онколога. Главными преимуществами данного медицинского прибора должны стать простота, скорость и доступность в эксплуатации, проект находится в стадии разработки и наработки теоретических знаний и сведений, как о данном заболевании, так и воздействии на него возможных излучений и требует дальнейшего внимания и погружения в тематику.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. https://omr.by/lechenie-opukholej/opukholi-kozhi-kostej-i-myagkikh tkanej/melanoma-kozhi
- 2. http://kvd25.ru/patsientu/sovetyi-ot-vrachu/vse-o-melanome/
- 3. https://www.lissod.com.ua/about-cancer/cancer-types/melanoma/
- 4. https://evercare.ru/Nevisense
- 5. https://ssau.ru/news/14057-samarskie-uchenye-povysili-tochnost-ranneydiagnostiki-novoobrazovaniy-kozhi-do-97

DIAGNOSTIC MELANOME USING A LASER RANGE METER

A.A. Laktionov, O.M. Alykova

Astrakhan State University (414056 Astrakhan, Tatishcheva st., 20a) e-mail: artemchiklak@mail.ru

The work is devoted to solving the common human problem of the 21st century oncological diseases, the work considers a possible solution to the problem of early diagnosis of such a disease as melanoma.

Key words: melanoma, laser radiation, medicine, optics, laser physics.

МЕТОД ПОДГОТОВКИ И ОПРОСА АТОМОВ ТУЛИЯ ПРИ СПЕКТРОСКОПИИ НА СИНТЕТИЧЕСКОЙ ДЛИНЕ ВОЛНЫ

<u>Д.А.Мишин^{1,2},</u> Д.И. Проворченко^{1,2}, А.А.Головизин¹, Е.С.Федорова^{1,2}, Д.О.Трегубов¹, К.Ю. Хабарова^{.1,2}, В.Н.Сорокин¹, Н.Н.Колачевский^{1,2}

¹Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (119991, Россия, г. Москва, Ленинский проспект, д. 53) ²Российский квантовый центр (121205, Россия, г. Москва, Территория Инновационного Центра «Сколково», Большой бульвар, д.30, стр. 1) e-mail: mishin.da@phystech.edu

В работе приведены описания и результаты последних экспериментов, связанных с созданием репера частоты на основе ультрахолодных атомов тулия. Продемонстрированы одновременная оптическая накачка в начальные состояния и возбуждение двух часовых переходов, необходимых для спектроскопии с использованием синтетической длины волны и компенсации квадратичного эффекта Зеемана.

Ключевые слова: оптическая накачка, спектроскопия, сверхтонкое расщепление, оптические часы, часовой переход, ультрахолодные атомы, тулий.

1. ВВЕДЕНИЕ

На текущий момент частота является наиболее точно измеряемой физической величиной, поэтому разумно будет свести измерение остальных величин к измерению частоты. Данный подход в 2019 году вылился в переопределение системы единиц СИ [1]: теперь фиксированным считается некоторый набор физических констант, и с их помощью остальные физические величины привязываются к измерению секунды, которая, в свою очередь определена через радиочастотный переход между сверхтонкими компонентами основного состояния атома цезия. Относительная неточность экспериментальной реализации такого определения достигает 10⁻¹⁶, что в итоге и будет ограничивать метрологические изменения. При этом, если переопределить секунду через некоторый переход в оптическом диапазоне, относительную ошибку удастся уменьшить на два порядка, и многие научные группы по всему миру занимаются исследованием различных квантовых систем в качестве кандидатов на роль оптического стандарта частоты.

В лаборатории сложных квантовых систем ФИАН в данной области ведется разработка репера частоты на основе ансамблей ультрахолодных атомов тулия, и многие результаты уже были достигнуты. На данный момент реализованы две ступени лазерного охлаждения, позволяющие достичь температуры атомов порядка 10 мкК [2], задетектирован часовой переход на длине волны 1.14 мкм [3], и найдена магическая длина волны для создания оптической решётки [4]. Это позволило подавить сдвиги и уширения, вызванные линейными эффектами Доплера и Штарка и на данный момент наибольший вклад в сдвиг частоты часового перехода вызван эффектом Зеемана. Спектроскопия перехода между центральными магнитными подуровнями помогает избежать сдвигов и уширений за счёт линейного эффекта, а если при этом использовать синтетическую длину волны, можно подавить и второй порядок эффекта Зеемана.

2. СИНТЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТОТА, ПОДГОТОВКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Ненулевой спин ядра тулия I=1/2 приводит к дуплетной структуре уровней. В приближении малых полей из формулы Брейта-Раби можно найти, как от магнитного поля зависит сдвиг частоты часового перехода между тонкими компонентами основного состояния в случаях $|F = J \pm 1/2, m_F\rangle \rightarrow |F' = J' \pm 1/2, m_F'\rangle$:

$$h\Delta v_{mF \to mF'} \left(F = J \pm 1/2, B_0\right) = \left(g_{F'}m_{F'} - g_F m_F\right) \mu_B B_0 \pm \\ \pm \left[\frac{\left(g_{J'}\mu_B - g_I\mu_N\right)^2}{2A(2J'+1)} \left(1 - \frac{m_{F'}^2}{(2J'+1)}\right) - \frac{\left(g_J\mu_B - g_I\mu_N\right)^2}{2A(2J+1)} \left(1 - \frac{m_F^2}{(2J+1)}\right)\right] B_0^2$$
(1)

где A - константа сверхтонкого расщепления, а необходимые g-факторы могут быть найдены в работах [5-7]. Из формулы (1) видно, что для центральных магнитных подуровней ($m_F = m'_F = 0$) линейный эффект Зеемана отсутствует, а сдвиги, вызванные квадратичным эффектом равны по модулю и противоположны по знаку. Таким образом, полусумма частот указанных переходов оказывается нечувствительна к эффекту Зеемана первого и второго порядков, что продемонстрировано на рисунке 1.



Puc. 1. Зависимость частот переходов $|J = 7/2, F = 4\rangle \rightarrow |J' = 5/2, F' = 3\rangle$ и $|J = 7/2, F = 3\rangle \rightarrow |J' = 5/2, F' = 2\rangle$ от магнитного поля

Однако для реализации такого эксперимента необходимо, во-первых, научиться готовить атомы на центральных магнитных подуровнях двух нижних состояний и, во-вторых, возбуждать оба перехода с минимальным интервалом во времени, чтобы избежать систематических ошибок.

2.1. Подготовка начальных состояний

Задача подготовки атомов на центральном магнитном подуровне была решена в нашей лаборатории с помощью метода оптической накачки, что было подробно описано в работе [8]. Результаты данной работы также были представлены моим коллегой на XVII Всероссийском молодежном Самарском конкурсе-конференции научных работ по оптике и лазерной физике [9] и здесь будут повторно упомянуты лишь самые важные для дальнейшего рассмотрения результаты.

Для оптической накачки на центральный магнитный подуровень необходимо связать два уровня с равными квантовыми числами полного момента F = F' с помощью π -поляризованного излучения. Тогда переход между центральными магнитными подуровнями возбуждаться не будет, и большая часть атомов из-за спонтанного распада накачается в необходимое состояние. Однако существует и канал потерь, приводящий к тому, что атомы оказываются на уровне с квантовым числом полного момента F = 3, что продемонстрировано на рисунке 2.



Рис. 2. Схематичное распределение атомов по магнитным подуровням после нескольких циклов поглощения и испускания накачивающего излучения



Рис. 3. Спектроскопия перехода, используемого для накачки. Центральные частоты равны $v_{4-4} = 715\ 701\ 100\ MHz$ и $v_{3-3} = 715\ 701\ 018\ MHz$

Таким образом в процессе накачки часть атомов оказываются на верхнем сверхтонком подуровне основного состояния $|F = 3\rangle$.

Следующим важным моментом, о котором необходимо сказать, является переход, используемый нами для оптической накачки: результат эксперимента по его спектроскопии представлен на рисунке 3. Разница в частотах между переходами $|F = 4\rangle \rightarrow |F' = 4\rangle$ и $|F = 3\rangle \rightarrow |F' = 3\rangle$ составляет всего 82 МГц, при этом для уменьшения нагрева атомов отстройка от резонанса в экспериментах по накачке превышает 100 МГц. Это значит, что с помощью того же излучения автоматически реализуется схема оптической накачки, но уже на центральный магнитный подуровень состояния с F = 3. Эффективность данного подхода была проверена экспериментально, однако

прежде чем приводить результаты, необходимо описать метод возбуждения часового перехода и регистрации атомов.

2.2. Возбуждение часовых переходов

Излучение часового лазера делится на два пучка, каждый из которых проходит через акустооптический модулятор (далее AOM), после чего пучки вновь сбиваются вместе и заводятся в волокно, ведущее к вакуумной камере, как изображено на рисунке 4. Таким образом каждый АОМ отвечает за перестройку частоты одного из двух часовых переходов, что позволяет возбуждать как оба перехода одновременно, так и каждый из них в отдельности. На рисунке 5 представлена импульсная схема и расположение световых пучков в эксперименте: после захвата в магнито-оптическую (эти стадии на ловушку охлаждения рисунке опущены) атомы И перезахватываются В оптическую решётку. Далее, после импульса накачивающего излучения, мы избавляемся от излишне горячих атомов, на время понижая мощность решётки, после чего возбуждаем один из часовых переходов. Далее импульсом излучения, настроенного в резонанс с одним из охлаждающих переходов, регистрируем атомы, оставшиеся в основном Для определения количества атомов уровне $|F = 3\rangle$ состоянии. на использовалось излучение, резонансное с переходом $|F = 3\rangle \rightarrow |F' = 4\rangle$ между другими сверхтонкими компонентами охлаждающего перехода, которое формируется с использованием отдельного АОМа. В результате данных экспериментов были получены графики, приведённые на рисунке 6: были зафиксированы оба часовых перехода с глубиной провала более 85%, что подтверждает эффективность накачки. Данные ПО одновременному возбуждению двух переходов требуют более скрупулёзного анализа: из-за неравномерного распределения атомов по начальным состояниям спонтанный распад часового уровня $|J = 5/2, F = 3\rangle$ на уровень $|J = 7/2, F = 3\rangle$ может исказить результаты спектроскопии, и этот эффект будет учтён В последующих экспериментах.



Рис. 4. Схема управления частотой излучения, возбуждающего часовые переходы



Рис. 5. Схема импульсов и расположение оптических пучков в экспериментальной установке 2.



Рис. 6. Провал в количестве атомов, вызванный возбуждением часовых переходов $|J = 7/2, F = 4\rangle \rightarrow |J = 5/2, F = 3\rangle$ (слева) и $|J = 7/2, F = 3\rangle \rightarrow |J = 5/2, F = 2\rangle$ (справа)

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе продемонстрирована одновременная накачка в оба начальных состояния, необходимых для спектроскопии с использованием синтетической частоты, с эффективностью выше 85%. Также была проведена спектроскопия двух часовых переходов и дальнейшей задачей является анализ особенностей их одновременного возбуждения, что вплотную подведёт нас к эксперименту по компенсации квадратичного эффекта Зеемана.

Исследования выполнены при поддержке гранта РНФ № 19-12-00137

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Davis, Richard S. "How to define the units of the revised SI starting from seven constants with fixed numerical values." Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology 123 (2018): 1.
- Sukachev D.D., Kalganova E.S., Sokolov A.V., Fedorov S.A., Vishnyakova G.A., Akimov A.V., Kolachevsky N.N., Sorokin V.N., Secondary laser cooling and capturing of thulium atoms in traps. Quantum Electronics 44(6):515--520 (2014).
- Golovizin A.A., Kalganova E.S., Sukachev D.D., Vishnyakova G.A., Semerikov I.Y., Soshenko V.V., Tregubov D.O., Akimov A.V., Kolachevsky N.N., Khabarova K.Y., Sorokin V.N., Detection of the clock transition (1.14 μm) in ultra-cold thulium atoms. Quantum Electronics 45(5):482 (2015).
- Golovisin A.A., Fedorova E.S., Tregubov D.O., Sukachev D.D., Khabarova K.Yu., Sorokin V.N., Kolachevsky N.N., Inner-shell clock transition in atomic thulium with a small blackbody radiation shift. Nature communications 10(1):1724 (2019).
- Giglberger, D. Ground-state hyperfine structure and nuclear magnetic moment of thulium-169 / D. Giglberger, S. Penselin // Zeitschrift fuer Physik. — 1967. – - T. 199, № 2. — C. 244—255.
- Blaise, J. Progres recents dans letude des spectres darc et detincelle du thulium / J. Blaise, P. Camus // Comptes rendus hebdomadaires des seances de l academie des sciences. — 1965. — T. 260, № 18. — C. 4693.
- Van Leeuwen, K. High resolution measurements of the hyperfine structure in 10 levels of Tm I / K. Van Leeuwen, E. Eliel, W. Hogervorst // Physics Letters A. – - 1980. — T. 78, № 1. — C. 54—56.
- 8. Fedorova, Elena Sergeevna, et al. Optical pumping of ultracold thulium atoms to a lower level of the clock transition and study of their depolarisation. Quantum Electronics 49.5 (2019): 418.
- 9. XVII Всероссийский молодежный Самарский конкурс-конференция научных работ по оптике и лазерной физике: сборник трудов конференции, (Самара, 12–16 ноября 2019 г.). – Москва: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук, 2019. – С. 352-359.

PREPARATION AND INTERROGATION OF THULIUM ATOMS DURING SYNTHETIC WAVELENGTH SPECTROSCOPY

<u>D.A. Mishin^{1,2}</u>, D. I.Provorchenko^{1,2}, A. A. Golovisin¹, E. S.Fedorova^{1,2}, D.O.Tregubov¹, K. Yu.Khabarova^{1,2}, V. N.Sorokin¹, N. N.Kolachevsky^{1,2}

¹Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences (119991, Russia, Moscow, Leninskiy Prospekt, 53) ²Russian Quantum Center (121205, Russia, Moscow, Skolkovo IC, Bolshoy Bulvar 30, bld. 1) e-mail: mishin.da@phystech.edu

Latest experiments on the thulium optical clock building are described in this work. Here we demonstrate effective simultaneous optical pumping to both of the initial states and excitation of the two clock transitions needed for the synthetic wavelength spectroscopy and second order Zeeman effect elimination.

Keywords: optical pumping, spectroscopy, hyperfine splitting, optical clock, clock transition, ultracold atoms, thulium.

НЕПЕРТУРБАТИВНАЯ ПЕРЕНОРМИРОВКА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ С ФОНОННЫМ РЕЗЕРВУАРОМ

Р.Х. Гайнутдинов^{1,2}, <u>Л.Я. Набиева</u>¹, А.И. Гарифуллин¹, А.А. Мутыгуллина¹

¹Казанский федеральный университет (420008, Казань, ул. Кремлевская, 18) ²Академия наук Республики Татарстан (420111, г. Казань, ул. Баумана, 20) e-mail: lilya.nabieva.97@mail.ru

Квантовая фононным линамика одиночной квантовой точки с обобщенной исследуется с использованием формализма резервуаром квантовой динамики [Гайнутдинов Р.Х. 1999 J. Phys. A 32 5657]. Собственнофункция непертурбативно энергетическая вычисляется с учетом перенормировки вершинной функции и оператора Грина. Показано, что непертурбативная перенормировка вершинной функции и оператора Грина существенно влияет на характер взаимодействия экситона с фононным резервуаром, и при этом не используется марковское приближение.

Ключевые слова: собственно-энергетическая функция, квантовые флуктуации, перенормировка, квантовые точки.

1. ВВЕДЕНИЕ

Процессы дефазировки, недиссипативным обменом вызванные информацией между квантовыми системами и средой, являются одним из препятствий на пути создания устройств для квантовой информации [1-5]. Некоторые, на первый взгляд, формальные задачи могут требовать более Проблемы, тщательного подхода. связанные с ультрафиолетовыми расходимостям, возникающие в квантовой теории поля, решаются в квантовой электродинамике путем перенормировки. Как мы показываем, теория перенормировок важна не только для устранения расходимостей, но и для понимания природы процессов, влияющих на собственно-энергетическую функцию системы. В данной работе мы показываем, что непертурбативная перенормировка вершинной функции и оператора Грина позволяет с большей точностью описывать процессы квантовых флуктуаций. Мы определяем производную собственно-энергетической функции, которая играет ключевую роль в процессах взаимодействия квантовой точки с фононным резервуаром.

А также исследуем зависимость производной от температуры и параметра Хуана-Риса, который определяет экситон-фононной взаимодействие.

2. НЕПЕРТУРБАТИВНОЕ ОПИСАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Для описания процессов, связанных с квантовыми флуктуациями, как нелокального во времени взаимодействия, мы используем формализм обобщенной квантовой динамики (ОКД) [6], который позволяет решать проблему непертурбативно. Обобщенное динамическое уравнение (ОДУ) записывается в терминах оператора $\tilde{S}(t_2, t_1)$, который определяет вклад в оператор эволюции $U(t, t_0)$, от процесса, в котором взаимодействие начинается в момент времени t_1 и заканчивается в момент времени t_2 .

$$\langle \psi_2 | U(t,t_0) | \psi_1 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle + \int_{t_0}^t dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \langle \psi_2 | \tilde{S}(t_2,t_1) | \psi_1 \rangle,$$
 (1)

$$(t_2 - t_1)\tilde{S}(t_2, t_1) = \int_{t_1}^{t_2} dt_4 \int_{t_1}^{t_4} dt_3(t_4 - t_3)\tilde{S}(t_2, t_4)\tilde{S}(t_3, t_1).$$
(2)

Граничное условие для уравнения (2) соответствует взаимодействию на бесконечно малом временном промежутке $t_2 \rightarrow t_1$, определяемом гамильтонианом взаимодействия $\tilde{S}(t_2,t_1) \rightarrow H_{int}(t_2,t_1)$. С учетом того, что в картине Шредингера оператор эволюции можно записать через оператор Грина G(z), имеем $U_S(t,0) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{+\infty} e^{-izt} G(z) dx$, z = x + iy. Тогда, в энергетическом представлении ОДУ принимает вид

$$\frac{dT(z)}{dz} = -T(z)(G_0(z))^2 T(z),$$
(3)

$$T(z) = i \int_{0}^{\infty} d\tau \exp(i(z - H_0)t_2) \tilde{S}(t_2, t_1) \exp(-i(z - H_0)t_1).$$
(4)

Метод позволяет с самого начала учесть, что вклад в оператор Грина G(z), который исходит от процессов, связанных с самодействием частиц, имеет ту же структуру, что и свободный оператор Грина $G_0(z)$. По этой причине естественно заменить $G_0(z)$ оператором $G_0^{(\nu)}(z)$, описывающим эволюцию системы, когда частицы свободно распространяются,

$$\langle m' | G_0^{(\nu)}(z) | m \rangle = \frac{\langle m' | m \rangle}{z - E_m - C_m(z)},\tag{5}$$

где $|m\rangle$ - собственные векторы свободного гамильтониана ($H_0 |m\rangle = E_m |m\rangle$). Остальные вклады описываются оператором $G^{(I)}(z)$

$$G(z) = G_0^{(\nu)}(z) + G^{(I)}(z) \equiv G_0^{(\nu)}(z) + G_0^{(\nu)}(z)M(z)G_0^{(\nu)}(z),$$
(6)

где оператор M(z) описывает процессы взаимодействия частиц друг с другом. Уравнение для собственно-энергетической функции $C_m(z)$, имеет вид

$$\frac{dC_m(z)}{dz} = -\langle m | M(z) \left(G_0^{(\nu)}(z) \right)^2 M(z) | m \rangle, \langle m | m \rangle = 1,$$
(7)

а условие $z - E_m^{(0)} - C_m(z) = 0$ определяет физические массы частиц. Фактически, поскольку наибольший вклад вносят, процессы связанные с фундаментальным взаимодействием в системе, в главном порядке уравнение для $C_m(z)$ сводится к уравнению

$$\frac{dC_m^{(0)}(z)}{dz} = -\langle m | H_I \left(G_0^{(\nu)}(z) \right)^2 H_I | m \rangle, \langle m | m \rangle = 1.$$
(8)

3. ЭКСИТОН-ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

Рассмотрим квантовую точку, сильно связанную с полем резонатора и резервуаром акустических фононов. Для описания процессов квантовой флуктуации квазичастиц между уровнями квантовых точек, одетых полем резонатора и бозонной модой, используем граничные условия $M^{(0)}(z) = H_I$. Гамильтониан модели независимых бозонов, описывающий фононы и экситон-фононное взаимодействие, имеет вид [7,8]

$$H_{I} = \sum_{q} \omega_{q} b_{q}^{*} b_{q} + \sum_{q} g_{x}^{q} (b_{q} + b_{q}^{\dagger}) |x\rangle \langle x|, \qquad (9)$$

где $|x\rangle$ - вектор экситонного состояния, q обозначает различные фононные моды с энергией ω_q , b_q^{\dagger} и b_q операторы рождения и уничтожения фононов, соответственно, g_x^q - деформационный потенциал связи, который зависит от материальных параметров основного полупроводника и волновой функции экситона. Итак, уравнение (7) в лидирующем порядке можно записать в виде

$$\frac{dC_{x,\mu}(z)}{dz} = -\sum_{\nu} \sum_{\mu} \frac{\langle x, \mu | H_I | x, \mu, \nu \rangle \langle x, \mu, \nu | H_I | x, \mu \rangle}{\left(z - E_x\right)^2}.$$
(10)

Усредняя по степеням свободы резервуара $|\mu\rangle$, получаем

$$\frac{dC_x(z)}{dz} = \sum_{q} \left\{ \frac{|g(q)|^2 (1+n(q))}{(z-E_x - \omega(q))^2} + \frac{|g(q)|^2 n(q)}{(z-E_x + \omega(q))^2} \right\}.$$
(11)

Решая уравнение, приходим к виду

$$C_{x}(z) = \sum_{q} \left\{ \frac{|g(q)|^{2} (1 + n(q))}{z - E_{x} - \omega(q)} + \frac{|g(q)|^{2} n(q)}{z - E_{x} + \omega(q)} \right\}.$$
 (12)

Однако, в случае сильной связи нельзя пренебрегать функцией собственной энергии в операторе Грина, как и нельзя ограничиться оператором взаимодействия в лидирующем порядке в числителе, то есть необходимо использование оператора M(z). Можно показать, что в общем случае решение принимает вид

$$C_{x,\mu}(z) = \sum_{\nu} \sum_{\mu} \frac{\langle x, \mu | M(z) | x, \mu, \nu \rangle \langle x, \mu, \nu | M(z) | x, \mu \rangle}{z - E_x - C_x(z)}.$$
 (13)

Представим $C_{x}(z)$ в виде

$$C_{x}(z) = (z - E_{x})\chi_{1} + \tilde{C}_{x}(z), \qquad (14)$$

где χ_1 первая производная собственно-энергетической функции. Пренебрегая $\tilde{C}_x(E)$ и подставляя (14) в (13), получаем

$$C_{x,\mu}(z) = \sum_{\nu} \sum_{\mu} \frac{\langle x, \mu | M(z) | x, \mu, \nu \rangle \langle x, \mu, \nu | M(z) | x, \mu \rangle}{Z_2^2(z - E_x)}.$$
 (15)

где $Z_2 = (1 - \chi_1)^{1/2}$. Множитель Z_2 можно рассматривать как константу, перенормирующую оператор Грина экситона, связанный с внешними линиями.

4. ПЕРЕНОРМИРОВКА ЭКСИТОН-ФОНОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Определим теперь параметр перенормировки экситон-фононной связи Z_1 . Часть оператора взаимодействия $M_{qr}(z)$ описывается лестничными диаграммами, образованными последовательной заменой членов $H_{qr}\tilde{G}_0(z)H_{qr}\tilde{G}_0(z)...H_{qr}$ в уравнении (4). Таким образом, вклады от лестничных диаграмм могут быть представлены как

$$M_{qr}^{L}(z) = H_{qr} + \sum_{n=1}^{\infty} H_{qr} \left(\tilde{G}_{0}(z) H_{qr} \right)^{n}.$$
 (16)

Другие члены в решении уравнения (16) содержат петли, связанные с испусканием и поглощением квантов в процессе взаимодействия. Поскольку мы сосредоточены на перенормировке экситон-фононной связи, мы ограничимся вкладом от процессов, описываемых петлей с одним гамильтонианом взаимодействия внутри нее:

$$\langle x | H_{qr} | x, q \rangle + \langle x | M(E_x + i0) \tilde{G}_0(E_x + i0) H_{qr} \tilde{G}_0(E_x - E_q + i0) M(E_x + i0) | x \rangle.$$
 (17)

В пределе $q \rightarrow 0$ получаем уравнение

$$\langle x; \mu | H_{qr} | x; \mu, q \rangle + \langle x; \mu | M(E_x + i0) \tilde{G}_0(E_x + i0) H_{qr} \tilde{G}_0(E_x - E_q + i0) M(E_x + i0) | x \rangle, (18)$$

где энергия состояния $|\mu\rangle$ резервуара выбрана в качестве точки нулевой энергии. В пределе $q \rightarrow 0$ это уравнение сводится к выражению, которое после усреднения по степеням свободы резервуара принимает вид

$$g_{x} + g_{x} \sum_{\mu} P_{\mu} \langle x; \mu | M(E_{x} + i0) \tilde{G}_{0}^{2}(E_{x} + i0) M(E_{x} + i0) | x; \mu \rangle \equiv g_{x} Z_{1}^{2}$$
(19)

В свою очередь из уравнения (7) следует, что левая часть уравнения (19) может быть записана как

$$g_{x}\left(1-\frac{dC_{x}(z)}{dz}\Big|_{z=E_{x}}\right) = g_{x}Z_{2}^{2}.$$
(20)

Отсюда следует, что $Z_2 = Z_1$. Таким образом, вершину $\Gamma_x(z,q)$ можно представить в виде

$$\Gamma_x(z,q) = g_x Z_1^2 + \Lambda_{ren}(z,q), \qquad (21)$$

где $\Lambda_{ren}(z,q) = \Lambda(z,q) - \Lambda(z,0)$ и



Рис. 1. Зависимость производной собственно-энергетической функции (a) от параметра Хуан-Риса S_{нк}, (б) от температуры T



Рис. 2. Зависимость производной собственно-энергетической функции от температуры, вычисленная по теории возмущений и за ее пределами (кривая 1 и 2, соответственно) при различных параметрах Хуан-Риса: а) S_{нк} = 0.2, б)

 $S_{HR} = 0.6$

$$\Lambda(z,q) = \sum_{\mu} \sum_{q} \frac{\langle x; \mu | M(z) | x; \mu, q_1 \rangle \langle x; \mu | H_{ep} | x; \mu, q_2 \rangle \langle x; \mu, q_1 | M(z) | x; \mu \rangle}{\left(z - E_x - E_{q_1} \right) \left(z - E_x - E_{q_1} - E_q \right)}.$$
 (22)

Это выражение можно переписать как

$$\Lambda(z,q) = \frac{S_{HR}}{\omega_b^2} \int_0^\infty \omega^3(q_1) e^{\left(-\frac{\omega^2(q_1)}{2\omega_b^2}\right)} \times \left(\frac{1+n(q_1)}{(z-E_x-\omega(q_1))(z-E_x-\omega(q_1)-\omega(q))} + \frac{n(q_1)}{(z-E_x+\omega(q_1))(z-E_x+\omega(q_1)+\omega(q))}\right) d\omega(q_1).$$
(23)

С учетом того, что $Z_2 = Z_1$, собственно-энергетическая функция принимает вид

$$C_{x}(z) = \frac{S_{HR}}{\omega_{b}^{2}} \int_{0}^{\infty} \omega^{3}(q) e^{\left(-\frac{\omega^{2}(q)}{2\omega_{b}^{2}}\right)} \times \left\{\frac{1+n(q)}{z-E_{x}-\omega(q)} + \frac{n(q)}{z-E_{x}+\omega(q)}\right\} \times \left[\Lambda_{ren}(z,q)\right]^{2} d\omega(q).$$
(24)

На рисунках 1 и 2 показана зависимость производной собственноэнергетической функции в точке $z = E_x$ от параметра Хуана-Риса [9-11] и температуры с учетом поправки от перенормировки вершинной функции и оператора Грина.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный анализ двух подходов выявил необходимость учета перенормировки взаимодействия квантовой точки с резервуаром акустических фононов за пределами теории возмущений. Зависимость процессов, дающих вклад в собственно-энергетическую функцию экситона, от энергии означает, что здесь проявляются немарковские эффекты, другими словами, нелокальность во времени взаимодействия кубита с резервуаром.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. A.J. Ramsay, A.V. Gopal, E.M. Gauger, A. Nazir, B.W. Lovett, A.M. Fox, M.S. Skolnick, Damping of exciton rabi rotations by acoustic phonons in optically excited InGaAs/GaAs quantum dots. // Phys. Rev. Lett., 2010, v.104, № 1, p. 017402.

2. W. Langbein, P. Borri, U. Woggon, V. Stavarache, D. Reuter, A.D. Wieck, Radiatively limited dephasing in InAs quantum dots. // Phys. Rev. B, 2004, v.70, № 3, p. 033301.

3. L. Besombes, K. Kheng, L. Marsal, H. Mariette, Acoustic phonon broadening mechanism in single quantum dot emission. // Phys. Rev. B, 2001, v.63, № 15, p. 0155307.

4. X. Gu, A.F. Kockum, A. Miranowicz, Y. Liu, F. Nori, Microwave photonics with superconducting quantum circuits. // Phys. Rep., 2017, v.718, p. 1 – 102.

5. S. Haroche, M. Brune, J.M. Raimond, From cavity to circuit quantum electrodynamics. // Nature Phys., 2020, v.16, p. 243-246.

6. R.K. Gainutdinov, Nonlocal interactions and quantum dynamics. // J. Phys. A: Math. Gen., 1999, v.32, № 30, p. 5657.

7. G.D. Mahan, Many-Particle Physics. // Springer Science & Business Media, 2000, p.785.

8. S. Hughes, P. Yao, F. Milde, A. Khorr, D. Dalacu, K. Mnaymneh, V. Sazonova, P.J. Poole, G.C. Aers, J. Lapointe et al, Influence of electron-acoustic phonon scattering on off-resonant cavity feeding within a strongly coupled quantum-dot cavity system. // Phys. Rev. B, 2011, v.83, № 16, p.165313.

9. C. Roy, S. Hughes, Influence of electron--acoustic-phonon scattering on intensity power broadening in a coherently driven quantum-dot – cavity system. // Phys. Rev. X, 2011, v.1, № 2, p.021009.

10. M. Bissiri, G. Baldassarri Höger von Högersthal, A. S. Bhatti, M. Capizzi, A. Frova, P. Frigeri, and S. Franchi, Optical evidence of polaron interaction in InAs/GaAs quantum dots. // Phys. Rev. B, 2000, v.62, № 7, p.4642.

NON-PERTURBATIVE RENORMALIZATION OF THE INTERACTION OF A QUANTUM DOT WITH A PHONON RESERVOIR

R.K. Gainutdinov^{1,2}, L.Y. Nabieva¹, A.I. Garifullin¹, A.A. Mutygullina¹

¹Kazan Federal University (Kremlevskaya str., 18, Kazan, Russia, 420008) ²Academy of Sciences of the Republic of Tatarstan (Bauman str., 20, Kazan, Russia, 420111) e-mail: lilya.nabieva.97@mail.ru

The quantum dynamics of a single quantum dot with a phonon reservoir is investigated using the formalism of generalized quantum dynamics [Gainutdinov R.Kh. 1999 J. Phys. A 32 5657]. The self-energy function is calculated nonperturbatively taking into account the renormalization of the vertex function. It is shown that the nonperturbative renormalization of the vertex function and the Green operator significantly affects the nature of the interaction of the exciton with the phonon reservoir, and the Markov approximation is not used.

Keywords: self-energy function, quantum fluctuations, renormalization, qubit.

ПОВЕРХНОСТЬ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ РЕАКЦИИ МЕТИЛИДИНОВОГО РАДИКАЛА С 1,2-БУТАДИЕНОМ

А.А. Николаев¹, В.Н. Азязов^{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) ³Кафедра химии и биохимии, Международный Институт Флориды, (Майами, Флорида 33199, США) e-mail: nikolayev_tolya57@inbox.ru

Важную роль в формировании полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) играют реакции, в результате которых образуются углеводороды С₅. Одна из таких реакций с участием 1,2-бутадиена и метилидинового радикала была исследована в данной работе. Реакция является важным этапом не только в горении (высокие температуры), что актуально для физики и химии горения и взрыва; она также может протекать в холодных облаках открытого космоса (низкие температуры), что делает ее значимой в астрофизике. Поэтому целью работы является раскрытие механизмов образования пятичленных соединений в реакции 1,2-бутадиена (C_4H_6) с радикалом СН. Для всех состояний системы C_4H_6 + СН найдены оптимальные геометрии, частоты колебаний и значения потенциальных энергий с использованием квантово-механических расчётов.

Ключевые слова: 1,2-бутадиен, метилидиновый радикал, поверхность потенциальной энергии, переходные состояния, промежуточные состояния.

1. ВВЕДЕНИЕ

Целью данной работы является раскрытие механизмов образования пятичленных соединений в реакции 1,2-бутадиена (C_4H_6) с метилидиновым радикалом (CH). К основным задачам относится изучение различных путей реакции C_4H_6 + CH; оптимизация геометрий реагентов, продуктов, промежуточных состояний (интермедиатов) и переходных состояний (барьеров) системы C_4H_6 + CH; нахождение и уточнение относительных энергий для всех найденных изомеров; вычисление статистических коэффициентов ветвления каналов продуктов данной реакции.

Актуальность научной работы заключается в том, что до сих не полностью изучены механизмы образования углеводородов C_5 , принимающих активное участие в образовании ПАУ [1]. Важно отметить, что реагентом в данной задаче является 1,2-бутадиен, один из изомеров 1,3-бутадиена, реакция с которым была уже исследована в работе [2]. Несмотря на то что отличие этих изомеров лишь в положении двойных связей, реакции двух этих соединений с метилидином протекают совершенно по-разному.

2. Программное обеспечение и используемые методы

Геометрии различных видов (реагентов, продуктов, промежуточных и переходных состояний), участвующих в реакции С₄H₆ + CH, были оптимизированы с использованием гибридного метода функционала плотности B3LYP с базисным набором 6-311G** в программе Gaussian09 [3]. Использование данного метода достаточно для получения точных расчетов геометрической структуры молекул (начиная с основных состояний). Для уточнения полученных методом B3LYP энергий был применен метод связанных кластеров CCSD(T)-F12 с базисным набором сс-рVTZ-F12 в программном пакете MOLPRO 2010 [4]. Как показывает исследование в работе [5], при использовании комбинации методов B3LYP/6-311G**//CCSD(T)-F12/сс-рVTZ-F12 получаются результаты, достигающие химической точности, около 4 кДж/моль.

Исходя из полученных данных, была построена поверхность потенциальной энергии (ППЭ), представленная рисунками 1-7. Все энергии промежуточных и переходных состояний C_5H_7 , а также продуктов были рассчитаны относительно энергии реагентов. На всех рисунках единицей измерения энергии является кДж/моль.



Рис. 1. Поверхность потенциальной энергии (первая часть)



Рис. 2. Поверхность потенциальной энергии (вторая часть)



Рис. 3. Поверхность потенциальной энергии (третья часть)



Рис. 4. Поверхность потенциальной энергии (четвертая часть)



Рис. 5. Поверхность потенциальной энергии (пятая часть)



Рис. 6. Поверхность потенциальной энергии (шестая часть)



Рис. 7. Поверхность потенциальной энергии (седьмая часть)

3. Анализ реакции СН + 1,2-бутадиен

Присоединение радикала СН к молекуле C₄H₆ может быть произведено следующим образом (рисунок 8):

1) присоединение к нетерминальному С в C_4H_6 с формированием i46 и i47, которые являются метастабильными, и поэтому быстро переходят в i48-i51;

2) присоединение к первой двойной связи с образованием i48 и i49;

3) присоединение ко второй двойной связи с образованием i50 и i51 (в дальнейшем i50 был исключен из всех рисунков кроме рисунка 4 ввиду его аналогичного поведения с i51 в ходе реакции).

Метилидиновый радикал также может присоединяться к 1,2-бутадиену через внедрение в С-Н связь терминальной СН₂ группы (при этом образуются i15 и i31 на рисунке 5) или СН₃ группы (с образованием i8 на рисунке 5) в C₄H₆, но в исследовании [2] было показано, что основным механизмом реакции 1,3-бутадиена и метилидина является присоединение СН к π электронной плотности молекулы 1,3-бутадиена, поэтому в ходе выполнения данной работы в первую очередь было рассмотрено присоединение метилидина к двум двойным С-С связям 1,2-бутадиена.

На основе теории Райса-Рамспергера-Касселя-Маркуса (РРКМ) в программном пакете Unimol [6], были вычислены коэффициенты ветвления продуктов данной реакции.



Рис. 8. Присоединение метилидина к 1,2-бутадиену

Теория РРКМ предсказывает, что продукт p23 является преобладающим (~91%), и около 9% приходится на все оставшиеся, если начальными интермедиатами являются i48 и i49. Если же начальными интермедиатами являются i50 и i51, то в основном образуются p9 (~35%) и p15 (~37%), и примерно 28% – на все остальные продукты.

Продукты винилацетилен и метиловый радикал (p23) образуются по следующему пути на рисунке 5. В начальных интермедиатах i48 и i49 через энергетические барьеры в 126 и 125 кДж/моль относительно i48 и i49 происходит раскрытие трехчленного кольца, приводящее к промежуточному

состоянию i31. Вследствие отрыва CH₃ группы в i31 через невысокое переходное состояние, всего на 29 кДж/моль выше энергии разделенных продуктов, образуются винилацетилен и метил-радикал с энергией -317 кДж/моль относительно энергии реагентов.

Для р9 (метил-замещенного винилацетилена и атомарного водорода) и его конформера p15 ход реакции представлен на рисунке 6. Раскрытие трехчленного кольца в структуре i51, в результате преодоления барьера в 66 кДж/моль, приводит к ациклическому пятичленному соединению i14, и при отрыве (барьер на 6 кДж/моль выше энергии продуктов) атомарного водорода от терминальной CH₂ группы в i14 формируется продукт p9 с энергией -282 кДж/моль. Для образования p15 нужен дополнительный шаг в виде вращения (252 кДж/моль) группы CH-CH₃ в i14, приводящий к i60; и последующий отрыв водорода от терминальной CH₂ группы в i60 дает продукт p15 с энергией -280 кДж/моль относительно энергии реагентов.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе выполнения данной работы были исследованы различные пути реакции 1,2-бутадиена с метилидиновым радикалом, определены относительные энергии реагентов, продуктов, переходных и промежуточных состояний данной реакции. Построена поверхность потенциальной энергии системы C_4H_6 + CH. Были определены статистические выходы продуктов в процентном соотношении, константы скоростей реакции.

Научно-исследовательская работа в Самарском университете выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках гранта № 14.У26.31.0020.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Frenklach M., Reaction Mechanism of Soot Formation in Flames. // PCCP, 2002, № 4, p. 2028-2037.
- C. He, L. Zhao, S. Doddipatla, A.M. Thomas, A.A. Nikolayev, G.R. Galimova, V.N. Azyazov, A.M. Mebel, R.I. Kaiser, Gas-Phase Synthesis of 3-Vinylcyclopropenevia the Crossed Beam Reaction of the Methylidyne Radical (CH; X²Π) with 1,3-Butadiene (CH₂CHCHCH₂; X¹A_g). // ChemPhysChem, 2020, v. 21, p. 1-16.
- M.J. Frisch [et. al], Gaussian 09, revision B.01 // Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2010.

- 4. Werner H.-J., Knowles P.J., Knizia G., Manby F.R., Schütz M., MOLPRO, version 2010.1, a package of ab initio programs // URL: http://www.molpro.net., 2015.
- 5. Zhang J., Valeev E.F., Prediction of Reaction Barriers and Thermochemical Properties with Explicitly Correlated Coupled-Cluster Methods: A Basis Set Assessment. // J. Chem. Theory Comput., 2012, v. 8, p. 3175-3186.
- 6. He C., Zhao L., Thomas A.M., Morozov A.N., Mebel A.M., Kaiser R.I., Elucidating the Chemical Dynamics of the Elementary Reactions of the 1-Propynyl Radical (CH₃CC; X²A₁) with Methylacetylene (H₃CCCH; X¹A₁) and Allene (H₂CCCH₂; X¹A₁). // J. Phys. Chem., 2019, v. 123, p. 5446-5462.

THE POTENTIAL ENERGY SURFACE FOR THE REACTION BETWEEN THE METHYLIDYNE RADICAL AND THE 1,2-BUTADIENE MOLECULE

<u>A.A. Nikolayev¹</u>, V.N. Azyazov^{1,2}, A.M. Mebel^{1,3}

¹Samara National Research University, (Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086) ²Lebedev Physical Institute, Samara Branch (Novo-Sadovaya str., 221, Samara, Russia, 443011) ³Department of Chemistry and Biochemistry, International Florida Institute, (Miami, Florida 33199, USA) e-mail: nikolayev_tolya57@inbox.ru

Reactions, in which C_5 hydrocarbons are formed, play an important role in the formation of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs). One of the reactions involving 1,2-butadiene and the methylidyne radical was investigated in this work. The reaction is an important stage not only in combustion (high temperatures), which is important for combustion physics and chemistry; it can also occur in cold clouds of outer space (low temperatures), which makes it significant in astrophysics. Therefore, the aim of this work is to reveal the mechanisms of formation of five-membered compounds in the reaction of 1,2-butadiene (C₄H₆) with the CH radical. The optimal geometries, vibration frequencies, and potential energies were found using quantum mechanics calculations for all states of the C₄H₆ + CH system.

Keywords: 1,2-butadiene, methylidyne radical, potential energy surface, transition states, intermediate states.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ДИАГНОСТИКИ КОНЕЧНЫХ ПРОДУКТОВ ГЛИКИРОВАНИЯ ПО СКЛЕРЕ ГЛАЗА

<u>Г.А. Плешаков¹</u>, В.Н. Гришанов¹, И.В. Малов², Х. Хаммари²

¹Самарский национальный исследовательский университет (443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34) ²Самарский государственный медицинский университет (443099, г. Самара, ул. Чапаевская, 89) e-mail: pleshakovga@mail.ru

Оценка содержания конечных продуктов гликирования в организме проводится с кожи руки, однако эта диагностика применима не ко всем фототипам кожи. Поскольку склера глаза также состоит из коллагеновых волокон, подверженных гликированию, то вызывает интерес установление корреляции между флуоресценцией кожи руки и склеры. Для проверки диагностического потенциала поверхностных тканей глаза использовалась щелевая лампа ЩЛ-2Б, которая была модернизирована для проведения на ней флуоресцентных исследований. В экспериментах производилась регистрация изображений в белом свете и при фиолетовом возбуждении флуоресценции склеры глаза человека. Параллельно измерялась флуоресценция кожи пациента. В данной работе представлены алгоритмы обработки изображений параметризации, a также продемонстрирована корреляция И ИХ интенсивностей флуоресценции кожи и склеры.

Ключевые слова: флуоресценция, щелевая лампа, лазерный диод, ткани глаза, конечные продукты гликирования.

1. ВВЕДЕНИЕ

Интенсивность вынужденной эндогенной флуоресценции кожи аутофлуоресценции $(A\Phi)$ - in vivo возбуждении при В ближнем ультрафиолетовом или фиолетовом диапазоне спектра является маркером повышенной концентрации конечных продуктов гликирования (КПГ) в ней. Доказан высокий диагностический потенциал измерения интенсивности АФ кожи в эндокринологии, кардиологии и нефрологии. Подобные измерения перспективны в дерматологии для определения биологического возраста кожи [1] и оценки активности биоокисления в тканях [2]. Было показано [3], что повышенное содержание КПГ в коже позволяет дифференцировать катаракту и возрастную макулярную дегенерацию сетчатки глаза. Однако, имеющиеся в

настоящее время модели оценки риска, основанные на АФ кожи, были установлены для преимущественно европейского и азиатского населения и не могут быть правильно применены к неевропейским этническим группам и практически неприменимы к пациентам с V-VI фототипами кожи по шкале Фицпатрика [4]. Улучшение точности моделей требует подробных характеристик различий по этническому признаку и гендерным факторам.

Склера глаза также состоит из коллагеновых волокон, подверженных гликированию [5], и доступна для флуоресцентной диагностики *in vivo*, причём снимаются ограничения по фототипу кожи. Поэтому вызывает интерес установление корреляции между интенсивностями флуоресценции кожи и склеры, что позволит использовать склеру в качестве диагностического объекта при оценке содержания КПГ в организме.

Измерения АФ кожи с целью диагностики содержания КПГ И последующих оценок рисков проводят на приборах семейства AGE Reader либо оригинальных флуориметрах схожего назначения. Интенсивность АФ измеряется с участка кожи внутренней стороны предплечья руки. Рука накладывается на специальное ложе прибора, в котором имеется оптическое окно. Через окно производится возбуждение АФ и транспорт флуоресцентного и упруго рассеянного кожей излучения к фотоприёмному устройству. При контакте руки с прибором имеет место компрессия биотканей [6], что может дестабилизирующий рассматриваться как фактор, увеличивающий неопределённость результатов измерений. Измерение интенсивности АФ склеры может быт произведено бесконтактно с применением щелевой лампы, что полностью устраняет компрессию.

2. ОБЪЕКТЫ И МЕТОДЫ

2.1. Щелевая лампы ЩЛ-2Б

Измерения АФ склеры проводились на щелевой лампе ЩЛ-2Б [7]. Щелевая лампа была дополнена источником возбуждения флуоресценции и устройством объективной регистрации АФ. Источником возбуждения флуоресценции служил фиолетовый лазерный диод SLD3134VF с длиной волны 405 нм, вмонтированный в стандартный коллиматор. Лазерный модуль SLD3134VF крепится в универсальном держателе точной регулировки по двум осям 50M37-20 фирмы Standa, который, в свою очередь, фиксируется на стандартном осветителе щелевой лампы. Принятое техническое решение позволило легко совмещать поля освещения стандартным осветителем и лазером.

При работе лучи света от осветителя и лазерного модуля падают на поверхность глаза. Лучи, рассеянные тканями глаза, через полиимидную плёнку, являющейся светофильтром, отрезающим фиолетовое излучение, попадают в объектив бинокулярного микроскопа. В бинокулярном микроскопе часть излучения направляется на окуляры наблюдателю (врачу), а часть в канал для фотографирования на камеру.

2.2. Процесс обработки

Исходным экспериментальным материалом являются два цветных кадра изображения участка склеры, один из которых получен при фиолетовом освещении, а другой – при освещении белым светом. Сами изображения дают качественную информацию о диагностируемом участке и документальное подтверждение правильности его выбора, но для количественных сравнений КПГ, накопленных в биоткани необходимо иметь один или несколько числовых параметров, характеризующих изображения.

Для параметризации полученных цветных изображений использовалась система Mathcad. Поскольку флуоресцирующая область занимает малую долю кадра, то первой процедурой обработки являлось выделение информационного его фрагмента с использованием стандартной функции Mathcad «submatrix». Выделенный фрагмент разбивался на цветовые R (красная), G (зелёная), В (синяя) компоненты. Ведущей была зелёная (G) изображения, флуоресцентного поскольку компонента спектральная чувствительность зелёного канала фоточувствительных матриц во многом перекрывает спектр флуоресценции КПГ при возбуждении на длине волны 405 нм и интенсивность зелёной компоненты превалировала над красной и синей. С целью исключения шумовых пикселей проводилась пороговая обработка фрагмента с порогом, привязанным к максимальному значению пикселя. Поскольку от испытуемого к испытуемому и от эксперимента к эксперименту *in vivo* информационный фрагмент менял свою площадь и форму, то рассчитывалось количество ненулевых элементов субматрицы, по которому и производилось усреднение, частности, при расчёте среднего В арифметического значения (САЗ) пикселя. Обычно фрагмент имел форму квадрата со стороной в 2 – 3 раза превосходящей визуальный диаметр лазерного пучка на склере и состоял из 101×101 пк.

Из рассчитанных САЗ пикселей цветовых компонент фрагментов и формировались параметры, коррелирующие с содержанием КПГ в склере. Основная идея формирования диагностического параметра как для

флуориметров, не строящих изображений, так и использующих в качестве первичного экспериментального материала изображения, состоит в нормировке сигнала флуоресценции диагностируемого компонента на оптические свойства биоткани, влияющие на выход флуоресцентного излучения из биоткани и его попадания в поле зрения фотоприёмника.

Представительным параметром оказалось отношение САЗ пикселя зелёного компонента флуоресцентного изображения к САЗ пикселя зелёного компонента изображения в белом свете.

2.3. Результаты экспериментов

Для установления взаимосвязи флуоресценции кожи и склеры глаза были проведены измерения, в которых приняли участие 34 практически здоровых человека, сгруппированные в возрастные группы: 16-25; 26-35; 36-45; 46-55; 56-65; 66-75; 76-85 лет. Измерения проводились на каждом из испытуемых на «ручном» флуориметре [8] и модернизированной щелевой лампе во временном интервале, не превышающем 1 часа. В качестве диагностического параметра для кожи использовалось отношение интенсивности флуоресцентного излучения кожи к упруго рассеянному ею фиолетовому излучению К1. Для склеры глаза использовалось отношение среднего арифметического (CA3) зелёного значения пикселя компонента флуоресцентного изображения к САЗ значению пикселя зелёного компонента изображения в белом свете К2. Внутри каждой возрастной группы усреднялись отношения К1 и К2 и возраст. Полученная зависимость представлена на рис. 1.



Рис.1. Зависимость коэффициентов флуоресценции кожи и склеры глаза от возраста

Результаты экспериментов продемонстрировали рост отношения интенсивности флуоресценции к интенсивности упругого рассеяния с возрастом, аналогичный многочисленным результатам по коже. Рассчитанное значение коэффициента корреляции Пирсона между диагностическими параметрами для глаза и кожи составило 0,89, что указывает на их сильную статистическую связь.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработано программное обеспечение для обработки флуоресцентных изображений, характерной особенностью которого является получение информации об интенсивности флуоресценции переменных по размерам полей.

Установлена сильная корреляция диагностических параметров – нормированных отношений для кожи К1 и склеры глаза К2, что открывает перспективы флуоресцентной оценки содержания AGE по склере.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Papayan G. V., Petrishchev N. N., Krylova E. V. et al. «Method of estimating the biological age of skin by means of a fluorescence multispectral video dermatoscope», Journal of Optical Technology 77(2), 60 67 (2010).
- Blyumin R.B., Naumova E.M., Khadartsev A.A. «The Technologies of Non-Contact Diagnostics», Journal of New Medical Technologies 15(4), 146 – 149 (2008).
- Лебедев, П.А. Флуоресцентный метод определения содержания конечных продуктов гликирования в коже у пациентов с возрастной макулярной дегенерацией и катарактой / П.А. Лебедев [и др.]. // Практическая медицина. – 2018. – №3 (114) – С. 110-113.
- Ahmad MS, Kimhofer T, Ahmad S, AlAma MN, Mosli HH, Hindawi SI, et al. (2017) Ethnicity and skin autofluorescence-based risk-engines for cardiovascular disease and diabetes mellitus. PLoS ONE 12(9): e0185175. https://doi.org/10.1371/journal.pone.0185175
- Бикбов М.М., Суркова В.К., Усубов Э.Л., Астрелин М.Н. Кросслинкинг склеры с рибофлавином и ультрафиолетом А (UVA). Обзор литературы. Офтальмология. 2015;12(4):4-8. https://doi.org/10.18008/1816-5095-2015-4-4-8
- 6. Nakhaeva I.A., Zyuryukina O.A., Mohammed M.R., Sinichkin Y.P. The effect of external mechanical compression on in vivo water content in human skin. Optics and Spectroscopy. 2015. T. 118. № 5. C. 834-840.
- 7. Плешаков, Г.А. Щелевая лампа для исследования флуоресценции поверхностных тканей глаза / Г.А. Плешаков, В.Н. Гришанов // XVII Всероссийский молодежный Самарский конкурс-конференция научных работ по оптике и лазерной физике: сборник трудов конференции, (Самара, 12–16 ноября 2019 г.). – Москва: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук, 2019. – 512 с.
- Kornilin D.V., Grishanov V.N., Zakharov V.P., Burkov D.S. Portable fluorescence meter with reference backscattering channel [Electronic resource] // Proc. SPIE 9961. 2016. - 8 p.; doi:10.1117/12.2237135

A STUDY OF THE DIAGNOSTIC POSSIBILITIES OF ADVANCED GLYCATION ENDPRODUCTS ON THE EYE SCLERA

<u>G.A. Pleshakov</u>¹, V.N. Grishanov¹, I.V. Malov², H. Khammari²

¹Samara National Research University, (Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086) ²Samara State Medical University (Chapaevskaya, 89, Samara, Russia, 443099) e-mail: pleshakovga@mail.ru

Assessment of the content of end products of glycation in the body is carried out from the skin of the hand, but this diagnosis is not applicable to all skin phototypes. The sclera of the eye also consists of collagen fibers that are subject to glycation, so it is interesting to establish a correlation between the fluorescence of the skin of the hand and the sclera. To check the diagnostic potential of the surface tissues of the eye, a slit lamp SL-2B was used, which was upgraded for fluorescent studies. In experiments, images were recorded in white light and violet excitation of the human eye sclera fluorescence. In parallel, the patient's skin fluorescence was measured. This paper presents algorithms for image processing and parameterization, and demonstrates the correlation of skin and sclera fluorescence intensities.

Keywords: fluorescence, slit lamp, laser diode, eye tissues, advanced glycation endproducts.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РЕЛАКСАЦИИ СТРУКТУРЫ БЕЛКОВОГО РАСТВОРА ПОСЛЕ ЛАЗЕРНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

К.В. Рогова, Е.Р. Герок, А.В. Неупокоева

¹Иркутский государственный медицинский университет, кафедра медицинской и биологической физики (664009, г. Иркутск, ул. Красного Восстания, 1) e-mail: annett_2005@inbox.ru

В результате лазерного воздействия структура белковых макромолекул в водном растворе обратимо изменяется. Статья посвящена изучению процессов релаксации, т.е. устойчивости фотоиндуцированных изменений и скорости воздействия. возвращения структуры К состоянию до лазерного Экспериментально показано, ЧТО структурные изменения, вызванные лазерным излучением, сохраняются в течение как минимум 12 часов, а затем структура белкового раствора постепенно возвращается к необлучённому состоянию.

Ключевые слова: лазерное излучение, фотомодификация, белковые макромолекулы, время релаксации структуры

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время в медицине активно применяются лазерные технологии [1-3]. При этом лазерная терапия оказывается эффективна для широко перечня заболеваний, что предполагает наличие некоторого универсального механизма взаимодействия излучения с биологическими объектами. В ряде работ предполагается, что лазерное излучение воздействует на белковые молекулы, вызывая перестройку их структуры [4-6]. В водной среде белковые макромолекулы могут объединяться В кластеры надмолекулярные структуры, удерживаемые водородными связями. В образования результате крупных кластеров снижается реакционная способность белков, так как реагировать с рецепторами могут только находящиеся на поверхности кластера [7]. Под действием молекулы, дестабилизация лазерного излучения происходит надмолекулярных комплексов и их распад на более мелкие образования [5,6]. Однако открытым остается вопрос 0 степени устойчивости структурных изменений. Предполагается, что через некоторое время белки частично восстанавливают надмолекулярные структуры – происходит процесс релаксации. Изучение

временных характеристик этого процесса позволило бы оптимизировать кратность лазерных процедур при лечении пациентов. Поэтому цель нашей работы –исследовать время релаксации структурных изменений белковых макромолекул после прекращения лазерного воздействия.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

2.1. Материалы и методы

Объектом исследования являлся раствор "Гриппферон". Он имеет в своем составе интерферон альфа-2b – высокоочищенный рекомбинантный белок, оказывающий противовирусное действие, обусловленное взаимодействием с рецепторами мембран и индукцией синтеза РНК вируса, что мешает его нормальной репродукции и высвобождению. На данный момент "Гриппферон" применяют в терапии и профилактике гриппа и острых респираторных вирусных инфекций, в том числе коронавирусной инфекции [3,8].

Раствор "Гриппферон" в кюветах подвергался воздействию лазерного излучения длиной волны 650 нм (мощность 5 мВт, время воздействия 15 минут, суммарная энергия 4,5 Дж) и 530 нм (мощность 15 мВт, время воздействия 10 и 15 минут, суммарная энергия 9 Дж и 13,5 Дж соответственно). Необлученный (контрольный) образец и облученные растворы и поливались на стеклянные подложки, которыми послужили лабораторные предметные стекла, а кюветы помещались в термостат (при температуре 37°С, для моделирования физиологических условий). Далее содержимое снова поливалось на подложки в соответствующих временных точках, после чего всё выдерживалось при комнатной температуре для получения кристаллограмм [9]. Затем кристаллограммы фотографировали с помощью светового микроскопа. Снимки делались для кристаллограмм, полученных во временных точках 0ч (сразу после окончания воздействия), 12ч, 24ч, и 36ч. Изменение структуры белка в растворе определяли путем подсчёта количества сегментов, расположенных в кристаллограмме вдоль диаметра поля зрения микроскопа и таким образом оценивали средний размер одного сегмента.

2.2. Экспериментальные данные

Контрольный образец имеет 55 сегментов или средний размер сегмента около 18 мкм (рис. 1).



Рис.1. Микроскопический снимок кристаллограммы контрольного образца (до воздействия лазерным излучением)

Микрофотографии образцов, облученных 15 минут лазерным излучением с длиной волны 530 нм представлены на рис 2.



Рис. 2. Микрофотографии кристаллограмм при воздействии зеленым лазерным (λ=530 нм) излучением в течение 15 минут

В данной работе было сделано по 4 серии образцов на каждый из трёх типов воздействия. Ошибка измерений не превышала 20% для всех временных точек, кроме точки 36 часов, для которой достигала 35%. Динамика среднего размера сегмента кристаллограммы представлена на рис. 3.

Анализируя результаты, можно увидеть, что непосредственно после лазерного воздействия размер сегментов в образцах в сравнении с контрольным уменьшается в 1,4-1,8 раза, что подтверждается увеличением их количества в диаметре поля зрения. А при возрастании длительности нахождения раствора в термостате характерный размер сегмента увеличивается, их размер постепенно возвращается к первоначальному значению и достигает его к 24 часам. Далее, через 36ч после лазерного

воздействия размер сегмента становится больше контрольного, но при этом возрастает и ошибка измерений (разброс значений в разных сериях образцов).



Рис. 3.

На основании экспериментальных данных следует предположить, что непосредственно после лазерного воздействия крупные кластеры распадаются на более мелкие образования и стабилизируются водородными связями внутри макромолекулы и гидратной оболочкой снаружи. С течением времени, в результате теплового движения гидратная оболочка частично дестабилизируется и заряженные части разных макромолекул начинают взаимодействовать между собой, образуя надмолекулярные структуры. Через 24 часа после лазерного воздействия большая часть кластеров восстанавливает свои размеры, а сравнительно высокая температура (37°С) приводит к дальнейшему росту характерного размера кластера.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экспериментально показано, что изменения, вызванные воздействием на белковый раствор лазерного излучения, сохраняются в течение как минимум 12 часов. Через 24 часа система приходит в первоначальное состояние, но структурные изменения, вероятно вызванные тепловым движением, продолжаются, что приводит к нарастанию размера кластера в растворе. Из этого следует, что для повышения эффективности препарата «Гриппферон»,

необходимо облучать его не реже 1 раза в сутки, а облученный препарат хранить при пониженной температуре, чтобы замедлить релаксацию структуры к первоначальному состоянию. Кроме того, если аналогичная картина возникает при воздействии лазерного излучения на белки плазмы крови, при внутрисосудистом лазерном облучении крови эффективнее всего было бы делать процедуру также не реже 1 раза в сутки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Абдрахманова А.И., Амиров Н.Б. Место лазерной терапиив лечении ишемической болезни сердца Вестник современной клинической медицины. 2019. Т. 12. № 6. С. 77-82.
- 2. Москвин С.В., Хадарцев А.А. Методы эффективной лазерной терапии при лечении больных бронхиальной астмой (обзор литературы). Вестник новых медицинских технологий. Электронное издание. 2019. № 5. С. 117-148.
- 3. Москвин С.В., Асхадулин Е.В., Кондратьева М.С. Опыт применения лазерной терапии в реабилитации больных covid-19 Вестник новых медицинских технологий. Электронное издание. 2020. № 4. С. 60-63.
- 4. Залесская Г.А., Самбор Е.Г. Взаимодействие низкоинтенсивного лазерного излучения с кровью и ее компонентами. Журнал прикладной спектроскопии. 2005. Т. 72. № 2. С. 230-235.
- Malov A.N., Seteikin A.Yu., Neupokoeva A.V., Musatova E.S., Golub I.E., Sorokina L.V., Fetschenko V.S., Vaichas A.A. The laser radiation action on the biological objects // Optik, 2013, 124, p. 6034-6041.
- 6. Герок Е.Р., Макарьевская В.П., Неупокоева А.В., Небогин С.А. Анализ фотомодификации белковых растворов при воздействии различными длинами волн. В сборнике: XVI Всероссийский молодежный Самарский конкурс-конференция научных работ по оптике и лазерной физике. Сборник трудов конференции. 2018. С. 277-282.
- 7. Лахно В.Д. Кластеры в физике, химии, биологии. Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2001. 256 с
- 8. https://pcr.news/novosti/opyt-primeneniya-interferona-alfa-2b-pri-covid-19na-kube/
- Андюшкин, А. И. Кристаллография биологических жидкостей (обзор литературы) / А. И. Андюшкин, С. П. Сапожников, А. В. Карпунина // Вестн. ЧГУ. – 2013. – № 3. – С. 355–359.

INVESTIGATION OF THE PROTEIN SOLUTION STRUCTURE RELAXATION PROCESSES AFTER LASER EXPOSURE

K.V. Rogova, E.R. Gerok, A.V. Neupokoeva

Irkutsk State Medical University, Department of Medical and Biological Physics (664003, g. Irkutsk, Krasnogo Vosstaniya St, 1) e-mail: annett_2005@inbox.ru

Under laser irradiation action the structure of protein macromolecules in an aqueous solution reversibly changes. The article is devoted to the study of relaxation processes, i.e. the stability of photoinduced changes and the rate of structure returning to the state before laser exposure. It has been experimentally shown that structural changes caused by laser radiation persist for at least 12 hours, and then the structure of the protein solution gradually returns to the non-irradiated state.

Keywords: laser radiation, photomodification, protein macromolecules, structure relaxation time

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ИМПУЛЬСНОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА СТРУКТУРУ МОЛЕКУЛЫ БЕНЗИЛПЕНИЦИЛЛИНА НАТРИЕВОЙ СОЛИ МЕТОДОМ ФУРЬЕ-СПЕКТРОСКОПИИ

<u>Н.А. Роденко</u>, В.А. Жукова, Т.И. Васильева, В.С. Блинов

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

1 АННОТАЦИЯ

В работе изучались Фурье-спектры обработанных и не обработанных образцов бензилпенициллина натриевой соли после воздействия на них полем. Воздействие осуществлялось импульсным магнитным на одновитковом индукторе с частотой f=40кГц, числом импульсов n=1, при напряженностях магнитного поля H= 0,09 10⁶ A/м, H=0,50 10⁶ A/м, H= 0,82 10⁶ А/м. Ранее было отмечено авторами, что в условиях импульсного магнитного поля порошок бензилпенициллина натриевой соли показывает увеличение антибактериальной активности на 12-24%. Можно предположить, что если под воздействием магнитного поля изменяется конфигурация молекулы, то это должно прежде всего отразиться на изменении положения и интенсивности полос. Было отмечено, что в низкочастотной области спектра имеются различия в зависимости от интенсивности магнитного поля. Кроме того, наблюдалось перераспределение интенсивности между основной полосой и высокочастотным плечом.

Ключевые слова: импульсное магнитное поле, антибактериальная активность, бензилпенициллина натриевая соль, Фурье-спектроскопия.

Список используемых сокращений: ИМП – импульсное магнитное поле.

1 ВВЕДЕНИЕ

Актуальность данной темы обусловлена тем, что антибиотики относятся к наиболее часто используемым препаратам для лечения инфекционных заболеваний человека и животных и в большинстве развитых стран занимают ведущее место по объему производства и потребления среди всех других групп лекарственных веществ. Наибольшее количество препаратов насчитывает группа бета-лактамных антибиотиков.

С появлением новых антибактериальных препаратов удалось значительно повысить результативность терапии многих инфекционных заболеваний и существенно снизить летальность. Однако, несмотря на очевидный прогресс в лечении больных с бактериальными инфекциями, обусловленный как обширной номенклатурой антимикробных лекарственных средств, так и разработкой методов их рационального использования, проблема лечения многих инфекций и в настоящее время является актуальной.

Один из наиболее существенных факторов, оказывающих влияние на организм пациента, является высокая дозировка антибиотиков, которые прописываются пациентам.

Можно выделить следующие побочные эффекты, при принятии высоких доз антибиотиков: нарушение функции печени, тревожность, бессонница, кожные реакции, затрудненное дыхание, дисбактериоз и др.

Решением проблемы будет являться способ по облучению импульсным магнитным полем (ИМП) антибиотиков для повышения их биологической активности.

Предложенный способ обработки антибиотиков ИМП для увеличения биологической активности применяется впервые. Данный способ обработки позволит снизить дозы антибиотиков и увеличить продолжительность жизни пациентов.

Таким образом, было зафиксировано [1,2] увеличение антибактериальной активности бензилпенициллина натриевой соли на 12-24% после воздействия на нее импульсным магнитным полем. Аналогичные результаты были получены в экспериментах с пентоксифиллином, при воздействии ИМП на пентоксифиллин отметили увеличение антиагрегационной активности [3]. Основной механизм изменения биологической активности может быть связан с изменением конфигурации молекулы антибиотика. Поэтому была поставлена задача – исследовать Фурье-спектры бензилпенициллина натриевой соли до и после облучения импульсным магнитным полем.

Большой интерес к колебательным спектрам Фурье-поглощения заключается в возможности получать качественную информацию о химическом составе, а также о строении, конфигурации и конформации, т.е. позволяет изучать фундаментальные характеристики ближнего порядка.

Фурье-спектр представляет собой сложную кривую с большим числом максимумов и минимумов. Полосы поглощения появляются в результате переходов между колебательными уровнями основного электронного состояния изучаемой системы. Спектральные характеристики (положения

максимумов полос, их полуширина, интенсивность) индивидуальной молекулы зависят от масс составляющих ее атомов, строения, особенностей межатомных сил, распределения заряда и др. В целом Фурье-спектры характеризуют энергетическое состояние молекул, касающееся, в первую очередь, колебательных и вращательных движений ядер атомов и молекул.

Например, методом ИК-спектроскопии удалось изучить структуру пенициллина. При применении инфракрасной спектроскопии можно выявить очень тонкие нарушения структуры белков и других составных частей крови и тканей человека, это поможет ученым в исследовании патогенеза различных заболеваний [4].

2 МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Как уже отмечалось, под воздействием импульсного магнитного поля повышается антибактериальная активность бензпенициллина натриевой соли. Для объяснения воздействия импульсного магнитного поля на лекарственный препарат авторы предположили, что происходит незначительное изменение конформации молекулы.

Исходя из строения молекулы антибиотика, можно предположить, что если под воздействием магнитного поля изменяется конфигурация молекулы, то это должно прежде всего отразиться на изменении положения и интенсивности полос валентных колебаний N-H, C=O, деформационных колебаний групп CH, CH₂, CH₃, а также проявиться в полосах, принадлежащих колебаниям циклов. Эти изменения обязательно должны проявиться в колебательных спектрах молекул.

Параметры воздействия. Исследование бензилпенициллина натриевой соли проводили при следующих параметрах ИМП (табл. 1) с частотой f=40 кГц (одновитковый индуктор) с временем силового нагружения на обрабатываемый препарат – микросекунды (число импульсов n=1) [5,6].

Таблица	1.	Параметры	воздействия	ИМП	на	бензилпенициллина	натриевую
соль							

W, кДж	0,45	2,49	4,11
U, кВ	3,0	7,0	9,0
Н (одновитковый индуктор), А/м 10 ⁶	0,09	0,50	0,82
<i>f</i> кГц		40	
n		1	

Контрольные образцы лекарственного препарата не подвергались воздействию ИМП. Для регистрации спектров порошок бензпенициллина тщательно растирался в агатовой ступке с КВг. Порошкообразный антибиотик взвешивали по 0,015 г. с КВг –1,5 г. Исследуемая смесь порошка, помещалась в прессформу и разравнивалась с помощью шпателя для обеспечения равномерности распределения вещества в объеме. В работе исследовались спектры диффузного рассеяния.

Спектры регистрировались с помощью Фурье-спектрофотометра ФСМ-2201 в интервале волновых чисел от 400 до 4000 см⁻¹.

3 РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Были зарегистрированы Фурье-спектры порошков бензилпенициллина натриевой соли до и после воздействия магнитного поля различной интенсивности с напряженностями $H=0,09\ 10^6\ A/m$, $H=0,50\ 10^6\ A/m$, $H=0,82\ 10^6\ A/m$. Спектры регистрировались в интервале волновых чисел от 400 до 4000 см⁻¹. На рисунке 1 приведены соответствующие спектры.



Рис. 1. Фурье-спектры порошков бензилпенициллина натриевой соли при воздействии магнитного поля: красный – контрольный образец; зеленый – $H=0,09\ 10^6\ A/m;$ синий – $H=0,50\ 10^6\ A/m;$ розовый – 0,82 $10^6\ A/m$

Полоса 3357 см⁻¹ принадлежит валентным колебаниям группы N-H. Во всех случаях, кроме напряженности H=0,50 10^6 А/м интенсивности полос совпадают. Такой же вывод можно сделать о колебаниях CH, CH₂, CH₃ в области от 2800 до 3100 см⁻¹.

На рисунке 1 в области C=O валентных колебаний наблюдаются четыре полосы 1419 см⁻¹, 1620 см⁻¹, 1699 см⁻¹ (колебания группы C=O в амидной группе) и 1776 см⁻¹(колебания C=O группы в четырехчленной β-лактамной группе). Положение и интенсивность этих полос не зависит от наличия или отсутствия воздействия магнитного поля.



Рис. 2. Структурная формула бензилпенициллина натриевой соли с обозначением интенсивностей

Однако, в низкочастотной области спектра имеются различия в зависимости от интенсивности магнитного поля (рисунок 3). Так интенсивность полос 470, 514, 539, 600 и 649 см⁻¹ при переходе от контрольного образца к образцам, подвергшимся воздействию ИМП в H=0,50 10^6 A/м, H= 0,82 10^6 A/м уменьшается, однако, при самом слабом воздействии ИМП интенсивности полос возрастают по сравнению с контрольным образцом. Наблюдается перераспределение интенсивности между основной полосой и высокочастотным плечом. Эти изменения требует более тщательного исследования.



Рис. 3. Фурье-спектры в низкочастотной области порошков бензилпенициллина натриевой соли при воздействии магнитного поля: красный – контрольный образец; зеленый – H= 0,09 10⁶ А/м; синий – H=0,50 10⁶ А/м; розовый – H= 0,82 10⁶ А/м

4 ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Обработка ИМП порошка бензилпенициллина натриевой соли приводит к уменьшению интенсивности в низкочастотной области спектра при переходе от контрольного образца к образцам, подвергшимся воздействию ИМП с H=0,50 10⁶ А/м и H=0,82 10⁶ А/м, однако, при самом слабом воздействии ИМП с H=0,09 10⁶ А/м интенсивности полос возрастают по сравнению с контрольным образцом.

2. Было зафиксировано перераспределение интенсивности между основной полосой и высокочастотным плечом в низкочастотной области спектра. Природа наблюдаемых спектральных изменений должна еще уточняться.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. В.А. Глущенков, Т.И. Васильева, П.П. Пурыгин, И.А. Беляева, Н.А. Роденко, А.К. Мадьярова, Р.Ю. Юсупов, Изменение антибактериальной активности бензилпенициллина под воздействием импульсного магнитного поля высокой напряженности. // Биофизика, 2019, т.64. № 2, с. 296-306.

2. Н.А. Роденко, Т.И. Васильева, А.В. Самородов, И.А. Беляева, В.А. Глущенков, Исследование безопасности применения бензилпенициллина натриевой соли после воздействия на нее импульсным магнитным полем. // Бутлеровские сообщения, 2019, т. 58, № 6, с. 123-129.

3. Н.А. Роденко, Т.И. Васильева, И.А. Беляева, В.А. Глущенков, П.П. Пурыгин, А.В. Самородов, Л.И. Баширова, Изменение активности различных антиагрегантов тромбоцитов при их облучении импульсным магнитным полем высокой напряженности. // Бутлеровские сообщения, 2019, т. 59. № 9, с. 117-124.

4. А.С. Гордецов, Инфракрасная спектроскопия биологических жидкостей и тканей. // Современные технологии в медицине, 2010, №1. с. 84-97.

5. В.А. Глущенков, В.Ф. Карпухин, Технология магнитно-импульсной обработки материалов. // Самара: Федоров, 2014, 208 с.

6. Р.Ю. Юсупов, В.А. Глущенков, Энергетические установки для магнитно-импульсной обработки материалов. // Самара: Федоров, 2013, 123 с.

STUDY OF THE EFFECT OF A PULSED MAGNETIC FIELD ON THE STRUCTURE OF A BENZYLPENICILLIN SODIUM SALT MOLECULE BY FOURIER SPECTROSCOPY

N.A. Rodenko, V.A Zhukova, T.I. Vasilyeva, V. S. Blinov

Samara National Research University, (Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086) e-mail: t.rodenko@mail.ru

Fourier spectra of irradiated and non-irradiated samples of benzilpenicillin sodium salt after exposure to a pulsed magnetic field were studied. The influence was carried out on a single-screw inductor with frequency f=40 kHz, number of pulses n=1, at magnetic field voltages H= 0,09 10^6 A/m, H=0,50 10^6 A/m, H= 0,82 10^6 A/m. Previously, it was noted by the authors that under pulsed magnetic field conditions, sodium benzilpenicillin powder shows an increase in antibacterial activity by 12-24%. It can be assumed that if the configuration of the molecule changes under the influence of magnetic field, it should first of all affect the change in the position and intensity of the strips. It was noted that in the low-frequency region of the spectrum there are differences depending on the intensity of the magnetic field. In addition, a redistribution of intensity between the main band and the high-frequency shoulder was observed.

Keywords: pulsed magnetic field, antiaggregating activity, benzilpenicillin sodium salt, Fourier spectroscopy.

List of abbreviations used: PMF - pulsed magnetic field

ФОКУСИРОВКА ИМПУЛЬСНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ЛИНЕЙНО-ПОЛЯРИЗОВАННЫХ ГАУССОВЫХ ПУЧКОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РЕФРАКЦИОННЫХ МИКРОАКСИКОНОВ

<u>С.К. Сергунин</u>¹, С.В. Краснов¹

¹Самарский национальный исследовательский университет, (443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34) e-mail: stanislav.sergynin@gmail.com

В данной работе с использованием программного продукта Lumerical были выполнены расчеты фокусировки импульсных лазерных линейнополяризованных гауссовых пучков с помощью рефракционного микроаксикона. Показано изменение картины поперечных и продольных распределений пучка от времени импульса.

Ключевые слова: импульс, микроаксикон, гауссов пучок.

1. ВВЕДЕНИЕ

Фокусировка коротких импульсных пучков [1-7] используется в различных приложениях, таких как обработка материалов [8], формирование наномасштабных структур [9], оптический захват и манипулирование [10, 11].

Для описания ультракоротких импульсов используются разные модели, основанные на источниках с потенциалом Герца [1, 2], на векторных и скалярных потенциалах [3, 4], а также дифференциальном подходе [5]. Метод потенциала Герца нужен для эффективного получения выражений для электромагнитных полей, которые строго удовлетворяют четырем уравнениям Максвелла. Модель комплексного источника используется для определения точного решения уравнения Гельмгольца, которое описывает физически реализуемый непараксиальный пучок, обобщающий стандартный гауссов пучок.

Заметим, что Гауссово распределение импульса нужно осторожно использовать в случае ультракоротких импульсов, так как эта модель не обеспечивает отсутствие отрицательных частот [3]. Чтобы избежать такой ситуации, рассматривают частотно-взвешенный Гауссов спектр [4], а также Пуассоновский частотный спектр [3, 5]. При этом увеличивается вклад высоких частот, и происходит относительное уменьшение размера фокального пятна [1, 4, 12].



Рис. 1. Положения в пространстве относительно Гауссова пучка аксикона большого (2.5 мкм)

Заметим, что фокусировку лазерного излучения можно осуществлять не только линзой, но и аксиконом. В работе [13] было проведено моделирование фокусировки коротких и длинных световых импульсов с использованием рефракционного аксикона методом конечных разностей во временной области. Было показано, что длительность пучка не сказывается на усреднённой картине интенсивности в плоскости фокусировки, однако при использовании коротких импульсов может достигаться очень высокая пиковая Сравнение численных результатов для мощность. различных типов поляризации излучения показало, что при острой фокусировке энергия перераспределяется между радиальным и продольным компонентами электрического поля, в то время как энергия азимутального компонента не изменяется.

В данной работе с использованием программного продукта Lumerical были выполнены расчеты фокусировки импульсных лазерных линейнополяризованных гауссовых пучков с помощью рефракционных микроаксиконов. Показано изменение выходного поля от времени импульса.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

С использованием программного продукта Lumerical были выполнены расчеты фокусировки импульсных лазерных линейно-поляризованных гауссовых пучков с помощью стеклянного (показатель преломления 1.4) рефракционного микроаксикона. Угол раскрытия аксикона при вершине составляет 80, а высота 2,5 микрометра.

На рисунке 2 показаны графики временных характеристик Гауссова импульса, в частности, зависимости спектра от длины волны (первая строка), от частоты (вторая строка), и зависимость сигнала от времени (третья строка). График сигнала длинной 50 фмс обрезан в силу программных ограничений, которые не позволяют вывести весь импульс. Видно, что с уменьшением длины импульса происходит смещение центральной длины волны и расширение спектра.



Рис. 2. Характеристики импульсного излучения для длительности импульса: а)50 фмс, б) 10 фмс

Пространственное распределение падающего Гауссова пучка описывается следующей формулой:

$$G(x,y) = e^{-\frac{x^2 + y^2}{2\sigma^2}}, \sigma = 3\lambda_0,$$
 (1)

ГДе $\lambda_0 = 0.5$ мкм.

Пространственное распределение (1) использовалось во всех расчетах, а временное распределение менялось в зависимости от времени импульса.

В таблице 1 отображены характеристики входного Гауссова импульса.

Время	bandwidth	span мкм	offset(фмс)	Центральная
импульса(фмс)	(THz)			длина
				волны(мкм)
50	8.82542	0.00890571	55	0.55
10	44.1271	0.0445987	35	0.54

Таблица 1. Характеристики Гауссова импульса.

2.1. Результаты для аксикона

Геометрические размеры аксикона были выбраны так, чтобы падающий на него пучок (1) полностью попадал на элемент. На рисунке 3 показаны графики сечений фокального пятна вдоль оси х и у в плоскости максимальной интенсивности при длительности импульса 50 фмс, длительность импульса 50 фмс практически соответствует непрерывному сигналу. В этом случае при острой фокусировке должно на уширение фокального пятна вдоль оси поляризации, что и демонстрирует полученный результат рисунки 3 и 6.

Если сравнивать графики сечений можно заметить изменения центрального пятна сфокусированного пучка (рисунки 3 и 4, второй столбец) при уменьшении длительности импульса наблюдается сдвиг центров интенсивности относительно центральной оси и расширение пучка по оси у.



Рис. 3. Графики сечений фокального пятна по оси х (слева) и у (справа) в плоскости максимальной интенсивности при длительности импульса 50 фмс для большого аксикона



Рис. 4. Графики сечений фокального пятна по оси х (слева) и у (справа) в плоскости максимальной интенсивности при длительности импульса 10 фмс для большого аксикона

Длинна импульса(фмс)	Размер фокального пятна по полуспаду		
	интенсивности вдоль осей (мкм)		
	X	У	
50	2.0	0.7	
10	2.6	1.2	

Таблица 2. Свойства пучка после прохождения аксикона.

На рисунках 5, 6 показаны картины поперечных и продольных распределений пучка при фокусировке большим аксиконом. Продольные распределения при изменении длительности практически не меняются, а поперечные фокальное пятно при уменьшении длительности несколько уширяется (таблица 2), что более заметно на рисунках 3, 4.



Рис. 5. Результаты эксперимента с большим аксиконом при длительности 50 фмс



Рис. 6. Результаты эксперимента с аксиконом при длительности 10 фмс

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе с использованием программного продукта Lumerical были выполнены расчеты фокусировки импульсных лазерных линейнополяризованных гауссовых пучков с помощью рефракционного микроаксикона. Показано изменения картины поперечных и продольных распределений пучка от времени импульса. Наблюдали для аксикона (рисунок 1) то, что картины поперечных и продольных распределений пучка при фокусировке продольное распределение при изменении длительности практически не меняется, а поперечное фокальное пятно при уменьшении длительности несколько уширяется (таблица 2).

Данная работа была выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований. (грант № 18-07-01470 А)

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- F. J. Duarte Ultrashort, strongly focused laser pulses in free space in Coherence and Ultrashort Pulse Laser Emission / F. J. Duarte // ed. InTech. -2010. – P. 355-382.
- Wong L.J. Improved beam waist formula for ultrashort, tightly-focused linearly, radially, and azimuthally polarized laser pulses in free space / L.J. Wong, F.X. Kärtner, S.G. Johnson // Opt. Lett. – 2014. – Vol. 39(5). – P. 1258-1261.
- Li, X. Fields of an ultrashort tightly focused laser pulse / X. Li, Y.I. Salamin, K.Z. Hatsagortsyan, C.H. Keitel // J. Opt. Soc. Am. B – 2016. – Vol. 33. – P. 405.
- 4. Feng, S. Spatiotemporal structure of isodiffracting ul-trashort electromagnetic pulses / S. Feng, H.G. Winful // Phys. Rev. E. 2000. Vol. 61. P. 862–873.
- Porras, M.A. Nonsinusoidal few-cycle pulsed light beams in free space / M.A. Porras // J. Opt. Soc. Am. B. – 1999. – Vol. 16. – P. 1468.
- Khonina, S.N. Ultrafast rotating dipole or propeller-shaped patterns: subwavelength shaping of a beam of light on a femtosecond timescale / S.N. Khonina, I. Golub // Opt. Lett. – 2016. – Vol. 41. – P. 1605-1607.
- Khonina, S.N. Time behavior of focused vector beams / S.N. Khonina, I. Golub // J. Opt. Soc. Am. A. – 2016. – Vol. 33. – P. 1948.
- Omatsu, T. Metal microneedle fabrication using twisted light with spin / T. Omatsu, K. Chujo, K. Miyamoto, M. Okida, K. Nakamura, N. Aoki, R. Morita // Optics Express. 2010. Vol. 18(17). P. 17967-17973.
- Okamuro, K. Laser fluence dependence of periodic grating structures formed on metal surfaces under femtosecond laser pulse irradiation / K. Okamuro, M. Hashida, Y. Miyasaka // Physical Review B. – 2010. – Vol. 82. – P.165417.
- Agate, B. Femtosecond optical tweezers for in-situ control of two-photon fluorescence / B. Agate, C.T.A. Brown, W. Sibbett, K. Dholakia // Opt. Express. - 2004. - Vol. 12. - P. 3011-3017.

- 11. Wang, L.-G. Dynamic radiation force of a pulsed Gaussian beam acting on a Rayleigh dielectric sphere / L.-G. Wang, C.-L. Zhao // Optics Express. 2007. Vol. 15(17). P. 10615-10621.
- 12. Хонина С.Н. Сравнение фокусировки коротких импульсов в приближении Дебая / Хонина С.Н., Устинов А.В., Волотовский С.Г. // Компьютерная оптика. –2018. –Т. 4. № 3. –С. 432-446.
- 13. Метерко А. В. Сравнение фокусировки рефракционным аксиконом импульсов с различной поляризацией и длительностью / Метерко А. В., Хонина С. Н. // Вестник Самарского государственного аэрокосмического университета им. академика С.П. Королёва (национального исследовательского университета). – 2012. – Т. 4, №35. – С. 210-217.

FOCUSING OF PULSED LASER LINEARLY POLARIZED GAUSSIAN BEAMS USING REFRACTIVE MICROAXICONS

S.K. Sergunin¹, S.V. Krasnov¹

¹Samara National Research University, (Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086) e-mail: stanislav.sergynin@gmail.com

In this work, using the Lumerical software product, the focusing of pulsed laser linearly polarized Gaussian beams was calculated using a refractive microaxicon. It is shown that the output field changes depending on the pulse duration.

Keywords: pulse, gaussian beam, microaxicon.

СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКОГО ПРОСВЕТЛЕНИЯ КОЖИ ЧЕЛОВЕКА II и VI ФОТОТИПОВ *IN VIVO*

<u>И.А. Серебрякова</u>¹, Ю.И. Сурков¹, Э.А. Генина^{1,2}, А.Н.Башкатов^{1,2}, В.В.Тучин¹⁻³, В.П. Жаров⁴

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) ³Институт проблем точной механики и управления РАН (410028, г. Саратов, ул. Рабочая, 24) 4Арканзасский Центр Наномедицины, Арканзасский Университет Медицинских Наук, Литл-Рок, США (AR 72205, 4301 W Markham St, Little Rock) e-mail: s.izabell2014@gmail.com

В работе представлены новый подход к оптическому просветлению кожи «MOUSE» (Microdermabrasion, Oleic acid, UltraSound Effect) и результаты экспериментального исследования воздействия данного комплекса И олеиновой отдельных компонентов: кислоты, микродермабразии И ультразвукового облучения на глубину зондирования оптической когерентной томографии кожи человека II и VI фототипов. Полученные результаты увеличении глубины мониторинга свидетельствуют значительном 0 оптического зондирования как светлой, И ДЛЯ так ДЛЯ сильнопигментированной кожи при применении MOUSE. Эффективность оптического просветления при данном подходе составила для кожи II и VI фототипов $32 \pm 1.8\%$ и $20.7 \pm 1.6\%$, соответственно.

Ключевые слова: оптический просветляющий агент, микродермабразия, сонофорез, оптическая когерентная томография, меланин.

1. ВВЕДЕНИЕ

Управление рассеивающими свойствами биологических тканей является одним из интенсивно развивающихся методов увеличения глубины зондирования и повышения качества изображений внутритканевых структур глубоких слоёв биотканей и крови, представляющий интерес для биофизиков, биологов и медиков, работающих над созданием оптических медицинских технологий визуализации, диагностики различных заболеваний с использованием оптических методов, и дозиметрии лазерного излучения [1].

Серьезной проблемой современной медицины продолжает оставаться транспорт зондирующего излучения через поверхностные слои биоткани. Оптическое иммерсионное просветление позволяет временно уменьшить светорассеяние в сложных гетерогенных средах, таких как кожа, путем выравнивания показателей преломления рассеивателей и внутритканевой жидкости. При этом важной задачей также является снижение барьерной функции эпидермиса для облегчения проникновения в ткань биосовместимых иммерсионных веществ — оптических просветляющих агентов (ОПА) [2]. Помимо упомянутых проблем, пигментация кожи является причиной ослабления светового луча. К сожалению, в литературе практически отсутствуют какие-либо данные (за исключением работы [3]) о возможности оптического просветления темной кожи человека, в частности VI фототипа пигментированной темно-коричневой или черной (глубоко кожи В соответствие с классификационной шкалой типов кожи Фитцпатрика [4]).

Целью данного исследования является сравнение эффективности оптического просветления кожи человека II и VI фототипов при воздействии олеиновой кислоты и мультимодального метода повышения проницаемости эпидермиса *in vivo*.

2. МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА И ОБРАБОТКА ПОЛУЧЕННЫХ ДАННЫХ

Объектом исследования служила кожа тыльной стороны кисти руки шести добровольцев в возрасте 20 - 26 лет, трое из которых имели II фототип и трое – VI фототип кожи.

Определение индекса меланина в коже проводилось с помощью эритемо/меланинометра 002E (Palomar, США) [5].

Измерение спектров диффузного отражения кожи проводилось с помощью спектрометра USB4000-Vis/NIR (Ocean Optics, США) в диапазоне длин волн 880 – 980 нм.

В качестве иммерсионного агента была выбрана олеиновая кислота (OK) (Radiacid® 0212, Oleon, Бельгия). ОК является мононенасыщенной жирной кислотой и хорошо проникает в эпидермис благодаря её липофильности. Показатель преломления, измеренный на длине волны 930 нм и при

температуре 36 °C с использованием многоволнового рефрактометра DR-M2/1550 (АТАGO, Япония), составил 1.45.

Для увеличения проницаемости эпидермиса использовались микродермабразия и сонофорез. Микродермабразия проводилась с помощью специализированного косметического устройства с сапфировым наконечником и вакуумным массажёром Gézatone MD-3a 933 (Gézanne I.T.C., Франция). Время обработки кожи составляло 1 минуту при легком надавливании без боли.

Для сонофореза использовалось ультразвуковое (УЗ) устройство Dynatronics 125 (Dynatrone, США), оборудованное зондом диаметром 2 см, работающее в режиме непрерывного облучения с частотой 1 МГц и плотностью мощности 1 Вт/см². Облучение проводилось шесть раз по 1 мин. Четырехминутные паузы между УЗ воздействиями обеспечивали охлаждение излучающей поверхности зонда. Данный процесс продолжался в течение 30 минут.

Обработка участка кожи в эксперименте осуществлялась одним из четырех способов: 1 – нанесение ОК на интактную кожу; 2 – микродермабразия, а затем нанесение ОК, 3 – сонофорез с ОК; 4 – комплексное действие микродермабразии, ОК и УЗ (MOUSE). Каждый способ обработки исследовался на двух участках кожи каждого из добровольцев.

Мониторинг состояния кожи проводился с помощью оптического когерентного томографа (ОКТ) SpectralRadar ОСТ System OCP930SR 022 (Thorlabs Inc., США) с центральной длиной волны источника излучения 930 нм±5 нм, максимальной глубиной зондирования на воздухе 1.6 мм, поперечным и продольным разрешением 9.6 мкм и 6.2 мкм, соответственно. ОКТ сигнал регистрировался от интактной кожи и затем каждые 5 минут в течение 30 минут. Оптическая глубина зондирования определялась как расстояние между первым пиком, возникающим на границе воздухэпидермис, и глубиной, на которой превышение усреднённого полезного сигнала от кожи над усреднённым фоновым сигналом составляло не менее 10%. Для оценки эффективности оптического просветления (ЭОП) была применена следующая формула:

$$\Theta O \Pi = \frac{H_t - H_0}{H_0} \times 100\% \quad , \tag{1}$$

где H_0 – среднее значение оптической глубины зондирования в начале эксперимента; H_t – среднее значение оптической глубины зондирования в течение эксперимента.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА

Результаты определения индекса меланина и спектры отражения кожи, усреднённые по группам добровольцев с II и VI фототипами кожи (до оптического просветления), представлены на рисунке Ошибка! Источник ссылки не найден.



Рис. 1. Оптические характеристики кожи человека II и VI фототипов: а) индекс меланина, б) коэффициент диффузного отражения кожи.

Из рисунка 1 следует, что увеличение степени пигментации кожи приводит к снижению коэффициента диффузного отражения за счёт поглощения части зондирующего светового пучка меланином. Рисунок 2 демонстрирует ОКТ изображения исследуемой области кожи до оптического просветления и через 30 мин после начала воздействия. На ОКТ изображениях темной кожи эпидермис выглядит ярче, чем светлой, что, по-видимому, связано с сильным рассеянием света на меланиновых гранулах в данном спектральном диапазоне.



Рис. 2. Примеры ОКТ-изображений участков кожи человека (1 и 2 строка – II и VI фото-типы, соответственно): а) интактная кожа, через 30 минут после: б) нанесения ОК, в) микродермабразии с последующим нанесением ОК, г) сонофореза с ОК), д) комбинации микродермабразии, ОК и УЗ (MOUSE). Масштабная метка соответствует 300 мкм.

Также хорошо видно, что оптическое просветление наблюдается не только в слабо, но и в сильно пигментированной коже. Это подтверждается результатами оценки оптической глубины зондирования, представленными на рисунке 3. И в том, и в другом случае наблюдается рост ЭОП с течением времени.



Рис. 1. Временная зависимость оптической глубины зондирования кожи с помощью ОКТ: а) II фототип, б) VI фототип. Цифрами обозначены способы воздействия на кожу в ходе проведения эксперимента: 1 и 5 – ОК; 2 и 6 – микродермабразия и ОК, 3 и 7 – сонофорез с ОК, 4 и 8 – MOUSE.

Рисунок 4 демонстрирует результаты расчета ЭОП через 30 мин после начала экспериментов.



Рис. 4. Эффективность оптического просветления: Цифрами обозначены способы воздействия на кожу в ходе проведения эксперимента: 1 и 5 – ОК; 2 и 6 – микродермабразия и ОК, 3 и 7 – сонофорез с ОК, 4 и 8 – MOUSE.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные результаты ОКТ мониторинга свидетельствуют о значительном увеличении глубины оптического зондирования как для слабо, так и для сильнопигментированной кожи при применении ОК в сочетании с микродермабразией и сонофорезом. Эффективность оптического просветления при данном подходе составила для кожи II и VI фототипов 32 ± 1.8 % и 20.7 ± 1.6 %, соответственно.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Costantini I., Cicchi R., Silvestri L., Vanzi F., Pavone F. S. In-vivo and ex-vivo optical clearing methods for biological tissues: review // Biomed. Opt. Express, 2019. vol. 10, no. 10, pp. 5251 5267.
- Генина Э.А. Управление оптическими свойствами биологических тканей: диссертация на соискание учёной степени доктора физико-математических наук, 2017. 388 с.
- Genina E.A., Surkov Yu.I., Serebryakova I.A., Bashkatov A.N., Tuchin V.V., Zharov V.P. Rapid ultrasound optical clearing of human light and dark skin // IEEE Transactions on Medical Imaging, 2020, vol. 39, no. 10, pp. 3198-3206.
- 4.https://www.arpansa.gov.au/sites/g/files/net3086/f/legacy/pubs/RadiationProtecti on/FitzpatrickSkinType.pdf. Australian Radiation Protection and Nuclear Safety Agency. Fitzpatrick skin phototype. Обращение к ресурсу 28.03.2020

 Синичкин Ю.П., Долотов Л.Е., Зимняков Д.А. Специальный практикум по оптиче-ской биофизике. In vivo отражательная и флуоресцентная спектроскопия кожи человека // Учеб. пособие для студентов вузов – Саратов: Изд-во Сарат. ун-та, 2003. 159 с.

COMPARATIVE STUDY OF OPTICAL LIGHTENING OF HUMAN SKIN WITH DIFFERENT PIGMENTATION DEGREE

<u>Isabella A. Serebryakova¹</u>, Yury I. Surkov¹, Elina A. Genina^{1,2}, Alexey N. Bashkatov^{1,2}, Valery V. Tuchin^{1,2,3}, and Vladimir Zharov⁴

> ¹Saratov State University (410012, Saratov, 83Astrakhanskayastr.) ²National Research Tomsk State University, (634050, Tomsk, 36Lenin Av.) ³Institute of Precision Mechanics and Control, RAS (24 Rabochaya str., Saratov, Russia, 410028) ⁴ Arkansas NanomedicineCenter, University of Arkansas for Medical Sciences, Little Rock, AR USA (AR 72205, 4301 W Markham St, Little Rock) e-mail: s.izabell2014@gmail.com

The paper presents a new approach to optical clearing of skin "MOUSE" (Microdermabrasion, Oleic acid, and UltraSound Effect) and the results of an experimental study of impact of both the complex and the separate components: oleic acid, microdermabrasion and ultrasonic irradiation on the probing depth of optical coherence tomography of human skin with II and VI phototypes. The obtained results of the monitoring indicate a significant increase in the depth of optical probing for both light and highly pigmented skin when using MOUSE. The efficiency of optical clearing using this approach was $32 \pm 1.8\%$ and $20.7 \pm 1.6\%$ for skin of II and VI phototypes, respectively.

Keywords: optical clearing agent, microdermabrasion, sonophoresis, optical coherence tomography, melanin.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ НАХОЖДЕНИЕ ЗНАЧЕНИЯ ПОСТОЯННОЙ ПЛАНКА

<u>Н.И. Смирнова</u>, С.В. Смирнов, Э.Э. Мусаев, О.М. Алыкова, В.В. Смирнов

Астраханский государственный университет (4140561, г. Астрахань, ул. Татищева, 20 «А»)

Постоянная Планка является одной из физических фундаментальных констант. Методы нахождения ее значения отличаются как достигаемой точностью, так и ценой вопроса. В работе на базе известного метода фотоэффекта предлагается несложная установка, обеспечивающая точность, удовлетворяющую требования лабораторно-демонстрационного эксперимента, как школы, так и ВУЗа.

Ключевые слова: фундаментальные физические константы, фотоэффект, лазерный модуль.

1. ВВЕДЕНИЕ

Вопрос об изменении фундаментальных констант с течением времени является одним из важнейших в исследовании эволюции Вселенной, появившимся после возникновения теории о расширяющейся Вселенной. Поэтому измерение значений фундаментальных физических констант (ФФК), согласование их значений между собой, является вопросом весьма актуальным [1]. Постоянная Планка, *h* трактовка которой лежит как от устоявшихся представлений о ней как о границе между макромиром, где действуют законы механики Ньютона, и микромиром, где действуют законы квантовой механики [2], так и до спорных - как о коэффициенте пропорциональности, собственным устанавливающим взаимосвязь между гироскопическим моментом фотона и отношением частот вращения (по круговой траектории и собственной), имеющим характер квазипостоянной во всей области существования фотона [3], является одной из таких фундаментальных констант.

Поэтому представление о методах нахождения значений ФФК (в рамках этой работы – постоянной Планка) должны формироваться как у студентов, обучающихся на специальностях физических, так и на педагогических.

Конечно, вопрос о методах измерения *h* поднимался и описан неоднократно. Для сохранения целостности повествования, кратко опишем

наиболее распространенные из них, а затем перейдем к используемому в данной работе.

2. НАХОЖДЕНИЕ ЗНАЧЕНИЯ ПОСТОЯННОЙ ПЛАНКА

2.1. Обзор существующих методов нахождения значения постоянной Планка

Величина h, известная сейчас как постоянная Планка, была введена Максом Планком для объяснения закономерностей излучения абсолютно черного тела. Причем введена была как "акт отчаяния ..."[4], как "чисто формальное предположение ..." [5]. Из экспериментальных данных по излучению чёрного тела Планку удалось вычислить значение h = 6,65·10-34 Дж·с с точностью 1,2 % от принятого сейчас значения. Доклад о полученной формуле распределения энергии в спектре излучения абсолютно черного тела был сделан им 14 декабря 1900 г. на заседании Германского физического общества. Эта дата считается датой рождения квантовой физики.

Значение h, согласно CODATA (Committee on Data for Science and Technology – Комитет по данным для науки и техники - междисциплинарный комитет Международного совета по науке, учрежденный в 1966 году и ставящий своей целью сбор, критическую оценку, хранение и поиск важных данных для задач науки и техники [6]), основано на базе трёх измерений методом баланса мощностей произведения величин KJ2RK и одного межлабораторного измерения молярного объёма кремния:

$$h = \frac{4}{K_j^2 R_K},\tag{1}$$

где КЈ есть постоянная Джозефсона, а RK – постоянная Клитцинга, появляющаяся в квантовом эффекте Холла.

В таблице 1 приведены значения h, полученные различными методами, обеспечивающими наибольшую точность измерений.

Метод	Значение <i>h</i> , 10 ⁻³⁴ Дж∙с	Точность определения	
Баланс мощности	6,626 068 89(23)	3,4.10-8	
Рентгеновская плотность кристалла	6,626 074 5(19)	$2,9 \cdot 10^{-7}$	
Постоянная Джозефсона	6,626 067 8(27)	$4,1.10^{-7}$	
Магнитный резонанс	6,626 072 4(57)	8,6.10-7	
Постоянная Фарадея	6,626 065 7(88)	$1,3.10^{-6}$	
CODATA 2010	6,626 069 57(29)	4,4·10⁻⁸	
принятое значение			

Таблица 1. Значения h, полученные различными методами [7]

2.2. Нахождение значения постоянной Планка с помощью фотоэффекта

В 1888 г. Герц заметил, что при освещении разрядного промежутка между двумя электродами ультрафиолетовым светом напряжение пробоя значительно уменьшается. А.Г. Столетов разработал методику исследования этого явления при низких напряжениях и установил ряд важных закономерностей фотоэффекта, которые Эйнштейн в 1905 г. первым объяснил эти результаты, предположив, что свет представляет собой поток фотонов с энергией *hv*. Появилось уравнение фотоэффекта:

$$h\nu = A + \frac{m\nu^2}{2},\tag{2}$$

где A – работа выхода электронов из поверхности металла, а $\frac{mv^2}{2}$ – максимальная кинетическая энергия.

Использование различных частот излучателя позволяет реализовать нахождение значения *h*:

$$h = \frac{e}{c} \cdot \frac{\left(U_1 - U_2\right)}{\left(\frac{1}{\lambda_1} - \frac{1}{\lambda_2}\right)}.$$
(3)

Данный метод носит название метода Милликена и Лукирского-Прилежаева. Для получения монохроматического излучения используют белый свет, вырезая из него нужные полосы как с помощью крайне неточных, но дешевых окрашенных стекол, так и значительно более дорогих монохроматоров, например [8], либо интерференционных фильтров.

В работах также используются светоизлучающие модули, содержащие узкополосные источники (светодиоды с наличием ярко выраженного максимума при определенной длине волны света). Параметры длин волн

варьируются в интервале λ=(420-660) нм и отображаются на жидкокристаллическом дисплее корпуса установки [9].

В ряде работ, например, в [10, 11] значения *h* находят по измерению порогового значения напряжения включения генерации луча лазера.

При разработке данной экспериментальной установки было принято решение использовать за основу метод Лукирского-Прилежаева, а в качестве источников независимые лазерные модули с точно известной длиной волны излучения.

2.3. Экспериментальная установка для нахождение значения постоянной Планка с помощью фотоэффекта

Экспериментальная установка состоит из трех лазерных модулей со следующими характеристиками:



Рис. 1. Модель экспериментальной установки

- 1) лазерный модуль сине-фиолетовый 405 нм 10мВт (левый);
- 2) лазерный модуль зеленый 532nm 3V 50 мВт (правый);
- 3) лазерный модуль красный 650nm 3V 100 мВт (центральный)

и вакуумного фотодиода Ф-9, крепления для которых были напечатаны на 3D принтере (рис. 1). Крепления для лазеров предусматривали посадочное место под короткофокусные линзы для формирования расходящегося луча с диаметром, равным диаметру катода фотоприемника. Экспериментальная установка в сборе показана на рис. 2. В ходе эксперимента снимались зависимость фототока от приложенного напряжения, которые затем апроксимировались для нахождения значения запирающего напряжения. Усредненные результаты измерений приведены В таблице 2, ИХ аппроксимация показана на рис. 3. В таблице 3 приведены значения задерживающих потенциалов.

Красный, 650 нм		Зеленый, 532 нм		Синефиолетовый, 405 нм	
U, B	І, нА	U, B	І, нА	U, B	U, B
4,841	1930	4,842	6400	4,841	4,841
4,155	1700	4,286	5380	4,170	4,170
3,535	1500	3,654	4500	3,593	3,593
2,995	1300	3,600	4000	3,011	3,011
2,447	1086	2,458	2950	2,402	2,402
1,865	600	1,827	1890	1,766	1,766
1,167	130	1,187	803	1,138	1,138
0,612	-270	0,617	55	0,605	0,605
0	-660	0	-700	0	0

Таблица 2. Результаты измерений зависимости фототока от приложенного напряжения





зеленый, габаритные размеры 13 мм×48 мм



синефиолетовый, диаметр: 5.6 мм



красный, размер: 18×25 мм

Рис. 2. Экспериментальная установка в сборе



Рис. 3. Апроксимированные результаты

Таблица 3. Значение запирающих напряжения лазерных модулей

Запирающий	Красный	-0,994	
потенциал,	Зеленый	-0,571	
U3, B	Сине-фиолетовый	0,159	

Выполненные расчеты дают следующие результаты:

$$h_{1} = \frac{e}{c} \cdot \frac{\left(U_{3e\pi} - U_{\kappa pac}\right)}{\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda}\right)} = 6,625 \cdot 10^{-34} \left(\mathcal{I} \mathcal{H} c \cdot c\right)$$

$$\tag{4}$$

$$h_{2} = \frac{e}{c} \cdot \frac{\left(U_{c\phi} - U_{se\pi}\right)}{\left(\frac{1}{\lambda_{c\phi}} - \frac{1}{\lambda_{se\pi}}\right)} = 6,619 \cdot 10^{-34} \left(\mathcal{A} \times c\right)$$

$$(5)$$

$$h_{3} = \frac{e}{c} \cdot \frac{\left(U_{c\phi} - U_{\kappa pac}\right)}{\left(\frac{1}{\lambda_{c\phi}} - \frac{1}{\lambda_{\kappa pac}}\right)} = 6,621 \cdot 10^{-34} \left(\mathcal{I}\mathcal{H} \cdot c\right)$$
(6)

Полученный результат хорошо совпадает с результатами, рекомендованными CODATA.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, разработана бюджетная установка для нахождения значения постоянной Планка, которая может быть использована для лабораторно-демонстрационного эксперимента, как в школе, так и в ВУЗе. Без учета измерительных приборов ориентировочная стоимость ее изготовления составляет 2, 5 – 3 тысячи рублей. Полученные с ее использованием результаты находятся в хорошем соответствии с результатами, рекомендованными CODATA.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. http://www1.jinr.ru/Pepan_letters/panl_3_2008/37_karsh.pdf
- 2. https://elementy.ru/trefil/21193/Postoyannaya_Planka
- 3. http://nauka2000.com/физическая-сущность-постоянной-план/
- 4. Kragh, Helge (1 December 2000), Max Planck: the reluctant revolutionary, PhysicsWorld.com.
- 5. Kragh, Helge (1999), Quantum Generations: A History of Physics in the Twentieth Century, Princeton University Press, p. 62, ISBN 0691095523.
- 6. https://ru.wikipedia.org/wiki/Комитет_по_данным_для_науки_и_техники
- 7. http://traditio.wiki/Постоянная_Планка
- 8. http://iatephysics.narod.ru/Atomic_Phys_Lab/Planck.pdf Вычисление постоянной Планка
- 9. Коваленко В.В., Невский С.А. Новации в моделировании физических явлений квантовой оптики // Современные наукоемкие технологии. 2013.
 № 12. С. 75-82; URL: http://www.top-technologies.ru/ru/article/view?id=33601 (дата обращения: 15.01.2020).
- 10. Лабораторая работа №70. Определение постоянной Планка с помощью полупроводникового лазера. http://ugguphysica.narod.ru/spec/postplanka.pdf
- 11. Х.К. Абдрахманова, П.А. Саидахметов, Б.С. Уалиханова, А.А. Сатыбалды, Методика измерения постоянного Планка. International Journal of Humanities and Natural Sciences, vol.5, part 1, c. 239-243.

THEORETICAL AND EXPERIMENTAL FINDING OF THE VALUE OF THE PLANCK CONSTANT

N. I. Smirnov, V. V. Smirnov, E. E. Musaev, O. M. Alykova, S. V. Smirnov

Astrakhan State University (4140561, Astrakhan, Tatishcheva str., 20 "A")

Planck's Constant is one of the physical fundamental constants. Methods for finding its value differ both in the accuracy achieved and in the price of the question. Based on the well-known photoelectric effect method, a simple installation is proposed that provides accuracy that meets the requirements of a laboratory demonstration experiment, both at school and at University.

Keywords: fundamental physical constants, photoelectric effect, laser module.

ВЛИЯНИЕ УЛЬТРАЗВУКА ТЕРАПЕВТИЧЕСКОГО ДИАПАЗОНА ЧАСТОТ НА ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ИММЕРСИОННОЕ ПРОСВЕТЛЕНИЕ КОЖИ

<u>Ю.И. Сурков</u>¹, И.А. Серебрякова¹, А.Н. Башкатов^{1,2}, В.В. Тучин^{1,2,3}, 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) ³Институт проблем точной механики и управления РАН (410028, г. Саратов, ул. Рабочая, 24) e-mail: surkov9898@gmail.com

В работе представлены результаты экспериментальных исследований влияния ультразвукового (УЗ) облучения (на частотах 1 и 3 МГц с плотностью мощности 0.5 - 2 Вт/см²) на оптические характеристики кожи человека *in vivo* и на эффективность иммерсионного оптического просветления. Определены параметры УЗ облучения кожи, достаточные для наблюдения оптического просветления с помощью оптической когерентной томографии (ОКТ). Обнаружено, что только УЗ облучение с параметрами 1 МГц, 2 Вт/см² в непрерывном режиме увеличило глубину зондирования ОКТ приблизительно в 1.3 раза в течение 5 мин, при этом эффективность оптического просветления с оставила $26 \pm 8\%$. Комбинированное использование УЗ с олеиновой кислотой позволило увеличить оптическую глубину зондирования в среднем в 1.4 раза и эффективность оптического просветления до $35 \pm 6\%$.

Ключевые слова: ультразвук, ОКТ, оптическое просветление.

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время неинвазивность и высокая точность оптических методов диагностики и терапии различных заболеваний способствовали тому, что эти методы сегодня всё более активно используются в медицине. Однако глубина доставки зондирующего излучения необходимой интенсивности ограничена рассеивающей способностью биотканей. Перспективным методом решения проблемы является оптическое просветление биологических тканей [1, 2].
Для эффективного изменения оптических свойств биотканей используют, в частности, оптические просветляющие агенты (ОПА) [1, 2]. Такое управление, направленное на снижение рассеяния биоткани, чрезвычайно важно для повышения глубины проникновения светового излучения в биологические ткани, что, в свою очередь увеличивает эффективность диагностических и терапевтических оптических методов.

Одним из объектов исследования и фотовоздействия является кожа. Для увеличения проницаемости эпидермиса для ОПА используются различные физические подходы, в том числе низкочастотное ультразвуковое воздействие (УЗ), низко- и высокоинтенсивное лазерное облучение, микродермабразия и комбинация различных воздействий [2].

Широкое применение техники сонофореза для увеличения скорости и глубины проникновения ОПА [3] в кожу требует изучения его воздействия не только на поверхностный слой эпидермиса, но и на более глубокие слои биотканей. При изучении действия УЗ на биоткани наблюдались: нагрев облучаемого участка, тенденция к выравниваю концентраций растворённых веществ вне и внутри клетки, дестабилизация связей между молекулами коллагена и окружающим матриксом, тисотропный (разрыхление соединительной ткани) и тиксотропный (переход геля в золь) эффекты [4]. Однако влияние различных параметров УЗ воздействия на оптические характеристики кожи недостаточно исследовано.

Целью данной работы является исследование влияния УЗ излучения на частотах 1 и 3 МГц, использующихся для сонофореза, на оптические характеристики и иммерсионное просветление кожи человека *in vivo*.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Объектом исследования служила кожа тыльной стороны кисти четырёх добровольцев обоих полов в возрасте 19 – 22 лет.

С целью мониторинга состояния кожи проводилось сканирование исследуемого участка с помощью спектрального оптического когерентного томографа SpectralRadar OCT System OCP930SR 022 (Thorlabs, CША), работающего на центральной длине волны 930 ± 5 нм. Ширина спектральной полосы OKT на полувысоте составляла 100 ± 5 нм, выходная мощность – 2 мВт, оптическая глубина сканирования – 1.6 мм, пространственное разрешение системы по глубине – 6.2 мкм, поперечное разрешение – 9.6 мкм на воздухе и длина области сканирования 2 мм.

Максимальная оптическая глубина зондирования определялась по усреднённому А-скану ОКТ как расстояние от первого пика, соответствующего поверхности кожи, до ближайшей точки, для которой отношение полезного сигнала к фоновому составляло 1.1. Эффективность оптического просветления (ЭОП) определялась как отношение модуля разности максимальной глубины зондирования до и после оптического просветления к начальной глубине зондирования.

Все измерения повторялись четыре раза. Результаты представлены в виде среднего ± стандартное отклонение. Для определения статистической значимости результатов применяли двухсторонний t-критерий Стьюдента, результат считался статистически значимым при p<0.05.

Для определения влияния УЗ на оптические свойства кожи человека *in vivo* облучение тыльной стороны кисти УЗ проводилось в течение 30 минут через каждые 5 минуты по 1 минуте, четырёхминутные паузы между облучениями обеспечивали охлаждение рабочей поверхности УЗ зонда. Поскольку при непосредственном контакте головки УЗ зонда с поверхностью биоткани между ними образуются полые участки, заполненные воздухом, который не проводит УЗ, то для акустического контакта между УЗ зондом и биотканью использовалась вода, которая не вызывает оптического просветления кожи, т.к. показатель преломления воды – 1.33 меньше, чем у внутритканевой жидкости – 1.34 [5].

Для определения влияния параметров сонофореза на оптическое просветление с помощью иммерсионного метода в качестве иммерсионного агента была выбрана олеиновая кислота (Radiacid® 0212, Oleon, Бельгия). Олеиновая кислота (ОК) является мононенасыщенной жирной кислотой. Показатель преломления, измеренный на длине волны 930 нм и при температуре 36°С с использованием многоволнового рефрактометра DR-M2/1550 (ATAGO, Япония), составил 1.45. Обработка участка кожи осуществлялась одним из двух способов в следующей последовательности: 1 - нанесение ОК; 2 - нанесение ОК и сонофорез через каждые 5 минут по 1 минуте в течение 30 минут с различными начальными параметрами УЗ. Спустя 30 минут после начала эксперимента в обоих случаях остатки ОПА с поверхности кожи салфеткой (без удалялись надавливания, пропитывающими движениями).

С целью мониторинга состояния кожи проводилось сканирование исследуемого участка с помощью ОКТ каждые пять минут в течение одного часа. Таким образом, общее время наблюдения составляло 60 минут, 30 минут

с нанесением ОК и/или периодическим сонофорезом и 30 минут после удаления остатков ОК с поверхности кожи без каких-либо дополнительных воздействий. В качестве контроля ОКТ-сканирование исследуемой кожи проводилось перед началом каждого эксперимента.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

На рисунке 1 продемонстрированы примеры ОКТ-изображений кожи до начала эксперимента и после суммарного 6-минутного УЗ облучения с использованием воды. На снимке интактной кожи видно, что граница эпидермиса и дермы не различима или сложно различима. После облучения УЗ граница эпидермис – дерма становится более выражена, можно заметить появление оптических неоднородностей при облучении кожи УЗ (выделены жёлтым). Эти неоднородности могут быть отнесены к лимфатическим и кровеносным микрососудам.



Рис.1. Типичные ОКТ изображения кожи тыльной стороны ладони человека: а) до обработки и спустя 30 минут наблюдения при облучении УЗ в режиме б) 1 МГц, 1 Вт/см², 50%, в) 1 МГц, 1 Вт/см², cont, г) 1 МГц, 2 Вт/см², cont, д) 3 МГц, 1 Вт/см², cont, е) 3 МГц, 2 Вт/см² 50%. Где cont соответствует непрерывному режиму облучения, 50% – импульсному, при котором длительность импульса составляет 0.5 с, период 1 с. Красным обозначена оптическая толщина эпидермиса, жёлтым выделены некоторые оптические неоднородности.

На рисунке 2 представлена кинетика глубины зондирования ОКТ и ЭОП при облучении кожи УЗ. На рисунке 2 (б, г) отсутствует режим УЗ воздействия 3 МГц и 2 Вт/см² в непрерывном режиме, поскольку он вызывал болезненные ощущения в течение уже первых 10 с облучения.



Рис.2. а и б) Зависимость максимальной оптической глубины зондирования от времени, в и г) ЭОП при облучении кожи УЗ с частотой а и в) 1 МГц, б и г) 3 МГц

На рисунке 3 продемонстрированы примеры ОКТ-изображений кожи до начала эксперимента и через 30 минут после нанесения олеиновой кислоты и сонофореза с различными параметрами облучения.

На рисунке 4 представлена кинетика изменения глубины зондирования ОКТ, ЭОП и время достижения 20% ЭОП при нанесении ОК и облучении кожи УЗ. Полученные результаты ОКТ мониторинга свидетельствуют о повышении эффективности оптического просветления при применении сонофореза и олеиновой кислоты, наличие просветляющего эффекта сохраняется на более чем 30 минут после окончания облучения УЗ и удаления с поверхности кожи остатков олеиновой кислоты.



Рис.3. Типичные ОКТ изображения кожи тыльной стороны ладони человека: а) до обработки, б) спустя 30 минут после нанесения олеиновой кислоты и спустя 30 минут после нанесения олеиновой кислоты и облучении непрерывными УЗ волнами в режиме в) 1 МГц, 1 Вт/см², г) 1 МГц, 2 Вт/см2 и д) 3 МГц, 1 Вт/см²



Рис.4. а) Зависимость максимальной оптической глубины зондирования от времени, б) ЭОП и в) время достижения 20% ЭОП при облучении кожи УЗ

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Впервые получены статистически значимые результаты, свидетельствующие о долговременном оптическом просветлении кожи человека под действием УЗ облучения *in vivo*. Наибольшая эффективность (26 ± 8%) достигнута при использовании параметров УЗ: 1 МГц, 2 Вт/см² в непрерывном режиме.

Получена оценка влияния параметров УЗ на просветление кожи человека с помощью ОК. Результаты свидетельствуют о статистически значимом

повышении ЭОП при применении сонофореза и ОК. Максимальная ЭОП составила 35 ± 6% спустя 30 минут после нанесения олеиновой кислоты и сонофореза при параметрах облучения 1 МГц, 2 Вт/см² в непрерывном режиме. Время достижения 20% ЭОП вдвое меньше при использовании сонофреза с частотой 3 МГц и интенсивностью 1 Вт/см² по сравнению со случаем без облучения УЗ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. I. Costantini, R. Cicchi, L. Silvestri, F. Vanzi, and F. S. Pavone. In-vivo and exvivo optical clearing methods for biological tissues: review // Biomed. Opt. Express, 2019, vol. 10, no. 10, pp. 5251 5267.
- Genina E.A., Bashkatov A.N., Sinichkin Yu.P., Yanina I.Yu., Tuchin V.V. Optical Clearing of Tissues: Benefits for Biology, Medical Diagnostics and Phototherapy // Chapter 10 in: Handbook on Optical Biomedical Diagnostics, Vol. 2: Methods, 2nd ed., Valery V. Tuchin, Bellingham, Washington: SPIE Press, 2016, pp. 565-937.
- Polat B. E., Hart D., Langer R., and Blankschtein D. Ultrasound-mediated transdermal drug delivery: mechanisms, scope, and emerging trends // J. Control. Release, 2011, vol. 152, no. 3, pp. 330 348.
- 4. Акопян В.Б. Основы взаимодействия ультразвука с биологическими объектами. // М.: Изд-во МГТУ имени Н.Э. Баумана, 2005. 224 с.
- 5. Тучин В.В. Оптика биологических тканей: методы рассеяния света в медицинской диагностике / В. В. Тучин // М.: Физматлит, 2011. 812 с.

THE INFLUENCE OF ULTRASOUND PARAMETERS OF THE THERAPEUTIC FREQUENCY RANGE ON THE OPTICAL PROPERTIES OF HUMAN SKIN AND ON THE EFFICIENCY OF IMMERSION OPTICAL CLEARING IN VIVO

<u>Yu. I. Surkov</u>¹, I.A. Serebryakova¹, A.N. Bashkatov^{1,2}, V.V. Tuchin^{1,2,3}, E.A. Genina^{1, 2}

¹Saratov State University (410012, Saratov, 83 Astrakhanskaya str.) ²National Research Tomsk State University (634050, Tomsk, 36 Lenin Av.) ³Institute of Precision Mechanics and Control, RAS (24 Rabochaya str., Saratov, Russia, 410028) e-mail: surkov9898@gmail.com

The paper presents the results of experimental studies of the effect of ultrasonic (US) irradiation (at frequencies of 1 and 3 MHz with a power density of 0.5 - 2 W/cm² in continuous and pulsed modes) on the optical characteristics of human skin *in vivo* and on the efficiency of immersion optical clearing. The parameters of ultrasound irradiation of the skin are determined, which are sufficient for observing the optical clearing using optical coherence tomography (OCT). It was found that ultrasound irradiation without an immersion agent with parameters of 1 MHz, 2 W/cm² in a continuous mode increased the OCT probing depth by approximately 1.3 times for 5 min, while the optical clearing efficiency was $26 \pm 8\%$. The combined use of ultrasound with oleic acid as an immersion agent made it possible to increase the optical probing depth by an average of 1.4 times and the optical clearing efficiency to $35 \pm 6\%$.

Keywords: ultrasound, OCT, optical clearing.

ПРИМЕНЕНИЕ НАНОКОМПОЗИТОВ ИЗ ХИТОЗАНА И ТЮ₂ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ПРОЦЕССОВ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКОГО РАЗЛОЖЕНИЯ ОТДЕЛЬНЫХ ПРЕДСТАВИТЕЛЕЙ ПАУ

Д.А. Татаринов, С.Р. Сокольникова

Калининградский государственный технический университет, (236022, г. Калининград, Советский проспект, 1) e-mail:<u>dan.tatarinov@mail.ru</u>

В настоящей работе исследовано влияние фотокаталитической добавки TiO₂ снижение концентрации полициклических ароматических на углеводородов (ПАУ) в окружающей среде. Для изучения процессов фотокаталитического разложения представителей ПАУ пирена и антрацена с помощью TiO₂ были использованы нанокомпозиты на основе хитозана. анализ образцов Проведен люминесцентный для оценки снижения концентраций ПАУ. Доказана эффективность использования полученных нанокомпозитов для фотокаталитического разложения пирена и антрацена.

Ключевые слова: диоксид титана, фотокатализатор, полициклические ароматические углеводороды, пирен, антрацен, хитозан.

1. ВВЕДЕНИЕ

ПАУ более относятся К соединениям, содержащих два И конденсированных бензольных колец в молекуле, которые присутствуют в окружающей среде повсеместно. ПАУ являются опасными загрязнителями и классифицируются как соединения со значительным риском для здоровья человека [1]. ПАУ представляют опасность даже в небольших количествах изза свойства биоаккумуляции. Установлено, что при превышении содержания веществ группы ПАУ в окружающей среде многократно возрастает риск развития онкологических заболеваний [2]. В связи с этим актуальным представляется исследование методов разложения ПАУ, в частности, в процессе фотокаталитических реакций [3].

В качестве фотокатализатора в настоящей работе был использован TiO_2 , который обладает высокой фотоактивностью и демонстрирует потенциальные преимущества при окислении экотоксикантов, в том числе ПАУ, SO_2 , NO_2 и др. [4]. Известно, что материалы с добавлением TiO_2 позволяют значительно улучшать состояние окружающей среды. В связи с этим TiO_2 находит применение в области воздухо- и водоочистки [5]. Так, например, в

строительной индустрии ведутся исследования по разработке инновационного строительного материала, содержащего фотокатализатор TiO₂. Технологии фотокатализа делают возможным производство строительных материалов с передовыми функциями, такими как самоочищение, очистка воздуха и самостерилизация поверхности [6].

При использовании TiO₂ для очистки водных сред в процессе фотокатализа генерируются гидроксильные радикалы, которые выступают в качестве окислителя. В связи с этим токсичные загрязнения, содержащихся в очищаемой воде, разлагаются до безвредных неорганических составляющих без образования вторичных отходов. [5]

Таким образом, целью настоящей работы является изучение эффективности деградации отдельных представителей ПАУ в присутствии фотокатализатора TiO₂ при его использовании в составе нанокомпозитов хитозан-TiO₂.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

В природе TiO₂ имеет три различных типа кристаллической структуры: анатаз, рутил и брукит. Известно, что хорошую фотокаталитическую активность проявляет TiO₂ в фазе анатаза с шириной запрещенной зоны 3,2 эВ. При поглощении фотона с энергией равной или превышающей ширину запрещенной зоны в TiO₂ может произойти переход электрона из валентной зоны в зону проводимости. После этого происходит образование электроннодырочных пар из-за образовавшихся свободных вакансий в валентной зоне. Созданная электронно-дырочная пара имеет достаточное время жизни в наносекундном режиме для передачи заряда адсорбированным частицам на поверхности полупроводника [7]. Затем возбужденные электроны в зоне проводимости и дырки в валентной зоне рекомбинируют с последующим рассеянием энергии в виде тепла. В случае, если для улавливания электрона или дырки доступны подходящие поглотители, могут происходить последующие окислительно-восстановительные реакции [8].

Фотодеградация ПАУ в водных средах с участием TiO_2 активно изучается в последнее время. Авторами [9] отмечается, что TiO_2 может эффективно фотокатализовать окисление ПАУ, таких как антрацен, флуорен и нафталин, при облучении искусственным или солнечным светом. В работе [10] исследовали фотокаталитическое разложение смеси из 16 ПАУ в водных суспензиях TiO_2 с большой площадью поверхности, освещенной ультрафиолетовым светом. Для повышения коэффициента использования

TiO₂ авторы [11] предложили фотокаталитическое разложение нафталина в воде с использованием TiO₂ на стеклянных кольцах Рашига. В исследовании [12] было изучено фотокаталитическое разложение водных растворов нафталина и антрацена в тонком слое частиц TiO₂ на стеклянных подложках. На сегодняшний день некоторые биополимерные материалы с нанодисперсным TiO₂ используются для улучшения функциональных свойств нанокомпозитов и увеличения фотокаталитической активности TiO₂ [13].

В настоящей работе в качестве основы для изготовления нанокомпозитов и исследования фотокаталитических свойств TiO₂ были использованы твердые матрицы из хитозана, ранее разработанные авторами. Была доказана высокая адсорбционная способность изготовленных матриц, что представляет интерес для изучения процессов фотокаталитического разложения отдельных представителей ПАУ. [14]

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

В проведенном эксперименте был использован метод твердофазной люминесценции (ТФЛ). Анализируемое вещество концентрируется на твердой матрице, благодаря чему возможно люминесцентное определение образца в фазе сорбента, что, в свою очередь, обеспечивает увеличение чувствительности метода [15]. Для проведения люминесцентного анализа использовалась установка Флюорат-02-Панорама.

В качестве представителей ПАУ были выбраны пирен и антрацен (Fluka, Германия). Для солюбилизации ПАУ был применен водный раствор диоктил натрия диоктилсульфосукцината (ДСН) в концентрации 10⁻² М. Концентрация выбранных представителей ПАУ в приготовленных растворах составляла 10⁻⁴ М.

Разработанные матрицы из хитозана [14] были использованы как основа для изучения фотокаталитических свойств нанодисперсной добавки TiO_2 (ОСЧ 7-3, Промхим, Россия). Для статической сорбции полученных растворов ПАУ были изготовлены матрицы с добавлением TiO_2 и контрольные матрицы из хитозана. Во время статической сорбции растворы ПАУ с нанокомпозитами хитозан- TiO_2 и контрольные образцы в течении 50 минут подвергались воздействию УФ излучения (лампа Camelion 26 Вт, 365-395 нм).

Спектры люминесценции антрацена в мицеллярном растворе ДСН и пирена в мицеллярном растворе ДСН до и после статической сорбции матриц из хитозана представлены на рис. 1 и 2.





1 - исходного раствора антрацена C=10⁻⁴ М после УФ обработки; 2 раствора после статической сорбции на матрицы из хитозана и УФ обработки; 3 - раствора после статической сорбции на нанокомпозит хитозан-TiO₂ и УФ обработки

По результатам люминесцентного анализа можно сделать вывод, что интенсивность люминесценции растворов ПАУ после статической сорбции на матрицах из хитозана и TiO_2 под УФ излучением снижается на 35% по сравнению с интенсивностью ПАУ после статической сорбции на контрольных матрицах под УФ излучением. Таким образом, фотокатализатор TiO_2 значительно ускоряет процесс окисления ПАУ.



Рис. 2. Спектры люминесценции:

1 - исходного раствора пирена C=10⁻⁴ М после УФ обработки; 2 - раствора после статической сорбции на матрицы из хитозана и УФ обработки; 3 раствора после статической сорбции на нанокомпозит хитозан-TiO₂ и УФ обработки

Для оценки скорости деградации ПАУ в процессе фотокаталитических реакций были построены графики (рис. 3) отношения интенсивности люминесценции образцов ПАУ за время УФ-облучения t к начальной интенсивности люминесценции образцов ПАУ до обработки УФ излучением ($t_0=0$ мин).

Как видно из графиков, эффективность фотодеградации пирена и антрацена на нанокомпозитах хитозан-TiO₂ достигает 50% и 37% соответственно после 50 минут обработки УФ излучением. В целом, кинетические исследования подтверждают, что нанокомпозиты хитозан-TiO₂ эффективны для разложения отдельных представителей ПАУ.



Рис. 3. Кинетические кривые фотокаталитического разложения: 1 - пирена в растворе ДСН; 2 - пирена на нанокомпозитах хитозан-TiO₂; 3 - антрацена в растворе ДСН; 4 - антрацена на нанокомпозитах хитозан-TiO₂

Эффективность полученных нанокомпозитов можно объяснить тем, что молекулы пирена активно адсорбируются на поверхности TiO₂ в течение всего процесса фотокаталитической реакции из-за его чрезвычайно низкой растворимости в воде и сильной адсорбции на TiO₂ [16]. Также ранее авторами [14] была доказана высокая солюбилизационная способность твердых матриц на основе хитозана, что в свою очередь дополнительно повышает эффективность фотокаталитических реакций в нанокомпозитах хитозан-TiO₂.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Серия проведенных экспериментов свидетельствует об эффективности разложения отдельных представителей ПАУ благодаря фотокаталитическим свойствам TiO_2 и доказывает целесообразность применения TiO_2 в качестве фотокатализатора. Данные результаты могут быть использованы для исследований в области модификации фотокатализатора TiO_2 , а именно для исследований возможности улучшения фотокаталитических свойств TiO_2 .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Kalf D.F., Crommentuijn T., Plassche E.J., Environmental Quality Objectives for 10 Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAHs) // Ecotoxicology and Environmental Safety. 1997. Vol. 36, № 1. P. 89–97.
- Kim K.-H. et al., A review of airborne polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) and their human health effects // Environment International. 2013. Vol. 60. P. 71–80.
- Zhang L. et al., Photocatalytic degradation of polycyclic aromatic hydrocarbons on soil surfaces using TiO₂ under UV light // Journal of Hazardous Materials. 2008. Vol. 158, № 2-3. P. 478–484.
- 4. Hamdany A.H., Photocatalytic cementitious material for self-cleaning and antimicrobial application.
- Кофман В.Я., Новые окислительные технологии очистки воды и сточных вод (часть 1) (обзор зарубежных изданий) // Водоснабжение и санитарная техника. – 2013. – №10 – С.68-78
- 6. Zhu W., Bartos P.J.M., Porro A., Application of nanotechnology in construction // Materials and Structures. 2004. Vol. 37, № 9. P. 649–658.
- Linsebigler A.L., Lu G., Yates J.T., Photocatalysis on TiO₂ Surfaces: Principles, Mechanisms, and Selected Results // Chemical Reviews. 1995. Vol. 95, № 3. P. 735–758.
- 8. Hoffmann M.R. et al., Environmental Applications of Semiconductor Photocatalysis // Chemical Reviews. 1995. Vol. 95, № 1. P. 69–96.
- Dass S., Muneer M., Gopidas K., Photocatalytic degradation of wastewater pollutants. Titanium-dioxide-mediated oxidation of polynuclear aromatic hydrocarbons // Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry. 1994. Vol. 77, № 1. P. 83–88.
- Ireland J.C. et al., Heterogeneous photocatalytic decomposition of polyaromatic hydrocarbons over titanium dioxide // Chemosphere. 1995. Vol. 30, № 5. P. 965–984.
- M.J. Garcia-Martinez, et al., Continuous photodegradation of naphthalene in water catalyzed by TiO₂ supported on glass Raschig rings, Chem. Eng. J. 110 (2005) p. 123–128.
- Pal B., Sharon M., Photodegradation of polyaromatic hydrocarbons over thin film of TiO₂ nanoparticles; a study of intermediate photoproducts // Journal of Molecular Catalysis A: Chemical. 2000. Vol. 160, № 2. P. 453–460.

- Siripatrawan U., Kaewklin P., Fabrication and characterization of chitosantitanium dioxide nanocomposite film as ethylene scavenging and antimicrobial active food packaging // Food Hydrocolloids. 2018. Vol. 84. P. 125–134.
- 14. Tatarinov D., Sokolnikova S., Myslitskaya N., Solid-phase luminescence of pyrene in chitosan adsorbents // Laser and optical technologies in biomedicine and ecology Journal of Biomedical Photonics & Engineering. 2020. Vol. 6, № 1.
- 15. С. Р. Сокольникова, Д. А. Татаринов, Н. А. Мыслицкая. Изменение люминесцентных свойств пирена в растворе поверхностно–активного вещества в присутствии сывороточного альбумина // Ученые записки физического факультета МГУ. 2019. № 4. С. 1941101.
- David B., Boule P., Phototransformation of hydrophobic pollutants in aqueous medium I-PAHs adsorbed on silica // Chemosphere. 1993. Vol. 26, № 9. P. 1617–1630.

APPLICATION OF CHITOSAN-TiO₂ NANOCOMPOSITES TO STUDY THE PROCESSES OF PHOTODEGRADATION OF SOME PAHs

D.A. Tatarinov, S.R. Sokolnikova

Kaliningrad State Technical University, (236022, Kaliningrad, Sovetsky prospect, 1) e-mail: <u>dan.tatarinov@mail.ru</u>

In this work, we investigated the effect of the photocatalytic addition of TiO_2 on the decrease in the concentration of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in the environment. Chitosan-based nanocomposites were used to study the processes of photocatalytic decomposition of the PAHs pyrene and anthracene using TiO_2 . Luminescence analysis of the samples was carried out to assess the decrease in PAH concentrations. The efficiency of using the obtained nanocomposites for the photocatalytic decomposition of pyrene and anthracene has been proved.

Keywords: titanium dioxide, photocatalyst, polycyclic aromatic hydrocarbons, pyrene, anthracene, chitosan.

СПЕКТРАЛЬНАЯ ОЦЕНКА КОРТИКАЛЬНОЙ КОСТНОЙ ТКАНИ КРЫС ПРИ АНТИОРТОСТАТИЧЕСКОМ ВЫВЕШИВАНИИ

<u>Г.П. Тихомирова</u>¹, О.О. Фролов¹, Е.В. Тимченко¹, П.Е. Тимченко¹, Е.В. Писарева¹

¹Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева (Самарский университет), 443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34.

e-mail: laser-optics.timchenko@mail.ru

В работе представлены результаты исследования кортикальной костной ткани у крыс при антиортостатическом вывешивании. Исследовались образцы костей крыс самок и самцов с моделью остеопороза при лечении гидроксиапатитом с помощью метода спектроскопии комбинационного рассеяния. Установлены спектральные различия между исследуемыми образцами (контрольные образцы, образцы с моделью остеопороза, образцы с моделью остеопороза при лечении ГАП).

Ключевые слова: спектроскопия комбинационного рассеяния, кортикальная костная ткань, вывешивание, гидроксиапатит.

1. ВВЕДЕНИЕ

Микрогравитация, которую испытывают космонавты BO время космических полетов, костной вызывает ускоренную потерю массы, происходит нарушение минерального обмена костной ткани, приводящее к развитию остеопороза. Процесс адаптации костной ткани к условиям микрогравитации выражается в её ремоделировании, сопровождается изменением кинетики кальция [1] и отклонением уровня биохимических маркеров метаболизма. Их динамика может дать ценную информацию о балансе процессов резорбции и новообразования кости после космического полета и в восстановительном периоде. Развитие метаболических изменений в скелетно-мышечной системе может быть связано со снижением нагрузки на опорно-двигательный аппарат. Эти процессы В ДКП проявляются: повышением белкового катаболизма, отрицательным балансом азота и экскреции некоторых аминокислот, с одновременным увеличением изменением активности ряда гормонов. Модель ортостатической разгрузки задних конечностей грызунов позволяет оценить в эксперименте последствия воздействия микрогравитации на обмен костной ткани.

Поэтому важной актуальной задачей является анализ костной ткани при моделировании остеорезорбции в антиортостатическом вывешивании и поиск новых способов профилактики и лечения остеопороза.

При изучении остеопороза особое внимание уделяется содержанию костной массы, чье изменение может привести к снижению прочности кости. Одним из недостатков распространенного метода рентгеновской костной денситометрии является системная ошибка из-за неравномерности содержания жира в жиросодержащих тканях (жир и желтый костный мозг) различных участков тела и костей. Также отмечено, что если позвонки не содержат достаточного количества минералов, то при DXA прибор может не признать позвонки за кость [2]. Методы спектроскопии считаются сегодня наиболее перспективными В современной неинвазивной оптической диагностике, прежде всего в медицине.

Целью работы является применение метода спектроскопии комбинационного рассеяния для спектральной оценки костной ткани при моделировании остеорезорбции в условиях антиортостатического вывешивания.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

Эксперимент проводили на взрослых беспородных лабораторных крысах обоего пола, которые были поделены на группы в соответствии со следующей схемой исследования. Лабораторные животные первой группы были подвержены воздействию антиортостатического вывешивания в течение 28 суток по методу Новикова-Ильина. Во вторую группу входили животные, подвергавшиеся антиортостатическому вывешиванию и глюкокортикоидов в течение 28 суток. Третья и четвертая группы аналогичны первой и второй, с дополнительным введением гидроксиапатита в дозе 100 мг/кг массы тела. Пятая группа – интактные животные (контроль).

В динамике животных выводили из эксперимента путем декапитации. Материалом для исследования послужили сыворотка крови и образцы бедренных, плечевых, тазовых, лопаточных и нижнечелюстных костей.

Образцы исследовали с помощью стенда, реализующего метод СКР, описанный в статье [3].Обработка полученных спектров КР была выполнена в программе WolframMathematica 9. Так же был проведен биохимический анализ, результаты которого подробно приведены в статье [4].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

На рисунке 2 представлены усредненные спектры КР, полученные при исследовании плечевых костей крыс самок и самцов с моделью остеопороза и с лечением гидроксиапатитом.



I – Самки: 1 – вывешивание в течение 20 суток; 2 – вывешивание в течение 28 суток + глюкокортикоиды в дозе 40 мг/кг ежедневно; 3 – вывешивание в течение 15 суток + глюкокортикоиды в дозе 40 мг/кг
ежедневно; 4 – вывешивание в течение 28 суток + глюкокортикоиды в дозе 40 мг/кг
40 мг/кг ежедневно + гидроксиапатит в дозе 100 мг/кг однократно в первый день;

II – Самцы: 5 – контроль; 6 – вывешивание в течение 45 суток; 7 – вывешивание в течение 28 суток + глюкокортикоиды в дозе 40 мг/кг ежедневно; 8 – вывешивание в течение 45 суток + гидроксиапатит в дозе 100 мг/кг однократно в первый день.

Рис. 2. Усредненные спектры кортикальных плечевых костей крыс

Как видно из рисунка 2, основные спектральные различия между моделью остеопороза и моделью остеопороза с лечением ГАП наблюдаются на линиях 855 см⁻¹ (Hydroxyproline v(C–C) stretch), 956 см⁻¹ (PO₃⁻⁴ P–O symmetric stretch), 1069 см⁻¹ (Carbonate CO_3^2 - v1).

Увеличение гидроксипролина в контрольных образцах и образцах с лечением ГАП, соответствующее линии 855 см⁻¹ может свидетельствовать о снижении резорбтивных процессов в кости.

Минеральная составляющая костной ткани, соответствующая линиям 956 см⁻¹ и 1069 см⁻¹ отвечают за качество и прочность кости. Жесткость и модуль изгиба кости существенно зависят от степени минерализации, минеральной кристалличности и замещения карбоната В-типа. Усиление замещения карбоната В-типа при остеопорозе приводит к увеличению хрупкости костей.

Амид III и амид I, представленные основными линиями на 1245 см⁻¹, 1270 см⁻¹ и 1665 см⁻¹ соответственно, отнесены к коллагеновым структурам, значительно не меняются при сравнении контрольных и образцов с моделью остеопороза самок и самцов.

Для более детального анализа был проведено разделение линий КР, нормированных на интенсивность линии 1739 см⁻¹ (Phospholipids) с помощью метода линейного дискриминантного анализа (LDA). Данный метод реализован в программной среде SPSS Statistics 23. Результаты анализа различий групп образцов костных тканей с представлены в виде набора данных трех моделей: графики счетов (рисунок 3, 5, 7) и графики наиболее информативных переменных структурной матрицы (рисунок 4, 6, 8).

Анализ взаимосвязи групп объектов по признакам влияния ежедневной дозы 40 мг/кг глюкокортикоидов представлен на рисунке 3. Показано, что образцов основные отличия между двумя группами описывает функция 121 LD-1. Выборка дискриминантная составляет спектр комбинационного рассеяния. Положительные значения LD-1 в главной степени характерны для спектров КР, полученных для образцов под влиянием дозы глюкокортикоидов группы, и наоборот отрицательные ДЛЯ контрольной группы образцов. Области групп имеют значительное пересечение, влияющее на процент корректно классифицированных объектов при кросс-проверке.



Рис. 3. График значений линейных дискриминантных функции для образцов костной ткани, разделение по признаку влияния дозы



Рис. 4. График значений структурной матрицы для дифференциации образцов по признаку влияния дозы глюкокортикоидов

Распределения значений функции для групп были аппроксимированы функцией нормального распределения.

Наиболее значимые различия между группами образцов описывают линии КР, представленные на рисунке 4 и имеющие наибольшее значение нормированного коэффициента канонической дискриминантной функции LD – 1 по модулю.

Чем выше значение LD-1 для переменной, тем в большей степени она влияет на наблюдаемую разницу в компонентном составе, что, например, видно из значения коэффициента k956, соответствующая P-O symmetric stretch $PO_4^{3-}(v1)$ гидроксиапатита. Аналогично в костной ткани преобладают относительные интенсивности линий KP 1000 см⁻¹ proline and hydroxyproline, 1031 см⁻¹ phenylalanine, а также линия 1067 см⁻¹, соответствующая C-O in plane stretch карбонат-иона гидроксиапатита CO_3^{2-} (v1). Относительные интенсивности этих линий выше в образцах под влиянием глюкокортикоидов.

Точность классификации составляет 77,7%, 63,6% перекрестно проверенных сгруппированных наблюдений классифицированы правильно.

На рисунке 5 и 6 представлены основные различия в спектральном составе костной ткани животных различных полов. Положительные значения LD-1 характерны для группы костной ткани самцов. Для группы образцов костной ткани самок характерны более высокие относительные интенсивности линий гидроксиапатита 956, 1031 и 1067 см⁻¹, амида I (k1659) и линии 1448 см⁻¹(CH2 bending and scissoring modes of collagen).

Для группы образцов костной ткани самцов преобладают относительные интенсивности линий амида III и амида II, 1130 см⁻¹(lipid), 1202 см⁻¹ (phenylalanine) 1168 см⁻¹(v(C-O-C) symmetric stretch) 1101 см⁻¹ (CO₃²⁻ (v1) замещение А-типа).



Рис. 5. График значений линейных дискриминантных функции для образцов костной ткани, разделение по полу животных

Точность классификации составляет 87,6% и 77,7%.



Рис. 6. График значений структурной матрицы для дифференциации образцов по признаку полу животных

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведена деконволюция спектров методом подбора спектрального контура и деконволюции функции Гаусса в программной среде MagicPlotPro 2.7.2., что позволило провести расширенный компонентный качественный и количественный анализ костной ткани у крыс в условиях микрогравитации. Установлены основные спектральные различия исследуемых объектов (контрольные образцы, образцы с моделью

остеопороза, образцы с моделью остеопороза при лечении гидроксиапатитом), наблюдающиеся на линиях 855 см⁻¹, 956 см⁻¹, 1069 см⁻¹.

Полученные результаты впоследствии могут быть применены для профилактики и лечения остеопороза у космонавтов, поддержания здоровья экипажей во время длительных межпланетных миссий, а также для коррекции нарушений минерального гомеостаза и других заболеваний, связанных с нарушением костно-хрящевого метаболизма и минерального гоеостаза.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Hildebrand T., Ruegsegger P. Quantification of bone microarchitecture with the structure model index // Comput.' Methods Biomech. Biomed. Engin. 1997. N1. P.15
- Серёгина Е.С., Оценка влияния янтарной кислоты и соединений цинка на параметры метаболизма головного мозга крыс методом флуоресцентной спектроскопии [Текст] / Е.С. Серёгина, О.А. Стельмащук, Г.А. Пьявченко, А.Г. Алексеев, Е.В. Воробьёв // Технологии живых систем, 2018. - № 5 (15). – С. 37-46.
- P. E. Timchenko, E. V. Timchenko, D. A. Dolgushkin, L. T. Volova, and M. D. Markova Application of Raman spectroscopy to assess the condition of bone and cartilaginous biopsy specimens // Journal of Optical Technology, 2017, Vol. 84, Issue 6, pp. 423-425
- Тимченко Е.В. Спектральный анализ костной ткани крыс при длительном антиортостатическом вывешивании и введении аллогенного гидроксиапатита: Журнал «Оптика и спектроскопия»/ Е.В. Тимченко, П.Е. Тимченко, Е.В. Писарева, М.Ю. Власов, Л.Т. Волова, О.О. Фролов, Я.В. Федорова, Г.П. Тихомирова, Д.А. Романова, М.А. Даниэль. 2020, том 129, вып. 1, DOI: 10.21883/000000000

SPECTRAL EVALUATION OF RAT CORTICAL BONE TISSUE DURING ANTIORTHOSTATIC HANGING

E. V. Timchenko¹, P. E. Timchenko¹, E. V. Pisareva¹, O. O. Frolov¹, <u>G. P. Tikhomirova¹</u>

¹ Samara national research University named after academician S. P. Korolev (Samara University), 34 Moskovskoe shosse str., Samara, 44301 Samara national research University named after academician S. p. Korolev (Samara University), 34 Moskovskoe shosse str., Samara, 443086 e-mail: laser-optics.timchenko@mail.ru

This paper presents the results of a study of cortical bone tissue in rats with anti-orthostatic hanging. Bone samples of female and male rats with a model of osteoporosis in the treatment of hydroxyapatite using Raman spectroscopy were studied. Spectral differences between the studied samples (control samples, samples with the model of osteoporosis, samples with the model of osteoporosis in the treatment of HAP) were established.

Keywords: Raman spectroscopy, cortical bone tissue, hanging, hydroxyapatite.

ЭЛЕКТРООПТИКА СМЕКТИЧЕСКОЙ С* СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ФАЗЫ С СУБВОЛНОВЫМ ШАГОМ СПИРАЛИ, ИНДУЦИРОВАННОЙ В НЕМАТИЧЕСКОМ ЖИДКОМ КРИСТАЛЛЕ ХИРАЛЬНЫМИ НЕМЕЗОГЕННЫМИ ДОБАВКАМИ

<u>Т.П. Ткаченко</u>^{1,2}, Е. П. Пожидаев^{1,2}, С. И. Торгова¹, Е. М. Будынина^{1,3}, А. В. Кузнецов^{1,2}, В. А. Барбашов¹

 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)
³ Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, Химический факультет (119991, г. Москва Ленинские горы, д. 1, стр. 3) e-mail: tptkachenko@lebedev.ru

Разработаны хиральные смектические С* (SmC*) сегнетоэлектрические жидкие кристаллы с коротким шагом спирали p₀<150 нм, полученные смешиванием нематического жидкого кристалла (НЖК) и хиральных немезогенных соединений. Возникновение фазы SmC* в смесях подтверждено оптическими И электрооптическими диэлектрическими, измерениями. Предлагаемый способ получения смектических С* материалов позволяет создавать инновационные электрооптические среды, сочетающие механическую устойчивость НЖК, однородную ориентацию и высокую частоту переключения сегнетоэлектрических жидких кристаллов (до 3 кГц).

Ключевые слова: сегнетоэлектрические жидкие кристаллы, хиральные добавки, нематическая матрица, шаг спирали, электрооптика спиральных наноструктур.

1. ВВЕДЕНИЕ

Смектические С* сегнетоэлектрические жидкие кристаллы (СЖК) привлекают внимание ученых и инженеров благодаря своему потенциалу в быстродействующих дисплеях и фотонных устройствах различного назначения, работающих в микросекундном диапазоне. Простейшим методом

создания СЖК-композиций с требуемыми свойствами является добавление хиральной примеси в нехиральную смектическую С матрицу [1].

Основной задачей настоящей работы является разработка СЖКматериала с коротким (субволновым) шагом спирали по описанной выше методике. Такой вид СЖК – материалов пригоден для использования их в деформированном электрическим полем спиральном смектике С* в электрооптическом режиме DHF (deformed helix ferroelectric) [2], что благоприятно для следующих применений: в дисплеях с последовательным чередованием цветов подсветки, для генерации осесимметричных вихревых световых полей, для модуляции состояния поляризации света, что отличает их от материалов, указанных в работе [3], которые пригодны для использования только в режиме поверхностно-стабилизированных ЖК.

2. ОБЬЕКТЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Была разработана двухкомпонентная нематическая матрица на основе бифенилпиримидина (I), (ВРР-87) и фенилпиримидина, (РР-608), фазовая диаграмма которой представлена на рис. 1 а).



В качестве хиральных добавок выступали Бис[(1S)-1-метил-2-{[(1S)-1-метилгептил] Окси}-2 - оксоэтил] 1,1':4',1"-терфенил-4,4"-дикарбоксилат (III) и Бис[(1S)-1-метил-2-{[(1S)-1-метилоктил]Окси}-2-оксоэтил] 1,1':4',1"-терфенил-4,4"-дикарбоксилат (IV)

Ячейки СЖК с однородной планарной ориентацией были изготовлены с использованием натертого полиимида PMDA-ODA в качестве ориентирующих слоев, покрывающих слои оксида индия-олова (ITO), нанесенные на стеклянные подложки. Зазор собранных ячеек формировали стеклянными спейсерами, а затем фиксировали эпоксидным клеем. Ячейки заполнялись СЖК в изотропной фазе под действием капиллярных сил.

Измерения шага спирали проводились на ячейках с гомеотропной фазе SmC* ориентированы ориентацией (ось спирали смеси В перпендикулярно подложкам). Шаг спирали измерялся ПО угловой зависимости селективного отражения от фазы SmC*.

Температуры фазовых переходов определяли с помощью термоступенчатого аппарата Меттлер-Толедо (Грайфензее, Швейцария) FP-5 с

поляризационным микроскопом Leitz (Wetzlar, Германия), что также позволяет делать микрофотографии текстур жидких кристаллов, и методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) с помощью прибора Perkin-Elmer (Waltham, Maccaчуcetc, США) DSC-7.



Рис. 1. Фазовая диаграмма смесей: а) пиримидинов (I) и (II). Эвтектическая смесь нематической фазы (ЭСНМ) составляет 20 молярных % соединения BBP-87 и 80 молярных % соединения PP-608; б) матрицы ЭСНМ и хиральной добавки IV, полученная при нагревании смесей из кристаллической фазы [4]

Спонтанную поляризацию Ps измеряли методом интегрирования токов переполяризации по времени, а вращательную вязкость γ_{φ} оценивали по измерениям электрооптического времени отклика и P_s.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Разработаны различные смеси, содержащие бинарную эвтектическую нематическую матрицу (БЭНМ) и синтезированные хиральные добавки различных концентраций.

Фазовая диаграмма (рис 1. б) показывает, что при использовании добавки (IV) с концентрацией 3,2 моль % и температурой Т, равной 22,3 °C, возникает

эвтектическая смесь индуцированного смектика С*. У примеси (III) фазовая диаграмма очень похожа, но эвтектическая смесь возникает с концентрацией, равной 9,1 моль%.

При концентрациях хиральной добавки IV, отличных от эвтектики, существует широкий температурный диапазон двухфазной области Cr SmC* (рис. 1 б)). Однако, при охлаждении смесей из изотропной фазы, фаза SmC* существует в переохлажденном состоянии (без двухфазной области) до +15 ° C, обычно в течение нескольких дней.

Измерялись температурные зависимости шага спирали смесей SmC* при различных концентрациях хиральной добавки IV (рис. 2 а). Отметим, что шаг спирали $p_0 = 100$ нм измерялся при концентрации добавки, равной 9,1 моль% (не эвтектической), и температуре 17 ⁰C.



Рис. 2. Зависимости шага спирали смесей Sm C* (матрица ЭСНМ и хиральная добавка IV) от концентрации хиральной легирующей добавки и температуры (а) и (б) зависимости спонтанной поляризации эвтектической смеси (ЭСНМ и хиральная добавка III) от температуры при нагреве от кристалла до изотропной фазы и охлаждении [4].

Одной из наиболее информативных характеристик хиральных легирующих добавок является их закручивающая способность (HTP):

$$HTP = \frac{1}{p_0 C} \tag{1}$$

где С - концентрация хиральной добавки.

Для хиральной добавки *IV*, при C = 9,1 моль% и температуре 17 °C *HTP* \approx 109 мкм⁻¹. Для сравнения, максимальный *HTP*, известный ранее для хиральных добавок, был оценен как 46 мкм⁻¹. Для хиральной добавки (III) в

ЭСНМ величина НТР, равна 78 мкм⁻¹, что подтверждается данными, представленными на рис. 2 б), где $p_0 = 140$ нм при температуре 18^{0} С.

Разработанный FLC-661 сочетает в себе все необходимые свойства, позволяющие использовать его в электрооптических приборах, работающих на основе DHF-эффекта [2]. Этот SmC* материал обеспечивает электрооптическую модуляцию до частоты 3 кГц (рис 3 а)) с контрастным отношением около 45:1 в белом свете.



Рис. 3. а) Модуляция интенсивности белого света, проходящего через ячейку DHF, заполненную FLC-661 и помещенную между двумя скрещенными поляризаторами (нижняя кривая) под действием электрического поля (верхняя кривая), приложенного к ячейке. Зазор между ячейками составляет 6,7 мкм, температура-23°C. б) Температурные зависимости угла наклона θ и вращательной вязкости γ_φ для смеси FLC-661/7 в режиме охлаждения [4].

Для сравнения влияния хиральных добавок III и IV на свойства смесей изготавливалась смесь с тем же содержанием добавки III, равным 9,1 моль% (FLC-661/7), что и в FLC-661. Графики температурных зависимостей вращательной вязкости γ_{φ} и угла наклона θ молекул в смектических слоях для смеси FLC-661/7 представлены на рис. 3 б).

Оказалось, что эти зависимости в режиме охлаждения от изотропной фазы практически эквивалентны для смесей FLC-661/7 и FLC-661. То же самое можно сказать и о температурных зависимостях спонтанной поляризации в режиме охлаждения от изотропной фазы (Ps FLC-661 представлен на Puc.2 б)). С другой стороны, HTP хиральной легирующей примеси IV существенно выше по отношению к III, благодаря этому шаг спирали индуцированной SmC* смеси FLC-661/7 достигает 100 нм (рис. 2 а)), в то время как для FLC-661 он составляет 140 нм (рис. 2 б)).

Качество ориентации FLC-661/7 проиллюстрировано на рис. 4. Видно, что оптическое качественно существенно улучшается при уменьшении шага спирали. Значение оптического контраста для данных ячеек составило 3.9 и 28.13 соответственно. Данный результат может объясняться наличием двуосного потенциала поверхности, который при уменьшении шага спирали стремится к эффективно одноосному, так как в случае малого p_0 спираль воспринимается поверхностью как целое. На рис. 4 б) виден случай, хорошо совпадающий с теоретическим представлением рис. 5 б).



Рис. 4. Микрофотографии в поляризационном микроскопе планарноориентированных текстур слоев FLC-661/7 с концентрацией хиральной добавки IV 7,41 % моль (а, в) и 12.3 % моль (б,г), толщиной 2,5 мкм при температуре 23°C со скрещенными поляризатором и анализатором: а) и б) ось спирали параллельна плоскости поляризатора; в) и г) угол между осью спирали и плоскостью поляризатора равен 45 град.



Рис. 5. Вид поверхностного потенциала в одноосном случае (а) и в двуосном случае (б) [5].

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В этой работе были синтезированы два новых хиральных соединения: Бис[(1S)-1-метил-2-{[(1S)-1-метилгептил] Окси}-2 - оксоэтил] 1,1':4',1"терфенил-4,4"-дикарбоксилат Бис[(1S)-1-метил-2-{[(1S)-1-(III) И метилоктил]Окси}-2-оксоэтил] 1,1':4',1"-терфенил-4,4"-дикарбоксилат (IV). Эти соединения были использованы в качестве хиральных легирующих добавок для индуцирования хиральной фазы SmC* путем введения их в разработанную эвтектическую специально нематическую матрицу. В результате впервые удалось индуцировать из нематической матрицы сегнетоэлектрическую SmC* фазу с субволновым шагом спирали порядка 100-150 нм. Экспериментально доказано, что хиральные добавки III и IV обладают наибольшей известной мощностью спирального скручивания: 78 мкм⁻¹ и 109 мкм⁻¹ соответственно. Также показано, что уменьшение шага спирали существенно улучшает оптическое качество слоя СЖК, может что объясняться переходом двуосного поверхностного потенциала к эффективноодноосному. Электрооптические ячейки на основе разработанных смесей могут эффективно работать на частоте до 3 кГц в режиме DHF.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Kuczynski W. and Stegemeyer H. Ferroelectric properties of smectic C liquid crystals with induced helical structure. Chem. Phys. Lett., 1980, 70 (1), 123– 126. DOI: 10.1016/0009-2614(80)80075-3.
- Beresnev L.A., Chigrinov V.G., Dergachev D.I., Poshidaev E.P., Funfshilling J., Schadt M. Deformed helix ferroelectric liquid crystal display – a new electrooptic mode in ferroelectric smectic C* liquid crystals. Liquid Crystals, 1989, 5 (4), 1171–1177. DOI: 10.1080/02678298908026421.

- Pozhidaev E.P., Torgova S.I., Barbashov V.A., Minchenko M.V., Sulyanov S.N., Dorovatovskii P.V., Ostrovskii B.I., and Strigazzi A. Ferroelectric C* phase induced in a nematic liquid crystal matrix by a chiral non-mesogenic dopant. Appl. Phys. Lett., 2015, 106, 062904. DOI: 10.1063/1.4908152.
- E. P. Pozhidaev, S. I. Torgova, E. M. Budynina, T. P. Tkachenko, A. V. Kuznetsov, V. A. Barbashov Ferroelectric smectic C* phase with sub-wavelength helix pitch induced in a nematic liquid crystal by chiral non-mesogenic dopants, Liq. Cryst. and their Appl., 2020, 20 (3), 26–33.
- Anatoly Kaznacheev, Evgeny Pozhidaev, Vladimir Rudyak, Alexander V. Emelyanenko, 3 and Alexei Khokhlov Biaxial potential of surface-stabilized ferroelectric liquid crystals PHYSICAL REVIEW E 97, 042703 (2018).

ELECTRO-OPTICS OF A SMECTIC C* FERROELECTRIC PHASE WITH A SUBWAVELENGTH HELIX PITCH INDUCED IN A NEMATIC LIQUID CRYSTAL BY CHIRAL NON-MESOGENIC ADDITIVES

<u>T. P. Tkachenko</u>^{1,2}, E. P. Pozhidaev^{1,2}, S. I. Torgova¹, E. M. Budynina^{1,3}, A. V. Kuznetsov^{1,2}, V. A. Barbashov¹

 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)
³Lomonosov Moscow State University, Department of Chemistry (1-3 Leninskie gory, Moscow, Russia, 119991) e-mail: tptkachenko@lebedev.ru

Chiral smectic C* (SmC*) ferroelectric liquid crystals with a short helical pitch $p_0 < 150$ nm obtained by mixing nematic liquid crystal (NLC) and chiral nonmesogenic compounds have been developed. The occurrence of the SmC* phase in mixtures is confirmed by dielectric, optical, and electro-optical measurements. The proposed method for obtaining smectic C* materials makes it possible to create innovative electro-optical media that combine the mechanical stability of NLCs, uniform orientation, and high switching frequency of ferroelectric liquid crystals (up to 3 kHz).

Keywords: ferroelectric liquid crystals, chiral additive in a nematic matrix, the pitch of the helix, the electro-optics of spiral nanostructures.

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СПЕКТРОВ ДЕЛЬФИНИДИНА

<u>3.Р. Утебаева</u>¹, Е.Ю. Степанович¹, С.В. Стрелков¹

¹ Астраханский государственный университет (414056, Россия, г. Астрахань, ул. Татищева, 20а) e-mail: utebaeva_1999@mail.ru

Исследованы спектры трех веществ. Построены графики интенсивности частот во внешних и внутренних слоях. Проведена идентификация ИК спектров веществ. Представлены комплекс валентных и деформационных колебаний С–С, С–О, С–Н и О–Н связей в исследуемых веществах. Установдено, что во внешнем слое концентрация антоцианов больше.

Ключевые слова: антоцианы, дельфинидин, цианидин, петунидин, пеонидин, пеларгонидин, малевидин, ИК - Фурье спектрометр.

1. ВВЕДЕНИЕ

Антоцианы представляют собой класс фитоконсистентов, отвечающий за различные цвета растений. В научной литературе различают несколько видов антоцианидинов, таких как цианидин, дельфинидин, петунидин, пеонидин, пеларгонидин, малевидин. Антоцианидины применяются в широком диапозоне фармакологической деятельности. Антоцианы преимущественно применяются в пищевой промышленности, так как природные красители полезны для здоровья и безопасны по сравнению с синтетическими красителями [1].

Антоцианы обладают широким спектром биологической активности. В организме человека соединения проявляют следующие свойства: антиоксидатные; противовоспалительные; мочегонные; бактерицидные; противоаллергические; желчегонные; противовирусные.

Антоцианы активируют обмен веществ на клеточном уровне; уменьшают проницаемость капилляров; повышают эластичность сосудов (за счёт угнетения активности гиалуронидазы); укрепляют сетчатку глаза; нормализуют внутриглазное давление; повышают антиоксидантную защиту организма; предотвращают повреждение структуры ДНК; способствуют скорому выздоровлению от респираторных заболеваний [2].

Антоцианы привлекли большое внимание благодаря их потенциальному укреплению здоровья. Были исследованы механизмы, ответственные за

цитопротекторное действие дельфинидина и других антоцианов. Было обнаружено, что все протестированные флавоноиды противодействуют индуцированным пероксинитритом, апоптическим эффектам на эндотелиальные клетки посредством ингибирования нескольких критических сигнальных каскадов. Кроме того, эпидемиологические исследования показали, что дельфинидин оказывает благотворное влияние на различные стадии канцерогенеза [3, 4].

Данный обзор был проведен для того, чтобы определить использование антоцианов в фармакологии и для изучения аналитических аспектов применения дельфинидина. Данный обзор будет полезен ученым, производителям и потребителям для понимания потенциальной пользы дельфинидина для здоровья человека.

Дельфинидин является важным антоцианидином, присутствующий в эпидермальных тканях цветов и фруктов. [1].

Дельфинидин обладает антиоксидантными, антимутагенезными, противовоспалительными и антиангиогенными свойствами. Данные свойства дельфинидина проявляются в результате ингибирования фосфорилирования рецептора-2 фактора роста сосудистого эндотелия, передачи сигналов тромбоцитарного лиганда / рецептора фактора роста, пролиферации раковых клеток и модуляции фосфорилирования Met-рецептора [5, 6-8]. , Дельфинидин содержится во многих ярких фруктах, овощах и пищевых добавках, которые в настоящее время применяются в качестве лекарств от рака [9].

2. ЭКПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Исследование экспериментальных спектров проводились с помощью ИК - Фурье спектрометра Frontier компании PerkinElmer. Спектры исследуемого образца регистрировались в среднем ИК диапазоне (4000-400см⁻¹) при температуре $27^{\circ}C$ на приставке нарушенного полного внутреннего отражения (НВПО). Слои размера порядка миллиметра помещались на кристалл приставки и фиксировались с помощью прижимного устройства. Ниже представлены полученные спектры, обработанные в математическом пакете Origin.

Числами на рисунке 1 показаны значения (в см-1) волновых чисел полос поглощения, обусловленные частотами колебаний функциональных групп. На основе полученных данных была проведена идентификация ИК спектра. Отнесение частот черники представлены в таблице 1.



Рис. 1. Полосы поглощения спектра внешнего и внутреннего слоев черники

Таблица 1.

Частота, см ⁻¹	Связь	Интенсивность
3336;	О-Н (валентные колебания)	Сильная
1649	О-Н (деформационные колебания)	Сильная
1472	С-С (деформационные колебания)	Слабая
2916; 2848	С-Н (деформационные колебания)	Сильная
1019	С-Н (валентные колебания)	Слабая



Рис. 2. Полосы поглощения спектра внешнего и внутреннего слоев моркови

Отнесение частот моркови представлены в таблице 2.

Таблица 2.

Частота, см-1	Связь	Интенсивность
3326	О-Н (валентные колебания)	Сильная
1416	О-Н (деформационные	Сильная
	колебания)	
1635	С-С (деформационные	Сильная
	колебания)	
1031	С-Н (валентные колебания)	Сильная

Спектры моркови на рисунке 2 можно идентифицировать по отсутствию колебаний С-Н группы в диапазоне от 2000 до 2500 см⁻¹. Колебания в диапазоне 1635 см⁻¹ соответствуют деформационным колебаниям С–С. Колебания с частотой 3326 см⁻¹ соответствуют валентным колебаниям О–Н. Отсутствие пиков возможно в следствии того, что колебания малоинтенсивны.



Рис. 3. Полосы поглощения спектра внешнего и внутреннего слоев огурцв

Таблица 3.

Частота, см ⁻¹	Связь	Интенсивность
3335	О-Н (валентные колебания)	Сильная
2917; 2849	С-Н (валентные колебания)	Сильная
1643	О-Н (деформационные колебания)	Сильная
1321	С-С (деформационные колебания)	Слабая
1030	С-Н (деформационные колебания)	Сильная

Спектр внешнего и внутреннего слоев огурца представляет собой комплекс валентных и деформационных колебаний С–С, С–О, С–Н и О–Н связей. Колебания в диапазоне 1321 см⁻¹ соответствуют деформационным колебаниям С–С. Колебания в диапазоне 2849-2917 см⁻¹ интерпретированы как валентные колебания С–Н. Колебания с частотой 3335 см⁻¹ соответствуют валентным колебаниям О–Н, а пики 1643 соответствуют валентным колебаниям О–Н, а пики 1643 соответствуют валентным колебаниям С–К. Внутренний слой огурца имеет те же значения пиков, но более интенсивные. Полоса со значением интенсивности 1030 отнесенная, как деформационные колебания С-Н более разрешена в спектре во внешнем слое огурца.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе полученных спектров, можно сделать вывод о наличие в некоторых овощах антоцианов. Характерные полосы, отнесенные как колебания О-Н, С-С, С-Н не имеют значимого смещения. Спектры слоев отличаются в значениях интенсивности, что может судить о том, что во внешнем слое концентрация антоцианов больше.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Journal of Acute Disease, Medicinal significance, pharmacological activities, and analytical aspects of anthocyanidins 'delphinidin': Kanika Patel, Achint Jain, Dinesh K. Patel, 18 June 2013;
- Антоцианы Мое Здоровье Модуль поиска Интернет <u>https://amhealh.ru/antociany.html</u>;
- 3. Paixão J, Dinis TC, Almeida LM. Dietary anthocyanins protect endothelial cells against peroxynitrite-induced mitochondrial apoptosis pathway and Bax nuclear translocation: an in vitro approach. // Apoptosis 2011; v. 16,p. 976-989.
- 4. Clere N, Faure S, Martinez MC, Andriantsitohaina R. Anticancer properties of flavonoids: roles in various stages of carcinogenesis. // Cardiovasc Hematol Agents Med Chem 2011; v. 9, p.62-77.
- Domitrović R, Jakovac H. Antifibrotic activity of anthocyanidin delphinidin in carbon tetrachloride-induced hepatotoxicity in mice. // Toxicology 2010; v. 4, p. 1-10.
- Feng R, Wang SY, Shi YH, Fan J, Yin XM. Delphinidin induces necrosis in hepatocellular carcinoma cells in the presence of 3-methyladenine, an autophagy inhibitor. // J Agric Food Chem 2010; v. 58,p. 3957-3964.
- Takasawa R, Saeki K, Tao A, Yoshimori A, Uchiro H, Fujiwara M, et al. Delphinidin, a dietary anthocyanidin in berry fruits, inhibits human glyoxalase // I. Bioorg Med Chem 2010; v. 18, p.7029-7033.
- Kumoro Ac, Retnowati DS, Sri Budiyati C. Solubility of delphinidin in water and various organic solvents between (298.15 and 343.15) // KJ. Chem Eng Data 2010; v/55, p. 2603-2606.
- Ozbay T, Nahta R. Delphinidin inhibits HER2 and Erk1/2 signaling and suppresses growth of HER2-overexpressing and triple negative breast cancer cell lines. // Breast Cancer 2011; v.5, p.143-154.

MOLECULAR MODELING OF THE STRUCTURE AND SPECTRA OF DOLPHINIDINE

Z.R. Utebaeva¹, E. Yu. Stepanovich¹, S.V. Strelkov¹

¹ Astrakhan State University (414056, Russia, Astrakhan, Tatishcheva st., 20a) e-mail: utebaeva_1999@mail.ru

The spectra of three substances are investigated. The graphs of the frequency intensity in the outer and inner layers are plotted. The identification of the IR spectra of the substances was carried out. A complex of stretching and bending vibrations of C - C, C - O, C - H and O - H bonds in the substances under study is presented. It was found that the concentration of anthocyanins in the outer layer is higher.

Keywords: anthocyanins, delphinidin, cyanidin, petunidin, peonidin, pelargonidin, malevidin, IR - Fourier spectrometer.

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ВИХРЕВЫХ ЛАЗЕРНЫХ ПУЧКОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИНТЕГРАЛА КОЛЛИНЗА

А.О. Фролов

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

Распространение вихревых лазерных пучков в параксиальной зоне может быть помощью интеграла Коллинза рассчитано с оператора распространения, частными случаями которого являются преобразования Френеля, Фурье и дробное преобразование Фурье. В данной работе была разработана программа вычисления интеграла Коллинза, принимающего в качестве входных параметров компоненты АВСО-матрицы. Были рассмотрены кластеры из мод Эйри с различными параметрами, в т.ч. несущими скоростями пучков.

Ключевые слова: интеграл Коллинза, моды Эйри, дробное преобразование Фурье.

1. ВВЕДЕНИЕ

В данной работе была разработана программа вычисления интеграла Коллинза [1] — параксиального оператора распространения, принимающего в качестве входных параметров компоненты АВСД-матрицы, описывающей оптическую среду и координаты для расчёта выходного поля в данной точке пространства. При определённых значениях элементов матрицы перехода можно получить частные случаи интеграла Коллинза — преобразование Фурье, которое применяется для разложения светового поля на плоские волны по частотам; преобразование Френеля, использующееся для описания распространения света в свободном пространстве; а также дробное преобразование Фурье [2], которое широко используется в квантовой механике для решения физических задач с применением уравнения Шрёдингера [2-3]. Дробное преобразование Фурье также позволяет рассмотреть распространение света в оптическом волокне с переменным показателем преломления [4]. Также данный оператор распространения может информационной быть полезен для изучения ёмкости (количества информационных степеней свободы) оптических систем [5].

Интеграл Коллинза применим не только к одиночным вихревым лазерным пучкам, но и к их кластерам различной формы. Такие «мультисолитоны» также вызывают большой интерес со стороны различных учёных в последнее время [6-8].

Данная практическая работа имеет значительное практическое применение, т.к. реализованные алгоритмы векторно-матричного интегрирования в программе, позволяют производить моделирование распространения в свободном пространстве на основе преобразования Френеля и прохождение через линзы на основе преобразование Фурье быстрее, чем с помощью интегрирования через циклы. При этом имеется возможность регулировать шаг интегрирования, что является немаловажным фактором при исследовании распространения лазерных пучков.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ КЛАСТЕРОВ МОД ЭЙРИ С ПОМОЩЬЮ ИНТЕГРАЛА КОЛЛИНЗА

Многие свойства распространения лазерных пучков в оптической системе можно получить, зная функцию входного поля и ABCD-матрицу, описывающую данную оптическую среду. Если AD - BC = 1, то существует линейное каноническое преобразование, связывающее входное и выходное поля, известное в оптике как интеграл Коллинза:

F(u,v)

$$= \begin{cases} -\frac{\mathrm{i}k}{2\pi\mathrm{B}} \iint\limits_{-\infty}^{+\infty} f(x,y) \exp\left\{\frac{\mathrm{i}k}{2\mathrm{B}} [A(x^{2}+y^{2})-2(xu+yv)+D(u^{2}+v^{2})]\right\} dxdy, \mathbf{B} \neq 0, \\ D \exp\left[\frac{\mathrm{i}k\mathrm{CD}(u^{2}+v^{2})}{2}\right] f(Du, \mathrm{D}v), \qquad \mathbf{B} = 0, \end{cases}$$
(1)

где F(u, v) — выходное поле;

k — волновое число, мм-1, определяемое как $k = 2\pi/\lambda$;

 λ — длина волны, мм;

A, B, C, D — компоненты ABCD-матрицы перехода $\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$;

f(x, y)— входное поле.

Для получения выходного поля при различных расстояниях *z* и с определённым фокусным расстоянием *f* воспользуемся дробным преобразованием фурье, т.е. ABCD-матрица примет вид:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\pi z}{2f} & f \sin\frac{\pi z}{2f} \\ -\frac{\sin\frac{\pi z}{2f}}{f} & \cos\frac{\pi z}{2f} \end{pmatrix}$$
(2)

Интеграл Коллинза применим не только к одиночным световым модам, но и к целым кластерам из лазерных пучков, которые бывают разные по форме [8]: равноудалённые от центра (кластер в форме окружности), ромбообразные, в форме треугольника и др.

Световые пучки в таких кластерах используются также различные: моды Гаусса, Гаусса-Лагерра и т.д.

В данной работе рассмотрим моделирование распространения кластеров, состоящих из равноудалённых от центра пучков Эйри с помощью дробного преобразования Фурье.

Моды Эйри описываются следующей формулой:

$$f(x, y) = Ai(x)Ai(y)\exp(-\frac{x^2+y^2}{\sigma^2}),$$
 (3)

где *о* — ширина пучка, мм.

Для моделирования кластера воспользуемся нижеприведённой формулой:

$$f(x, y) = \frac{1}{\sigma} \sqrt{\frac{P_0}{\pi}} \sum_{n=1}^{N} \{f_n(x - \rho \cos \varphi_n, y - \rho \sin \varphi_n) \exp[-ik\xi \beta \rho(x \sin \varphi_n - y \cos \varphi_n)]\},$$
(4)

где $P_0 = P|_{z=0}$ — начальная мощность светового пучка, мВт; $P = \iint |f(\vec{r}, z)|^2 d^2 \vec{r}$ — мощность светового пучка на расстоянии z, мВт; $f(\vec{r}, z)$ — уравнение одиночной моды (в нашем случае уравнение (3)); N — количество пучков в кластере; $\varphi_n = 2\pi n/N$;

 ξ — начальная поперечная (несущая) скорость лазерных пучков, мм/с; $\beta = \sqrt{\gamma^2 P_0}$ — константа распространения, характеризующая угловую скорость;

 $\gamma = \frac{1}{k\sigma^2} \sqrt{\frac{\eta}{P_0}}$ — материальная константа, характеризующая нелокальный эффект среды;

$$\eta = \frac{P_0}{P_c}$$
 — коэффициент мощности светового пучка;
 $P_c = \frac{1}{k^2 \gamma^2 \sigma^4}$ — критическая мощность, мВт.

3. ПРИМЕНЕНИЕ ИНТЕГРАЛА КОЛЛИНЗА К КЛАСТЕРАМ, Состоящим из мод эйри

Рассмотрим распространение кластера, состоящего из мод Эйри, со следующими параметрами: $N = 5, \rho = 5$ мм, $\sigma = 1.5$ мм, $\lambda = 650$ нм, f = 1000 мм, $\eta = 1$. Результаты приведены на рисунках 1-3:



Рис. 1. Кластер мод Эйри при ξ = 0.5 мм/с на расстоянии а) 0 мм, б) 950 мм, в) 975 мм, г) 1000 мм, д) 1025 мм, е) 1050 мм, ж) 2000 мм



Puc. 2. *Кластер мод Эйри при* ξ = 1 мм/с на расстоянии а) 0 мм, б) 950 мм, в) 975 мм, г) 1000 мм, д) 1025 мм, е) 1050 мм, ж) 2000 мм



Рис. 3. Кластер мод Эйри при ξ = 1.5 мм/с на расстоянии а) 0 мм, б) 950 мм, в) 975 мм, г) 1000 мм, д) 1025 мм, е) 1050 мм, ж) 2000 мм

На рисунке 4 показано моделирование распространения кластера мод Эйри из шести пучков $\rho = 6$ мм, $\sigma = 1.5$ мм, $\lambda = 650$ нм, f = 1000 мм, $\eta = 1$. Помимо этого, у каждого пучка своя несущая скорость (подписаны на рисунке 4.a):



Рис. 4. Кластер мод Эйри при с различными значениями ξ на расстоянии а) 0 мм, б) 950 мм, в) 975 мм, г) 1000 мм, д) 1025 мм, е) 1050 мм, ж) 2000 мм

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе было рассмотрено применение интеграла Коллинза к кластерам мод Эйри. При достаточно большой несущей скорости отдельные лазерные пучки сохраняли свою форму и вращались по периметру кластера. В кластерах мод Эйри, составленных из пучков с различными начальными поперечными скоростями, было выявлено, что чем больше несущая скорость, тем дальше окажется пучок от центра и частично сохранит свою форму.

Данная работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (№ 20-07-00505\20).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Collins S.A. Lens-System Diffraction Integral Written in Terms of Matrix Optics [текст] / S.A. Collins // J. Opt. Soc. Am. — 1970. — Vol. 60(9). — P. 1168-1177.

2. Namias V. The Fractional Order Fourier Transform and its Application to Quantum Mechanics [текст] / Victor Namias // IMA Journal of Applied Mathematics. — 1980. — Vol. 25(3). — P. 241-265.

3. Казанский Н.Л. Теория возмущений для уравнения Шрёдингера в периодической среде в квазиимпульсном представлении [текст] / Н.Л. Казанский, С.Н. Хонина, С.И. Харитонов // Компьютерная оптика. — 2012. — Т. 36(1). — С. 21–26.

4. Khonina S.N. Propagation of laser vortex beams in a parabolic optical fiber [TEKCT] / S.N. Khonina, A.S. Striletz, A.A. Kovalev, V.V. Kotlyar // Proceedings of SPIE. — 2010. — Vol. 7523, 75230B-1-12.

5. Kirilenko M.S. Coding of an optical signal by a superposition of spheroidal functions for undistorted transmission of information in the lens system [текст] / M.S. Kirilenko, S.N. Khonina / Proc. SPIE. — 2014. —Vol. 9156. — P. 91560–8P. DOI: 10.1117/12.2054214

6. Li-Gang Wang Formation of optical vortices using coherent laser beam arrays [текст] / Li-Gang Wang, Li-Qin Wang, Shi-Yao Zhu / Optics Communications. — 2008. — Vol. 282, Issue 6. — P. 1088-1094. DOI:10.1016/j.optcom.2008.12.004

7. Limig Song Controllable Gaussian-shaped soliton clusters in strongly nonlocal media [текст] / Limin Song, Zhenjun Yang, Xingliang Li, Shumin Zhang / Optics Express. — 2018. — Vol. 26, Issue 15. — Р. 19182-19198. DOI: 10.1364/OE.26.019182 8. Limin Song Dynamics of rotating Laguerre-Gaussian soliton arrays [текст]
/ Limin Song, Zhenjun Yang, Shumin Zhang, and Xingliang Li / Optics Express. —
2019. — Vol. 27, Issue 19. — Р. 26331-26345. DOI: 10.1364/OE.27.026331

MODELLING OF THE VORTEX LASER BEAM PROPAGATION USING THE COLLINS INTEGRAL

A.O. Frolov

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

The propagation of the vortex laser beams in the paraxial zone can be calculated using the Collins integral — the propagation operator which has special cases: the Fresnel, Fourier, and fractional Fourier transforms. In this paper, a program for calculating the Collins integral has been developed, which takes the components of the ABCD matrix as input parameters. Clusters of airy modes with various parameters, including initial transverse velocity parameter, were considered.

Keywords: Collins integral, Airy modes, fractional Fourier transforms.

ХЕМОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СПЕКТРОВ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ ТКАНЕЙ ЗУБОВ ПРИ ПЕРИОДОНТИТЕ

Е.В. Тимченко¹, П.Е. Тимченко¹, М.А. Зыбин², <u>К.Б. Черный-Ткач</u>¹, О.О. Фролов¹, М.А. Ивлиев¹

¹Самарский национальный исследовательский университет, (443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34) ²Стоматологическая клиника «ДИАМАНТ», (443090, г. Самара, ул. Советской Армии, 151) e-mail: laser-optics.timchenko@mail.ru

В работе представлены спектры комбинационного рассеяния образцов тканей зубов, полученных у пациентов с диагнозом периодонтит и здоровой (контрольной) группы пациентов. Проведен хемометрический анализ спектров комбинационного рассеяния и установлены основные спектральные особенности тканей зубов при периодонтите, что в дальнейшем позволит разработать новые способы его раннего обнаружения.

Ключевые слова: спектроскопия комбинационного рассеяния, периодонтит, ткани зуба.

1. ВВЕДЕНИЕ

Одним из наиболее часто встречающихся стоматологических заболеваний является периодонтит, с которым, согласно статистике, сталкивается около 10% населения планеты [1,2,3].

Периодонтит является воспалительным заболеванием, нарушающим целостность периодонта, что приводит к нарушению таких его основных функций как удержание зуба в альвеоле и равномерное перераспределение давление на зуб при механическом воздействии в процессе жевания [4].

Очаг воспаления на начальных стадиях периодонтита может быть настолько мал, что пациент не будет иметь специфичных симптомов, а стандартные методы диагностики не позволят его обнаружить [5]. Таким образом, чтобы избежать развития осложнений, влекущих за собой разрушение периодонта, распространение патологического процесса на соседние ткани зубочелюстной системы [6] и, как следствие, расшатывание зубов или даже их потерю, необходим наиболее чувствительный метод диагностики данного заболевания.

В настоящее время спектроскопия комбинационного рассеяния (СКР) является перспективным методом исследования в различных областях науки, в том числе и в стоматологии, где благодаря высокому разрешению и чувствительности данного метода изучают особенности изменений структуры тканей полости рта и зубов, характеристики стоматологических биоматериалов [7].

Целью нашего исследования являлось изучение и выявление особенностей твердых тканей зубов у больных периодонтитом с помощью спектроскопии комбинационного рассеяния.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

В качестве материалов исследования были выбраны образцы твердых тканей зубов, полученных с различных участков зуба: 1 – дентин на срезе, 2 – дентин корня на срезе, 3 – цемент оголенный, 4 – цемент под десной, 5 – эмаль. Зубы были получены после удаления зубов у двух групп людей: здоровой контрольной группы (а) (зубы, удалены по ортодонтическим показаниям) и пациентов с периодонтитом (б).

Образцы твердых тканей зубов были исследованы с помощью экспериментального стенда, реализующего метод спектроскопии комбинационного рассеяния. Схема устройства стенда изображена на рисунке 1.

Обработка полученных спектров реализовывалась в программе Wolfram Mathematica 8. Выделения КР спектра производилось вычитанием аппроксимирующий линии (полном пятой степени) автофлуоресцентной составляющей спектра, полученной с помощью итерационного алгоритма на интервале 800-2100 см⁻¹. После чего полученные спектры КР очищались от высокочастотных шумов.

Полученные в ходе исследования результаты были проанализированы в программной среде SPSS Statistics 19. Был проведен хемометрический анализ результатов с помощью метода Уилкса (Wilks).



Рис.1. Экспериментальный стенд: 1 – объект; 2- КР пробник RPB785; 3 - лазерный модуль LuxxMasterRamanBoxx; 4 – источник питания лазерного модуля; 5 – спектрометр Shamrock sr303i; 6 – встроенная охлаждаемая камера DV420A-OE; 7 – компьютер; 8, 9, 10 – управляющие кабели; 11 – передающее оптоволокно; 12 – приёмное оптоволокно

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

На рисунке 2 представлены усредненные спектры комбинационного рассеяния твердых тканей зубов 2-х групп пациентов: здоровой контрольной группы (а) и пациентов с периодонтитом (б).



Рис. 2. Усредненные спектры комбинационного рассеяния для пяти групп исследуемых образцов, замеренные со здоровых зубов (а) и зубов, пораженных периодонтитом (б): 1 –дентин на срезе; 2 - дентин корня на срезе; 3 –цемент оголенный; 4 –цемент под десной; 5 –эмаль

Для исследуемых тканей зубов при периодонтите наблюдается снижение интенсивности на линии 956 см⁻¹, что может свидетельствовать о деминерализации неорганического вещества тканей зуба, в результате чего в тканях наблюдается снижение концентрации гидроксиапатитов (НА) [8].

Таким же образом меняется интенсивность на линиях 1000 и 1037 см¹, что соответствует фенилаланину. Снижение интенсивности в данных областях может говорить о разрушении коллагеновых волокон матрикса твердых тканей зубов.

Интенсивность на линии 1070 см⁻¹ (CO₃²-(v1) замещение В-типа, НА) также снижается во всех исследуемых образцах при наличии периодонтита. Это происходит за счет замещения фосфат-иона карбонат-ионом [9].

Наблюдалось снижение интенсивности на линии 852 см-1 (валентное колебание С-С в пролине, гидроксипролине и фенилаланине) во всех образцах пораженных периодонтитом зубов кроме дентина корня. В дентине корня на данном участке спектральных различий между здоровым и больным зубом не выявлено. Аналогичные изменения в тканях зубов при периодонтите наблюдаются на линиях 1230-1270 см-1 (Amide III) и 1663 см-1 (Amide I). Снижение интенсивности линий КР на данных линиях связано с выделением нейтрофилами и макрофагами в зоне воспаления фермента коллагеназы, который способствует растворению коллагеновых волокон и вызывает деструкцию костной ткани. Аналогичные изменения проявляются и в тканях зубов, как следствие быстрого роста числа бактерий в корневом канале [10].

Также во всех поражённых образцах кроме дентина корня на срезе наблюдается увеличение относительной интенсивности на линии 1738 см⁻¹, советующей липидам, что связано с воспалительной природой заболевания [11].

Был проведен анализ взаимосвязи групп объектов по признакам принадлежности к определённой области зуба с помощью метода линейного дискриминантного анализа (LDA), результаты которого представлены на рисунке 3.



Рис.3. График значений линейных дискриминантных функции для образцов зубов, разделение на здоровую и патологическую группу

Показано, что основные отличия между двумя группами образцов описывает дискриминантная функция LD-1. Выборка составляет 113 спектров комбинационного рассеяния (46 здоровых, 67 патологических). Положительные значения LD-1 в главной степени характерны для спектров КР, полученных для образцов первой группы, и наоборот отрицательные – для второй группы образцов. Области групп имеют пересечение, влияющее на процент корректно классифицированных объектов при кросс-проверке.

Распределения значений функции для групп были аппроксимированы функцией нормального распределения.



Рис. 4. График значений структурной матрицы для дифференциации образцов по признаку здоровые/патологические

Из анализа рисунков 3 и 4 можно сделать следующие выводы:

1. Наиболее значимые различия между группами образцов описывают линии КР, представленные на рисунке 4 и имеющие наибольшее значение нормированного коэффициента канонической дискриминантной функции LD – 1 по модулю.

2. Чем выше значение LD-1 для переменной, тем в большей степени она влияет на наблюдаемую разницу в компонентном составе, что, например, видно из значения коэффициента k1555, соответствующего C-N валентным колебаниям амида II.

3. Точность классификации составляет 93,8 %. Для новых объектов вероятность правильного предсказания составит 86,6 %.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный хемометрический анализ позволил установить, что основным спектральным различием между здоровыми группами и группами с периодонтитом является снижение интенсивности на линии 956 см⁻¹, а также изменения в амидных областях спектра (1230-1270 см⁻¹ и 1663см⁻¹). Данные изменения могут быть связаны с снижением концентрации солей гидроксиапатита и разрушением белкового матрикса тканей зуба.

СПИСОКЛИТЕРАТУРЫ

- M.A. Peres et al., Oral diseases: a global public health challenge. // Lancet, 2019, v. 394, № 10194, p. 249-260.
- 2. W. Marcenes et al., Global burden of oral conditions in 1990-2010: a systematic analysis. // Journal of dental research, 2013, v. 92, №7, p. 592-597.
- J. J. Segura-Egea et al., Endodontic medicine: connections between apical periodontitis and systemic diseases. // International endodontic journal, 2015, v. 48, № 10, p. 933-951.
- 4. P N R. Nair, On the causes of persistent apical periodontitis: a review. // International endodontic journal, 2006, v. 39, № 4, p. 249-281.
- Терапевтическая стоматология: Учебник для студентов медицинских вузов / Под ред. Е.В. Боровского. М.: «Медицинское информационное агентство», 2003.
- 6. S.S. James, S.Y. Gary, B.K. Leif, Comparison of cellular cementum in normal and diseased teeth-a scanning electron microscopic study. //Journal of Endodontics, 1981; № 7, p.370-37.

- R. Ramakrishnaiah et al., Applications of Raman spectroscopy in dentistry: analysis of tooth structure. //J. Applied Spectroscopy Reviews, 2015, №50, p 332-350.
- 8. Е.В. Боровский, В.К. Леонтьев, Биология полости рта. // М: Медицинскаякнига, Н. Новгород: Изд-во: НГМА, 2001, 304 с.
- 9. Ю.В. Мандра, С.Л. Вотяков, А.С. Ивашов, Д.В. Киселева, Возможности применения рамановской микроспектроскопии для исследования структурных особенностей твердых тканей зубов человека // Проблемы стоматологии, 2011, №1.
- 10.И.Л. Сергеева, Совершенствование лечения деструктивных форм хронического периодонтита в лечебных учреждениях МО РФ // Диссертация на соискание ученой степени кандидата медицинских наук по специальности 14.01.14 – Стоматология, г. Санкт-Петербург, 2014.
- 11.E. V. Timchenko et al., Optical Methods for Periodontitis Early Rapid Diagnosis.
 // IEEE Electrical Engineering and Photonics (EExPolytech), 2019, 978-1-7281-4439-9/19, pp. 298-300.

CHEMOMETRIC ANALYSIS OF THE RAMAN SPECTRA OF DENTAL TISSUES IN PERIAPICAL PERIODONTITIS

E.V. Timchenko¹, P.E. Timchenko¹, M.A. Zybin², <u>K.B. Chernyy-Tkach¹</u>, O.O. Frolov¹

¹Samara National Research University, (Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086) ²Dental Clinic "Diamant", Samara (Sovetskoy Armii str., 151, Samara, Russia, 443090)

The paper presents the Raman spectra of dental tissue samples obtained from patients with a diagnosis of periapical periodontitis and a healthy (control) group of patients. A chemometric analysis of the Raman spectra has been carried out and the main spectral features of dental tissues in periapical periodontitis have been established, which will further allow developing new methods for its early detection.

Key words: Raman spectroscopy, periapical periodontitis, tooth tissues, enamel, dentin.

АКУСТООПТИЧЕСКИЙ ВИДЕОСПЕКТРОМЕТР БЛИЖНЕГО ИНФРАКРАСНОГО ДИАПАЗОНА С УПРАВЛЯЕМОЙ ШИРИНОЙ ПОЛОСЫ ПРОПУСКАНИЯ

<u>М.О. Шарикова</u>^{1,2}, В.И. Батшев^{1,2}, А.С. Мачихин^{1,3}, В.Э. Пожар^{1,2}, С.В. Боритко^{1,4}

¹Научно-технологический центр уникального приборостроения РАН (117342, г. Москва, ул. Бутлерова, 15) ²Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана (105005, г. Москва, ул. 2-я Бауманская, 5с1) ³Московский энергетический институт (111250, г. Москва, ул. Красноказарменная, 14) ⁴Московский физико-технический институт (141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский пер., 9) e-mail: sharikova.mo@ntcup.ru

Оптическая спектральная визуализация в ближнем инфракрасном диапазоне 0,9–1,7 мкм является быстро развивающимся методом в биомедицине. Устройства на основе акустооптических перестраиваемых фильтров представляют особый интерес, поскольку они обеспечивают удобство и эффективность обработки изображений с точки зрения объема собираемых данных. В этой работе мы обсуждаем бесполяризаторную конфигурацию акустооптического фильтра, которую можно легко В видеоспектрометра, обеспечив интегрировать оптическую схему компактную конструкцию прибора.

Ключевые слова: видеоспектрометрия, гиперспектральная визуализация, акустооптический перестраиваемый фильтр, дифракция Брэгга, ближний инфракрасный диапазон.

1. ВВЕДЕНИЕ

Гиперспектральная визуализация (ΓCB), также известная как видеоспектрометрия, становится все более мощным неинвазивным методом в биомедицине [1,2]. Доказано, что она эффективна во многих приложениях для точной локализации патологических тканей и количественной характеристики свойств. ГСВ их спектральных В биомедицине используют для интраоперационного определения опухоли головного мозга [3], обнаружения

артрита [4], обследования желудочно-кишечного тракта [5], диагностики рака толстой кишки [6] и т.д.

ГСВ в ближнем инфракрасном (ИК) диапазоне представляет особый интерес из-за более низкой автофлуоресценции и рассеяния биологических тканей. В этом диапазоне спектральное изображение обеспечивает более высокое отношение сигнал/шум и большую глубину изображения по сравнению с изображениями в видимом и ближнем инфракрасном диапазонах. В биомедицине он используется для анализа тканей головы [7], изучения лимфатической и мозговой сосудистой сети с помощью флуоресцентного красителя [8] и т.д. Получение куба гиперспектральных данных может быть реализовано различными методами, главным образом с использованием пространственного сканирования [1]. Акустооптические перестраиваемые (АОПФ), основанные на брэгговской дифракции света на фильтры представляются наиболее ультразвуковых волнах, перспективными компонентами для устройств ГСВ со спектральным сканированием. Они обеспечивают высокое спектральное (до 0,1 нм) и пространственное (до 1000 × 1000) разрешение, быструю (менее 10 мкс) и произвольную спектральную адресацию, компактность, конструкцию неподвижных элементов и низкое энергопотребление, интерактивное управление формы функции пропускания и возможность программирования.

ΑΟΠΦ обычно акустооптического (AO)состоит ИЗ кристалла, расположенного между двумя скрещенными поляризаторами, которые необходимы для блокировки недифрагированного луча. Поляризационные элементы увеличивают габариты, вес и стоимость оптической системы. В этом конструкция ΑΟΠΦ без поляризаторов, отношении ранее неизображающих продемонстрированная устройств [9], для кажется перспективной для изображающих спектрометров. В этой работе мы представляем оригинальную систему ΑΟΠΦ лля биомедицинской визуализации в ближнем ИК диапазоне, которая минимизирует аберрации.

2. ПРЕДЛАГАЕМЫЙ МЕТОД

В неколлинеарной геометрии дифрагированная волна отклоняется, поэтому ее можно отделить от падающего луча без поляризаторов. В конфигурации без поляризаторов неполяризованный свет, попадающий в кристаллическую АО ячейку, разделяется на ортогонально поляризованные волны. Обе компоненты взаимодействуют с одной и той же акустической

волной, отклоняясь в противоположные стороны с повышающим и понижающим преобразованием частоты в соответствии с условиями Брэгга :

$$\vec{k_{l}} + \vec{q} = \vec{k_{d}},\tag{1}$$

где \vec{k}_{ι} , \vec{k}_{d} – волновые вектора падающей и дифрагированной световых волн, \vec{q} – волновой вектор акустической волны. На рисунке 1 изображена волновая диаграмма неколлинеарного АОПФ для обеих поляризационных составляющих («о» - обыкновенная и «е» - необыкновенная).



Рис. 1. Диаграмма волновых векторов биполяризационной анизотропной AO дифракции. $\mathbf{k}_{io}, \mathbf{k}_{ie}, \mathbf{k}_{do}, \mathbf{k}_{de}$ – волновые векторы падающей (i) и дифрагирующей (d) световых волн обыкновенной (o) и необыкновенной (e) поляризации, \mathbf{q} – волновой вектор акустической волны, θ и γ - угол распространения падающей и акустической волны, δ_{o-e} и δ_{e-o} – углы отклонения для режимов дифракции о \rightarrow е и $e \rightarrow o$

Чтобы получить максимальное поле зрения, необходимо обеспечить выполнение условия Брэгга в широком диапазоне углов падения, которые эквивалентны параллельной касательной геометрии, или широкоугольной геометрии. Это условие накладывает связь между углами θ и γ для каждого режима дифракции: е \rightarrow о и о \rightarrow е. Для каждого угла падения θ существует акустический угол γ , называемый углом среза кристалла [10]. На практике предпочитают небольшие углы среза ($\gamma < 10^{\circ}$), которые обеспечивают высокую добротность M₂. На рисунке 2 представлена бесполяризаторная схема разработанного АОПФ, который выбирает только одну линейную составляющую поляризации, в то время как нерабочие пучки блокируются с помощью диафрагмы.



Рис. 2. Принципиальная оптическая схема системы на основе АОПФ. Через систему проходит только один дифрагированный луч, остальные отсекаются диафрагмой. D, D' - диаметры входной и выходной диафрагм. ω – угловая апертура АОПФ, σ – угол отклонения дифрагированного пучка от недифрагированного после преломления излучения на выходной грани, f_1, f_2 – фокусные расстояния линз

Для того, рабочий пучок не перекрывался недифрагированным пучком, необходимо соблюсти условие σ ≥ ω. Во избежание потерь света рекомендуем считать эти углы равными, т.е.

$$\omega = \sigma = n \cdot \delta. \tag{2}$$

Угловая апертура АОПФ в данной схеме определяется диаметром входной диафрагмы в соответствии с соотношением

$$\omega = 2 \cdot \arctan\left(\frac{D}{2f_1}\right). \tag{3}$$

Диаметр выходной диафрагмы должен быть равен диаметру изображения входной:

$$D' = D \cdot \frac{f_2}{f_1}.\tag{4}$$

Строго говоря, на выходе необязательно использовать круглую диафрагму. Вместо нее достаточно установить заслонку.

2.1. Схема спектрометра

Предложенный метод применим как для спектрометров с параллельным ходом лучей через АОПФ, так и для спектрометров, построенных по конфокальной схеме. В случае схемы с АОПФ в параллельных пучках диафрагмы являются полевыми, а лучи, показанные на рисунке 2 – главными. В конфокальной схеме – это входной и выходной зрачки, а лучи принадлежат

осевому пучку. Обе схемы применяются на практике. Но оптические аберрации, вносимые АОПФ в изображение, в этих схемах разные. Подробно процедура анализа аберраций и оптимизации описана в работе [11].

Конфокальная бесполяризаторная схема, изображенная на рисунке 3, состоит из входного оптического блока I и основного блока II, содержащего АОПФ, оптический элемент связи и камеру. Блок I состоит из положительной линзы O1, обеспечивающей увеличение, необходимое для изображения бесконечно удаленных объектов. Объектив Л1 фокусирует изображение на акустической решетке внутри АОПФ. Размер промежуточного изображения близок к $D_{AOПΦ}$. Линзы Л2 и Л3 проецируют изображение на датчик с увеличением $m = f_3/f_2$. Чтобы полностью покрыть область датчика (S – площадь датчика), это увеличение должно быть равно $m = S/D_{AOПΦ}$. Отношения между фокусными расстояниями f_1, f_2 и диаметрами диафрагм D, D' описываются выражениями (3) и (4).



Рис. 3. Конфокальная бесполяризаторная схема акустооптического видеоспектрометра. ω_{AOΠΦ} – угловое поле AOΠΦ, D_{AOΠΦ} – световой диаметр AOΠΦ

2.2. Результаты

По приведенным выше соотношениям рассчитан и изготовлен экспериментальный образец, представленный на рисунке 4. Основой является спроектированный и изготовленный АОПФ ($\gamma = 7^{\circ}, D_{AO\Pi\Phi} = 9$ мм) для широкоапертурного излучения с углом падения $\theta = 73,9^{\circ}$. Спектральный диапазон 0,9–1,7 мкм обеспечивается акустической перестройкой частоты в диапазоне 30–60 МГц. Спектральная ширина полосы составляет 10 нм на $\lambda = 1,06$ мкм. Угол отклонения была $\delta = 1,8^{\circ}$, а угловая апертура АОПФ – $\omega_{AO\Pi\Phi} = 4^{\circ}$. Геометрия кристаллической АО ячейки оптимизирована для минимизации хроматического сдвига изображения в конфокальной схеме, показанной на рисунке 3.



Рис. 4. Экспериментальная система

Для обеспечения оптимального увеличения изображения линза объектива микроскопа O1 с фокусным расстоянием 50 мм используется в качестве входного оптического блока I. Апертурная диафрагма Д1, расположенная в фокальной плоскости линзы Л1, обеспечивает телецентрическое распространение света через АОПФ. Ее диаметр составляет 3.5 мм, что обеспечивает угловую апертуру АОПФ 4°. Фокусные расстояния объективов Л1, Л2 и Л3 равны 50 мм, что обеспечивает размер изображения равный размеру промежуточного изображения и диаметру АОПФ 9 мм.

На основе этой системы получены функции пропускания, представленные на рисунке 5.



Рис. 4. Функции пропускания экспериментальной системы

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В этой работе мы рассмотрели возможность создания бесполяризаторной схемы акустооптического видеоспектрометра. На ее основе была создана система для биомедицинских приложений в ближнем ИК диапазоне. И также была продемонстрирована возможность управления функцией пропускания.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 18-29-20095).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- G. Lu, B. Fei, Medical hyperspectral imaging: A review. // J. Biomed. Opt., 2014, v. 19(1), 010901.
- 2. J.A. Gutiérrez-Gutiérrez, A. Pardo, E. Real, J.M. López-Higuera, O.M. Conde, Custom Scanning Hyperspectral Imaging System for Biomedical Applications: Modeling, Benchmarking, and Specifications. // Sensors, 2019, v. 19(7), 1692.
- H. Fabelo, S. Ortega, R. Lazcano, D. Madroñal, M. Callicó, An Intraoperative Visualization System Using Hyperspectral Imaging to Aid in Brain Tumor Delineation. // Sensors, 2018, v. 18(2), 430.
- M. Milanic, L.A. Paluchowski, L.L. Randeberg, Hyperspectral imaging for detection of arthritis: Feasibility and prospects. // J. Biomed. Opt., 2015, v. 20(9), 096011.
- 5. J. Yoon, J. Joseph, D.J. Waterhouse, A.S. Luthman, G.S.D. Gordon, A clinically translatable hyperspectral endoscopy (HySE) system for imaging the gastrointestinal tract. // Nat. Commun., 2019, v. 10(1), 1902.
- 6. R.J. Beaulieu, S.D. Goldstein, J. Singh, B. Safar, A. Banerjee, Automated diagnosis of colon cancer using hyperspectral sensing. // Int. J. Med. Robot. Comput. Assist. Surg., 2018, v. 14(3), e1897.
- S. Golovynskyi, I. Golovynska, L.I. Stepanova, O.I. Datsenko, L. Liu, Optical windows for head tissues in near-infrared and short-wave infrared regions: Approaching transcranial light applications. // J. Biophotonics, 2018, v. 11(12), e201800141.
- 8. G. Hong, A.L. Antaris, H. Dai, Near-infrared fluorophores for biomedical imaging. // Nat. Biomed. Eng., 2017, v. 1(1), 0010.
- 9. V.M. Epikhin, F.L. Vizen, Z.A. Magomedov, L.L. Pal'tsev, Polarizer-Free Acousto-Optic Monochromators. // Tech. Phys., 2018, v. 63(7), p. 1040-1043.
- 10.V. Pozhar, A. Machihin, Image aberrations caused by light diffraction via ultrasonic waves in uniaxial crystals. // Appl. Opt., 2012, v. 51, p. 4513-4519.
- 11.A. Machikhin, V. Batshev, V. Pozhar, Aberration analysis of AOTF-based spectral imaging systems. // J. Opt. Soc. Am. A, 2017, v. 34(7), p. 1109-1113.

NEAR-INFRARED ACOUSTO-OPTICAL VIDEOSPECTROMETER WITH CONTROLLED BANDWIDTH

M.O. Sharikova^{1,2}, V.I. Batshev^{1,2}, A.S. Machikhin^{1,3}, V.E. Pozhar^{1,2}, S.B. Boritko^{1,4}

¹Scientific and Technological Center of Unique Instrumentation Russian Academy of Sciences

(Butlerova str., 15, Moscow, Russia, 117342) ²Bauman Moscow State Technical University (2-nd Baumanskaya str., 5, Moscow, Russia, 105005) ³Moscow Power Engineering University (Krasnokazarmennaya str., 14, Moscow, Russia, 111250) ⁴Moscow Institute of Physics and Technology, (9 Institutskiy per., Dolgoprudny, Moscow Region, Russia, 141701) e-mail: sharikova.mo@ntcup.ru

Optical biomedical imaging in short wave infrared range within $0.9-1.7 \mu m$ is a rapidly developing technique. Tunable-filter-based devices are of particular interest because they provide image processing convenience and efficiency in terms of data collected data volume. In this paper, we discuss a polarizer-free configuration of an acousto-optic filter that provides a compact and easy-to-integrate video spectrometer design.

Keywords: video spectrometry, hyperspectral imaging, acousto-optical tunable filter, Bragg diffraction, short wave infrared range.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СЕЛЕКТИВНОЙ ПО ГЛУБИНЕ РЕГИСТРАЦИИ ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО ОТКЛИКА КОЖИ ВОЛОКОННЫМИ ОПТИЧЕСКИМИ СИСТЕМАМИ РАЗЛИЧНОЙ КОНФИГУРАЦИИ

<u>А.А. Шацкая</u>, Д.Н. Артемьев

Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева (443086, г. Самара, ул. Московское шоссе, 34) e-mail: shatskaya16@gmail.com

В настоящей работе приведено моделирование различных конфигураций оптоволоконных зондов, реализующих селективную регистрацию спектрального отклика от отдельных слоев кожи. Проанализировано влияние оптической схемы устройства регистрации на вид спектра собственной флуоресценции кожи при возбуждении лазерным излучением с длиной волны 295 нм и 405 нм. Приведено сравнение модельных спектров флуоресценции кожи со экспериментальными спектрами от реальной ткани. Получено, что при анализе спектрального отклика от многослойной биологической ткани, такой как кожа человека, необходимо учитывать оптическую схему и эффективность сбора применяемого оптоволоконного зонда, Т.К. при фиксированных параметрах исследуемого участка ткани, ВИД результирующего спектра флуоресценции на выходе зонда изменяется в зависимости от чувствительности зонда к отдельным слоям биоткани.

Ключевые слова: оптоволоконный зонд, флуоресцентная спектроскопия, модель кожи человека, эндогенные флуорофоры, Монте-Карло моделирование.

1. ВВЕДЕНИЕ

Флуоресцентная спектроскопия обеспечивает эффективную и неинвазивную оптическую диагностику биотканей. Многие деструктивновоспалительные процессы в тканях сопровождаются изменением флуоресцентной активности клеток тканей, и разработка эффективных устройств регистрации спектрального отклика может улучшить оценку патологических изменений в биотканях.

В данной работе проводится анализ влияния фактора конфигурации оптической схемы регистрирующего устройства на вид спектра собственной флуоресценции кожи при возбуждении лазерным излучением с длиной волны

295 нм и 405 нм. Возможности моделирования позволяют представить идеальный случай, в котором параметры исследуемой ткани зафиксированы, и исследовать фактор конфигурации зондов на регистрируемый спектр без учета влияния большой вариабельности характеристик кожи и содержания флуорофоров [1].

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Для численного моделирования распространения излучения в системе Монте-Карло, использовался метод реализованный В программном обеспечении TracePro Expert - 6.0.2, Lambda Research Corporation. Моделирование регистрации спектров флуоресценции осуществляется в два этапа. Сначала проводится трассировка лазерного излучения от источника через возбуждающий канал устройства в модели биоткани. В точках поглощения излучения флуорофором генерируется источник флуоресценции. На следующем этапе проводится трассировка флуоресцентного излучения от рассчитанных источников флуоресценции. Флуоресцентные фотоны выходят на поверхность биоткани, часть фотонов попадает в апертуру собирающего канала и доставляется на детектор. При получении спектров эмиссии модели кожи, приближенной к реальной ткани, производилось трассировка более 1 млн флуоресцентных фотонов.

Модель здоровой кожи человека представлена как 6 однородных слоев: роговой слой (10 мкм), эпидермис (100 мкм), папиллярная дерма (200 мкм), поверхностное сплетение сосудов (100 мкм), ретикулярная дерма (600 мкм), глубокое сплетение сосудов (200 мкм). Полная толщина модели участка ткани равна 1,21 мм, поперечные размеры составляют 40 × 40 мм. Оптические характеристики слоев ткани, такие как: показатель преломления, коэффициент поглощения, коэффициент рассеяния, анизотропия, - выбраны из работы [2].

Поглощение излучения эпидермиса и дермы определяется коэффициентами поглощения входящих флуорофоров, которые в свою очередь рассчитываются по формуле:

$$\mu_{a_fluor} = ab(\lambda) \cdot K_{peak} \cdot C_{molar}, \qquad (1)$$

где $ab(\lambda)$ – относительное поглощение флуорофора,

*K*_{*peak*} – коэффициент молярной экстинкции,

 $C_{\scriptscriptstyle molar}$ - молярная концентрация флуорофора в объеме слоя ткани.

Для трассировки флуоресценции в системе необходимо задать следующие параметры: квантовый выход γ , коэффициент молярной

экстинкции, молярная концентрация, спектры возбуждения, спектры эмиссии. Параметры флуорофоров, используемых в модели, представлены в таблице 1 [3]. Спектры поглощения и эмиссии выбранных флуорофоров выбраны из литературы [3], пронормированы для импорта в программную среду TracePro.

Флуорофор	Квантовый	K_{peak} ,	C_{molar} ,	Положение
	выход γ	л/(моль×см)	моль/л	в коже
Коллаген	0,15	52940	2,0×10 ⁻⁴	Дерма
Эластин	0,25	28400	6,0×10 ⁻⁵	Эпидермис
FAD	0,03	11300	5,3×10 ⁻³	Эпидермис
Липофусцин	0,02	11500	1,0×10 ⁻³	Дерма
Меланин	0,003	2100	8,8×10 ⁻³	Эпидермис
NADH	0,019	3400	2,0×10 ⁻³	Эпидермис
Протопорфирин	0,06	171000	1,8×10-6	Дерма
IX				
Триптофан	0,12	5509	5,0×10 ⁻³	Дерма
Тирозин	0,13	1398	2,5×10 ⁻⁴	Эпидермис

Таблица 1. Флуоресцентные характеристики компонентов кожи.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В работе проанализированы оптическая схема устройства регистрации с ортогональным положением источником излучения и "большим" детектором с площадью сечения S=1,27 см² (рисунок 1а). Зондирующее излучение проникает во все слои модели кожи, а большая площадь детектора обеспечивает сбор отклика со всех флуоресцирующих слоев. Второй тип оптической схемы представляет собой систему из модели ткани и оптоволоконного зонда (рисунок 1б). Зонд представляет пучок кварцевых волокон с NA=0,22, расположенных вплотную ткани. Центральное волокно передает излучения от источника к ткани, собирающие волокна обеспечивают сбор спектрального отклика и доставляют его к детектору.



Рис. 1. Схематичное представление моделей устройства регистрации и кожи, в которых выполнялась трассировка излучения методом Монте-Карло. а) оптическая схема с ортогональным положением источником излучения и "большим" детектором, б) оптическая схема регистрации оптоволоконным зондом с малым поперечным сечением. На сечении зонда собирающие волокна обозначены белым цветом, возбуждающее волокно – черным

Спектр флуоресценции кожи при возбуждении на длине волны 405 нм имеет сложный спектральный состав (рисунок 2). Главный максимум спектра соответствует положению пика эмиссии флавина 520-530 нм. Спектр эмиссии липофусцина характеризуется широкой пологой кривой, при изменении его концентрации изменяется крутизна кривой спектра флуоресценции модели в диапазоне 530-650 нм. Также проявляется локальный максимум на длине волны 620 нм, за который ответственен порфирин, расположенный на глубине 210-310 мкм. Переходя к регистрации зондами, уменьшается захватываемая область ткани на данной глубине, что приводит к сглаживанию спектральной кривой (рисунок 3) и информация о наличии порфирина в ткани теряется. Абсолютный сигнал основного максимума снижается с уменьшением площади, покрываемой собирающими волокнами, как следствие снижается чувствительность зонда к изменению состава флуорофоров в эпидермисе кожи.



Рис. 2. Спектр флуоресценции кожи при возбуждении лазерным излучением на длине волны 405 нм: а) полученный в результате эксперимента [4] и зафиксированный в модели с детектором площадью S=1,27 см²; б) зарегистрированный спектр модели кожи, разложенный по источникам флуоресцентного сигнала



Рис. 3. Спектры флуоресценции модели кожи, возбужденной лазерным излучением с длиной волны 405 нм, зарегистрированные с помощью оптоволоконных зондов различной конфигурации

Основной вклад в регистрируемый спектр флуоресценции кожи при возбуждении лазерным излучением 295 нм вносит триптофан, расположенный в эпидермисе модели кожи (рисунок 4). С уменьшением площади собирающих волокон зондов абсолютный сигнал падает, но сохраняет спектральную форму (рисунок 5).



Рис. 4. Спектр флуоресценции кожи при возбуждении лазерным излучением на длине волны 295 нм: а) полученный в результате эксперимента [5] и зафиксированный в модели с детектором площадью S=1,27 см²; б) зарегистрированный спектр модели кожи, разложенный по источникам флуоресцентного сигнала



Рис. 5. Спектры флуоресценции модели кожи, возбужденной лазерным излучением с длиной волны 295 нм, зарегистрированные с помощью оптоволоконных зондов различной конфигурации

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате работы смоделированы спектры флуоресценции кожи при возбуждении лазерным излучением на длинах волн 295 нм и 405 нм и проведено сравнение различных оптических схем регистрации данных спектров. Поскольку концентрации флуорофоров и другие характеристики модели ткани оставались постоянными, то полученные различия в моделируемых спектрах (рисунки 3,5) связаны только с чувствительностью к глубине ткани различных конфигураций зондов. Около 90% всего захватываемого сигнала приходится на глубину от 0 до 210 мкм. Уменьшение диаметра волокон зонда в два раза приводит к снижению абсолютного значения сигнала в 2-3 раза. Форма спектральной кривой изменяется из-за уменьшения глубины выборки. Так, уменьшение вклада порфирина (рисунки 2,3) происходит вследствие снижения чувствительности оптоволоконных зондов к глубине 210-310 мкм, на которой порфирин был расположен в модели кожи. Итак, при анализе экспериментально полученного спектрального отклика от многослойной биологической ткани, такой как кожа человека, необходимо учитывать оптическую схему и эффективность сбора применяемого оптоволоконного зонда к анализируемой глубине образца для корректной интерпретации результатов эксперимента.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. A.V. Dunaev et al. Individual variability analysis of fluorescence parameters measured in skin with different levels of nutritive blood flow //Medical engineering & physics, 2015, v. 37, №. 6, P. 574-583.
- 2. В.В. Тучин, Оптика биологических тканей. Методы рассеяния света в медицинской диагностике / В.В. Тучин. М.: Физматлит, 2013. 812 с.
- 3. A.O. Ustinova, I. A. Bratchenko, D.N. Artemyev, Monte Carlo simulation of skin multispectral autofluorescence/ Journal of Biomedical Photonics & Engineering, 2019, v.5, №2, P. 020306.
- 4. E.G. Borisova, L.P. Angelova, E.P. Pavlova, Endogenous and exogenous fluorescence skin cancer diagnostics for clinical applications, IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 2013, v.20, №2, P. 211-222.
- 5. L. Brancaleon et al. The in vivo fluorescence of tryptophan moieties in human skin increases with UV exposure and is a marker for epidermal proliferation //Journal of investigative dermatology, 1999, v.113, № 6, P. 977-982.

MODELING OF DEPTH-SELECTIVE REGISTRATION OF THE SKIN FLUORESCENT RESPONSE BY VARIOUS FIBER OPTIC SYSTEMS CONFIGURATIONS

A.A. Shatskaya, D.N. Artemyev

Samara National Research University, (Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086) e-mail: shatskaya16@gmail.com

This paper presents a simulation of various configurations of fiber optic probes that implement selective registration of the spectral response from skin layers. The impact of the registration channel of the optical scheme on the skin fluorescence spectrum was analyzed upon excitation by laser radiation with a wavelength of 295 nm and 405 nm. We compared the model skin fluorescence spectra with experimental spectra from real tissue. It has been observed that it is necessary to take into account the optical design and the efficiency of collecting fiber probe in examining the spectral response from a multilayer biological tissue such as human skin. Because for fixed parameters of the tissue site under investigation, the recorded fluorescence spectrum at the detector varies depending on the sensitivity of the probe to individual layers of the biological tissue.

Keywords: fiber optic probe, human skin model, endogenous fluorophores, fluorescence spectroscopy, human skin model, Monte Carlo modeling.

СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ БИОИМПЛАНТАТОВ ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ РЕЦЕССИИ ДЕСНЫ

<u>Е.Ф. Ягофарова</u>¹, О.О. Фролов¹, Е.В. Тимченко¹, П.Е. Тимченко¹, Л.Т. Волова²

¹Самарский национальный исследовательский университет (443086, г. Самара, ул.Московское шоссе, 34) ²Самарский государственный медицинский университе (443099, г. Самара, ул.Чапаевская,89) e-mail: l_yagofarova@mail.ru

Показаны результаты экспериментального исследования спектральных особенностей компонентного состава образцов биоимплантов твердого нёба, изготовленных по технологии «Лиопласт» с помощью метода спектроскопии комбинационного рассеяния (КР). Спектроскопия КР может быть использована для оценки изменения состава имплантатов на основе твердого нёба в процессе их обработки. Установлено, что основные различия проявляются на волновых числах 1002 и 1030 см⁻¹ (фенилаланин), 1062 см⁻¹ (GAGs), 1204 см⁻¹ (тирозин), 1421 и 814 см⁻¹ (ДНК / РНК),1555 и 1660 см⁻¹ (амид II и амид I).

Ключевые слова: спектроскопия комбинационного рассеяния, спектральный анализ, биоимпланты, рецессия десны, «ЛИОПЛАСТ».

1. ВВЕДЕНИЕ

Регенерация тканей подвергшейся атрофии десны при адентии является одной из задач в современной стоматологии. Также при трансплантации нативных имплантов имеется риск иммунного отторжения имплантата и увеличение срока приживляемости у реципиента [1]. В тканевой инженерии ставится задача на разработку и контроль качества материалов, которые смогут восстанавливаться или заменять любую функцию поврежденных тканей и органов.

При данном заболевании пациентов обычно беспокоит эстетика, повышенная чувствительность обнаженных корней зубов, неприятные ощущения при их чистке, кариес [2]

Из факторов, способствующих развитию и прогрессии формирования рецессий, наиболее значимыми являются: воспалительные процессы в полости

рта, вызванные несоблюдением гигиены, возрастные физиологические изменения, наследственность [3].

заболеваний, Для лечения связанных с адентией, В качестве пластического материала используется аллогенная биоткань, произведенная по уникальной отечественной технологии «ЛИОПЛАСТ», на основе твердого нёба человека. Применение аллогенного материала является оптимальным решением, как для множественной рецессии, так и для одиночной рецессии. Благоприятный результат вживления биоимпланта зависит от качества технологий производства материалов с сохранением необходимых компонентов биоткани такие как коллаген, гликозамингликаны, протеогликаны [4] и удалению клеточных компонентов (ДНК, РНК).

На текущий год существуют методы контроля качества обработки биоимплантатов такие как гистологический, молекулярный и биохимический анализ. Данные методы дают качественную и количественную оценку структурного состава биоматрикса, за исключением того, что все методы контроля являются разрушающими, а также для вывода результатов гистологического и цитологического анализа требуется значительное количество времени. В связи с этим, для контроля состава биотканей необходимо использовать оптические методы, которые являются неинвазивными. Одним из наиболее распространенных оптических методов оценки качества биоимплантата является спектроскопия комбинационного рассеяния (СКР) [5].

Метод СКР дает возможность контролировать компонентный состав биоматериалов, И при ЭТОМ имеет достоинства В виде простоты пробоподготовки, большого объема получаемой малоинвазивности, информации, оперативности исследований [4, 5, 6].

Цель работы: провести спектральный анализ биоимплантатов для лечения рецессии десны.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

В качестве образцов исследований были использованы биоимплантаты из твердого нёба лиофилизированные и нелиофилизированные, обработанные с использованием технологии «ЛИОПЛАСТ» (ТУ-9398-001-01963143-2004).

Для анализа образцов был использован метод СКР. Исследование производилось с помощью высокоразрешающего цифрового спектрометра Shamrock sr-303i, совмещенным с лазерным модулем LuxxMaster LML-785.0RB-04 (мощность до 500 мВт, длина волны 785 нм) и встроенной охлаждаемой камерой DV420A-OE, обеспечивающей спектральное разрешение 0,15 нм (спектральный диапазон 200-1200 нм) (рисунок 1)



1– объект; 2– КР пробник RPB785; 3 - лазерный модуль Luxx Master Raman Boxx; 4 – источник питания лазерного модуля; 5 - спектрометр Shamrock sr-303i; 6 - встроенная охлаждаемая камера DV420A-OE; 7 – компьютер; 8, 9, 10 – информационные электрические кабели; 11 – передающее оптоволокно; 12 – приёмное оптоволокно

Рис. 1. Макет экспериментального стенда

Выделение спектра КР на фоне автофлуоресценции проводилось методом полиномиальной аппроксимации флуоресценции и её вычитания из регистрируемых спектров в программе Wolfram Mathematica. На выбранном интервале 400-2200 см⁻¹ при помощи итерационного алгоритма определяли аппроксимирующую линию (полином пятой степени) автофлуоресцентной составляющей и затем вычитали эту составляющую, получая выделенный спектр КР [7]. Исследуемые спектры при обработке очищали от шумов сглаживающим медианным фильтром по 7 точкам.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

Усреднённые нормализованные спектры КР образцов твердого нёба в области волновых чисел 750 – 1800 см⁻¹ представлены на рисунке 2. Чтобы осуществить более подробный и качественный анализ, с помощью метода подбора спектрального контура и деконволюции функции Гаусса в программной среде MagicPlotPro 2.7.2 был произведён нелинейный

регрессионный анализ спектров КР, состоящий в их разложении на спектральные линии.



Рис. 2. Моделирование спектрального контура образцов твердого нёба

Для относительной количественной оценки компонентного состава образцов твердого нёба нами были введены относительные коэффициенты. Относительно постоянным компонентом в исследуемых образцах являлся амид III [4], соответствующий области волновых чисел 1230-1280 см⁻¹, поэтому амплитуда разделенной линии амида III была использована в качестве знаменателя (I₁₂₇₂) во введённых коэффициентах (k):

$$k_i = \frac{I_i}{I_{1272}},$$
 (1)

где I_i – значения интенсивности на волновых числах анализируемых компонентов.

С помощью РСА – анализа посмотрим различия между двух групп образцов (рисунок 2).

Основные различия описывает главная компонента PC-1, показывая, что положительные значения в главной степени характерны для лиофилизированных образцов, а отрицательные – для нелиофилизированных образцов. При этом, чем выше значение PC-1 для переменной, тем в большей степени она влияет на наблюдаемую разницу в компонентном составе, что, например, видно из значения коэффициента k₁₆₆₀. Из рисунка 3 видно, что интенсивность спектральной линии 1660 см⁻¹, соответствующей колебаниям амида I, выше для образцов без обработки лиофилизацией.



Рис. 3. График РСА счетов спектров КР образцов твердого нёба

Исходя из этого, поле данных на рисунке 3 было разделён на три области (рисунок 4), где 2 – переходная область, содержащая компоненты биоматрикса, не изменяющиеся в процессе обработки и характерные для обеих групп образцов.



Рис. 4. График РСА нагрузок спектральных линий спектров КР образцов твердого нёба: 1 – область, содержащая компоненты биоматрикса, превалирующие в нелиофилизированных образцах; 2 - переходная область, где находятся не изменяющиеся компоненты; 3 - область, содержащая компоненты биоматрикса, превалирующие в лиофилизированных образцах

Качество изготавливаемого биоимплантата зависит от степени удаления клеточных компонентов (ДНК, РНК) и сохранности после обработки основных компонентов экстраклеточного матрикса: коллаген, гликозамингликаны, липиды [8].
Таким образом, при использовании спектрального анализа спектров комбинационного рассеяния с математическими методами улучшения разрешения спектральных контуров и хемометрическим анализом РСА для оценки биоимплантатов, показано, что при их обработке очищаются компоненты, отрицательно влияющие на их качество, при этом сохраняется необходимый уровень экстраклеточного матрикса: гликозамингликанов, коллагенов, пролинов, гидроксипролинов и фенилаланинов, значимые для приживляемости биоимплантата, и получение качественного экстраклеточного матрикса.

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведена сравнительная спектральная оценка компонентного состава поверхностей образцов имплантатов твердого нёба, изготовленных по технологии «Лиопласт», с обработкой лиофилизации и без нее.

Были выявлены основные различия на волновых числах 1002 и 1030 см⁻¹ (фенилаланин), 1062 см⁻¹ (ГАГи), 1204 см⁻¹ (тирозин), 1421 и 814 см⁻¹ (ДНК / РНК),1555 и 1660 см⁻¹ (амид II и амид I). Введены коэффициенты и проведён двумерный анализ, который показал, что после обработки лиофилизацией сохраняются основные компоненты биоматрикса, что повышает качество материала, обеспечивающего возможность хорошего клинического эффекта при регенеративных процессах.

С помощью метода СКР было показано, что после обработки биоимплантатов лиофилизацией вычищаются компоненты, отрицательно влияющие на их качество, при этом сохраняется необходимый уровень экстраклеточного матрикса: гликозамингликанов, коллагенов, пролинов, гидроксипролинов и фенилаланинов, значимые для процесса приживляемости имплантата, и получение качественного экстраклеточного матрикса.

Метод СКР является оптимальным, качественным, быстрым и неинвазивным методом для оценки компонентного состава биоматериалов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. С.А. Муслимов, Морфологические аспекты регенеративной хирургии // Уфа, Башкортостан, 2000 с. 168 с.
- J.F. Johnson, Modern practice in crown and bridge prosthodontics // Operative Dentistry, Philadelphia, 1971 c. 184–186
- 3. И.Р. Ганжа, Т.Н. Модина, А.М. Хамадеева, Рецессия десны. Диагностика и методы лечения // Самара: ООО ИПК «Содружество», 2007, с. 52-54.

- 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 T. 85 № 3, c. 130-135.
- 5. T. Saxena, B. Deng, D. Stelzner, J. Hasenwinkel., J. Chaiken, Raman spectroscopic investigation of spinal cord injury in a rat model // Journal of Biomedical Optics, 2011 T.16 № 2.
- P.E. Timchenko, E.V. Timchenko, D.A. Dolgushkin, L.T. Volova, M.D. Markova, Application of Raman spectroscopy to assess the condition of bone and cartilaginous biopsy specimens // Journal of Optical Technology, 2017, т. 84 № 6, с. 423-425.
- J. Zhao, H. Lui, D. I. Mclean, H. Zeng, Society for applied spectroscopy, 2007, т. 61 № 11, с. 1225–1232.
- P.E. Timchenko, E.V. Timchenko, L.T. Volova, M.A. Nosova, O.O. Frolov, N.K. Kiyko, N.V. Volov, Optical Analysis of Implants from the Dura Mater // Optical Memory and Neural Networks, 2018, T. 27 № 1, c. 46–52.

SPECTRAL ANALYSIS OF BIOIMPLANTS FOR TREATMENT OF GUM RECESSION

<u>E.F. Yagofarova</u>¹, O.O. Frolov¹, E.V. Timchenko¹, P.E. Timchenko¹, L.T. Volova²

¹Samara National Research University, (Moskovskoye shosse, 34, Samara, Russia, 443086) ²Samara State Medical University, (443099, Samara, Chapaevskaya st., 89) e-mail: l_yagofarova@mail.ru

The results of an experimental study of the spectral features of the component composition of samples of hard palate bioimplants made using the «LIOPLAST» technology using the Raman spectroscopy method are shown. Raman spectroscopy can be used to assess changes in the composition of hard palate implants during processing. It was found that the main differences appear at wave numbers 1002 and 1030 cm⁻¹ (phenylalanine), 1062 cm⁻¹ (GAGs), 1204 cm⁻¹ (tyrosine), 1421 and 814 cm⁻¹ (DNA / RNA), 1555 and 1660 cm⁻¹ (amide II and amide I).

Keywords: Raman spectroscopy, spectral analysis, bioimplants, gum recession, «LIOPLAST».

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ПЛАЗМУ КРОВИ

А.В. Неупокоева, Д.А. Гаврилов, А.С. Якутин

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

Статья посвящена исследованию воздействия лазерного излучения $(\lambda = 650 \text{ нм}, \text{мощностью 5 мBt}$ и с $\lambda = 530 \text{ нм}, \text{мощностью 15 mBt})$ на плазму крови человека. Контроль структурных изменений в плазме производился кристаллографическим методом, в качестве численной оценки использовался средний размер сегмента кристаллограммы. Воздействие лазерным излучением с $\lambda = 530 \text{ нм}$ привело к уменьшению характерного размера сегмента кристаллограммы на 30%, а воздействие с $\lambda = 650 \text{ нм}$ не вызывало статистически значимых изменений в структуре плазмы.

Ключевые слова: лазерная биостимуляция, плазма крови, кристаллограмма.

1. ВВЕДЕНИЕ

Лазерное излучение широко применяется в медицинской практике. В зависимости от свойств излучения: длины волны, а также интенсивности излучения оно способно оказывать как отрицательные (деструкция тканей, ожоги), так и положительное воздействие на организм (стимуляция репаративных процессов, снижение отечности тканей и воспаления, улучшение метаболизма тканей) [1].

При этом остается недостаточно изученным механизм лазерного воздействия, как на местном уровне, так и на уровне организма в целом. В последнее время появился ряд работ, в которых предполагается, что лазерное излучение взаимодействует с белками крови, изменяя их структуру и функциональную активность [2,3,4]. В рамках этой гипотезы, лазерное излучением может взаимодействовать как с белками клеточных элементов крови (эритроцитов, лейкоцитов и др.), так и с белками плазмы. Однако воздействие лазерного излучения на бесклеточные биологические среды исследовано недостаточно. Возможное влияние на структуру плазмы крови человека могут носить положительный характер и найти своё применение в сфере трансфузионной терапии. Целью данного исследования является

доказательство наличия влияния лазерного излучения низкой энергии на структуру плазмы крови человека.

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Для проведения эксперимента были выбраны зеленый и красный лазеры, с длинами волн 530 и 650 нм соответственно, мощность лазерных источников составляла 5 мВт для красной длины волны и 15 мВт для зеленой длины волны.

Плазма крови человека была предоставлена станцией переливания крови в замороженном виде. Перед началом опытов плазма размораживалась при комнатной температуре.

Всего было произведено 4 серии опытов для излучения с зелёной длиной волны и 5 серий опытов для излучения с красной длиной волны. В начале исследования в каждой серии опытов отбирались образцы плазмы крови, которые не подвергались облучению лазера. Затем плазма набиралась в кювету и подвергалась воздействию лазерным излучением. По прошествии 1 минуты, 2, 5, 10 и 20 минут из кюветы забирался образец плазы крови объемом 1 мл. Этот образец наносился на предметное стекло. После высыхания образца проводилась микроскопия на малом увеличении (10х) и регистрация полученных сегментов в каждом образце. Затем выполнялись расчеты для обнаружения статистической значимости изменений в количестве сегментов после облучения лазером.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В ходе эксперимента по выявлению воздействия лазерного излучения на белки плазмы крови результаты, полученные при облучении лазерами разных отличались. Результаты длин волн, фиксировались с помощью приготовленных препаратов облученной плазмы И микроскопа. Предполагалось, что в зависимости от наличия влияния лазерного излучения на облучаемую плазму, высохшие препараты будут отличаться друг от друга по количеству и размеру сегментов. Так при облучении лазерным излучением с длиной волны 650 нм статистически значимых изменений в размере и количестве сегментов выявлено не было. Статистическая обработка результатов методом дисперсионного анализа показала, что все расхождения находились в пределах случайных изменений. При воздействии лазерным излучением с длиной волны 530 нм наблюдалось сначала увеличение размеров сегментов (до пятой минуты) а затем – уменьшение (Рис. 1).



Рис. 1. Изменение среднего размера сегмента кристаллограммы в зависимости от времени лазерного воздействия на плазму крови

Данные изменения исходя из проведенной статистической обработки не являются случайными. Отсутствие схожей динамики при облучении красным лазером объясняется его недостаточной мощностью, для того чтобы вызвать структурные изменения плазмы.

Так как плазма – это бесклеточный белковый раствор, то становится очевидным, что мишенью воздействия лазерного излучения являются белки. По нашему мнению, может существовать два различных сценария взаимодействия лазерного излучения с белковыми молекулами.

Как известно, на разных уровнях организации белковой молекулы существуют разные по прочности химические связи: первичная структура – пептидные связи (ковалентные, прочные); вторичная структура – водородные связи (непрочные); третичная структура – водородные, гидрофобные взаимодействия, дисульфидные (прочные); четвертичная структура (для некоторых белков) – ионные, водородные, гидрофобные взаимодействия (слабые). Энергия кванта лазерного излучения в применяемом нами диапазоне мала, чтобы разорвать пептидные или дисульфидные связи, но достаточна для разрыва водородных связей или дестабилизации гидрофобного участка, т.к. в этих случаях энергия связи на порядок меньше, чем при ковалентном взаимодействии. Поэтому лазерное излучение способно изменять вторичную, третичную и четвертичную структуру белка, не затрагивая первичную

структуру, что приводит как к изменению конфигурации отдельных молекул, так и к распаду крупных молекулярных комплексов на более мелкие.

Второй сценарий связан с наличием гидратной оболочки вокруг белковой молекулы. Соответственно лазерное излучение, способное сообщать энергию белковой молекуле может дестабилизировать гидратную оболочку белковых молекул, облегчая структурные перестройки. Также излучение может вывести белок из термодинамического равновесия и разорвать слабые связи внутри молекулы на 2 и/или третичном уровне организации, чем вызывать структурные изменения.

Следовательно, картину, наблюдаемую в ходе эксперимента с лазерным излучением зеленого диапазона, можно объяснить, используя оба этих сценария. Сначала белки получают излишек энергии от лазерного излучения, отчего изменяется баланс сил взаимодействия белка и его гидратной оболочки, белки получают возможность освободиться от нее. Без гидратной оболочки они начинают взаимодействовать между собой и с заряженными ионами, образуя крупные конгломераты. Параллельно с этим начинается структурная перестройка белковых молекул. От избыточной энергии слабые связи рвутся, белок меняет свою структуру, изменяется его активность. После пятой минуты мы видим преобладание второго процесса над первым. Судя по всему, уменьшение сегментов на кристаллограмме связано с изменениями структуры белковых кластеров: с одной стороны, из-за разрыва водородных связей между макромолекулами, кластер распадается на более мелкие ассоциаты. С другой стороны, макромолекулы под действием лазерного излучения стремятся упаковаться более плотно, так, чтобы их суммарный дипольный момент равнялся нулю.

Стоит отметить, что воздействие лазерного излучения предположительно отличается по силе в зависимости от типа белка и от его размера. В плазме крови располагаются альбумины, фибриноген, альфа-, бета-, и гаммаглобулины.

Из-за того что структурная перестройка белка происходит в незначительной степени, для живого организма подобное воздействие может оказать положительный эффект, так как само излучение не нанесет существенных повреждений, часть белков восстановится самостоятельно спустя некоторое время, и в то же время в живой системе может произойти активация отдельных белков. Например, лазерное излучение, являясь стрессовым фактором, может способствовать синтезу белков теплового шокакласса белков, синтезируемых при обнаружении изменения структуры

обычных белковых молекул, и отвечающих за восстановление правильной структуры, сборку других белков; участвующих в иммунном ответе. Таким образом, изменение функциональной активности одних белков влияет на структуру и выработку других, что в целом обеспечивает сложный иммунный ответ не только в месте воздействия, но и в организме в целом.

4. ВЫВОДЫ

Таким образом, после проведенных исследований можно сделать вывод о то, что воздействие лазерным излучением с красной длинной волны не вызывало статистически значимых изменений в структуре сегментов в приготовленных препаратах из плазмы крови человека, что объясняется недостаточной мощностью красного лазера. Однако при воздействии зеленой длинной были лазерным излучением с волны изменения зарегистрированы: до 5-й минуты наблюдалось увеличение размеров сегментов, а затем их уменьшение. Также, можно сказать, что при воздействии на плазму крови лазерным излучением происходят изменения в белковых молекулах, а именно действие излучения направленно на химические связи в белках и на гидратную оболочку.

Это является хорошей отправной точкой для обсуждения и дальнейших исследований. Они должны детально рассмотреть взаимодействие белков плазмы человека и лазерного излучения низкой энергии с разными длинами волн.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лазерная терапия и профилактика. Под ред. А.В. Картелишеваи др. – М.: Практическая медицина, 2012.

2. Залесская Г.А., Самбор Е.Г. Взаимодействие низкоинтенсивного лазерного излучения с кровью и ее компонентами. Журнал прикладной спектроскопии. 2005. Т. 72. № 2. С. 230-235.

3. Malov A.N., Seteikin A.Yu., Neupokoeva A.V., Musatova E.S., Golub I.E., Sorokina L.V., Fetschenko V.S., Vaichas A.A. The laser radiation action on the biological objects // Optik, 2013, **124**, 6034- 6041.

4. Москвин С.В. Основы лазерной терапии. Серия "Эффективная лазерная терапия". – М. – Тверь: ООО "Издательство "Триада", 2016. – 896 с.

RESEARCH THE INFLUENCE OF LASER RADIATION ON BLOOD PLASMA

A.V. Neupokoeva, D.A. Gavrilov, A.S. Yakutin

Irkutsk State Medical University (664003, Irkutsk, Krasniy Vosstaniya st., 1)

The article is devoted to the study of the effect of laser radiation (λ =650 nm, power was 5 mW and λ =530 nm, power was15 mW) on human blood plasma. Structural changes in the plasma were monitored by the crystallographic method, and the average size of the crystallogram segment was used as a numerical estimate. Exposure to laser radiation with λ =530 nm reduced the characteristic size of the crystallogram segment by 30%, and exposure with λ =650 nm did not cause statistically significant changes in the plasma structure.

Key words: laser biostimulation, blood plasma, crystallogram

ИССЛЕДОВАНИЕ МНОГОСЛОЙНЫХ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ СТРУКТУР Ge₂Sb₂Te₅/ITO/Al ДЛЯ СОЗДАНИЯ ОПТИЧЕСКИХ ОТРАЖАЮЩИХ ДИСПЛЕЕВ

В.Б. Глухенькая

Национальный исследовательский университет «МИЭТ» (124498, г. Москва, г. Зеленоград, площадь Шокина, д. 1) e-mail: <u>kapakycek2009@yandex.ru</u>

В настоящей работе исследованы многослойные тонкопленочные структуры $Ge_2Sb_2Te_5$ /ITO/Al и влияние фазового состояния $Ge_2Sb_2Te_5$ (GST225) на их оптические параметры. Показано, что толщина слоя ITO определяет цвет формируемой структуры, а фазового состояние GST225 (аморфное или кристаллическое) обеспечивает управление ее оттенком. Оптимизация геометрически параметров каждого слоя исследуемой многослойной структуры $Ge_2Sb_2Te_5/ITO/Al$ с целью получения определенных RGB-цветов была проведена посредством моделирования спектров отражения и расчета цветовых CIE-координат. Продемонстрирована возможность расширения цветовой гаммы sRGB-пространства за счет применения тонких пленок GST225.

Ключевые слова: отражающие дисплеи, Ge2Sb2Te5, материалы с изменяющимся фазовым состоянием, тонкие пленки, CIE,

1. ВВЕДЕНИЕ

Оптические дисплеи являются незаменимым элементом визуального отображения информации и широко используются в различных портативных устройствах беспроводной И носимой электроники. В современных дисплейных LED- и OLED-технологиях изображение формируется в лучах прошедшего через пиксельную матрицу света. Работать в автономном режиме LED/OLED дисплеи не могут, т.к. для отображения информации требуется постоянное потребление энергии. Альтернативной является технология, позволяющая формировать изображение в лучах отраженного света. Однако малое цветовое разнообразие пикселей отражающих дисплеев и их низкая скорость переключения (~100 мс) не позволяют воспроизводить полноцветное динамическое видео. Таким образом, актуальной научнопрактической задачей является создание полноцветного энергонезависимого

дисплея с низким уровнем энергопотребления и расширенной цветовой палитрой.

Принципиально новые дисплеи могут быть спроектированы на основе многослойных структур, включающих слои тонких пленок материала Ge₂Sb₂Te₅, активно применяющегося для создания элементов интегральной оптики и оптических устройств фазовой памяти (DVD-, BD-disc, Intel 3D XPoint) и слоев ITO. В видимом диапазоне света материалу Ge₂Sb₂Te₅ свойственно параметров, существенное изменение оптических обусловленное фазовыми превращениями из аморфного состояния в кристаллическое ($\Delta n=1$ и $\Delta k=3$ при $\lambda=700$ нм). Данные превращения обратимы и могут быть инициированы термическим, импульсным лазерным или электрическим воздействиями.

Настоящая работа посвящена исследованию многослойных структур GST/ITO/A1 и влиянию фазового состояния Ge₂Sb₂Te₅ на изменение их оптических параметров с целью осуществления возможности управления и контроля световым потоком для создания полноцветной энергонезависимой пиксельной RGB-матрицы.

2. МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Тонкие пленки Ge₂Sb₂Te₅ (7 нм), ITO (t нм, где t = 50, 100, 180, 205 и 250 нм) и Al (100 нм) формировались методом магнетронного распыления материалов мишени в атмосфере Ar на термически окисленные кремниевые подложки ($h_{SiO2} = 1$ мкм). Контроль толщины осаждаемых слоев проводился методом стилусной профилометрии (KLA Tencor P-7) по образцамспутникам. Толщины слоев выбирались по результатам анализа научно-технической литературы сопоставлялись И с результатами математического моделирования. Моделирование выполнялось в среде Mathcad по формулам Френеля, для многослойных систем с учетом спектров показателя преломления n(λ) и коэффициента измеренных экстинкции k(λ) для каждого слоя моделируемой многослойной структуры.

Спектральные характеристики сформированных структур исследовались методами эллипсометрии и спектофотометрии. Оптические параметры – показатель преломления $n(\lambda)$ и коэффициент экстинкции $k(\lambda)$ слоев ITO и GST в аморфном и кристаллическом состояниях – определялись в видимом интервале длин волн при помощи эллипсометра Sentech Senduro. Экспериментальные спектры коэффициента отражения $R(\lambda)$ измерялись на спектрофотометре ЛОМО СФ-56 с использованием приставки диффузного

отражения ПДО-6 в интервале длин волн $400 \div 850$ нм с шагом $\Delta \lambda = 5$ нм. В измерений образец освещался направленным процессе светом от стандартного источника освещения D65. Угол падения светового пучка к нормали поверхности составлял 8°. Отраженный световой поток собирался с помощью интегрирующей сферы. Спектры диффузного отражения получены с учетом зеркальной составляющей.

Изменение фазового состояния тонких пленок GST структуре В образцов исследуемых осуществлялось посредством термического воздействия. Фазовое состояние тонких пленок GST ДО И после термообработки определялось по результатам рентгенофазового анализа (PΦA, Rigaku Smart Lab). Состав образцов исследовался метолом энергодисперсионной (JEOL EDX System) и Ожэ-спектроскопии.

Для выявления цветовых зависимостей и определения оптимальных толщин, соотносящихся с конкретными RGB-цветами был произведен расчет

цветовых координат ХҮХ в цветовом CIE 1931 пространстве Расчет г. проводился основе результатов на измерений спектрального коэффициента отражения по формулам 1-3 [1]:

$$X = \int_{400}^{850} D(\lambda) R(\lambda) x(\lambda) d\lambda , \quad (1)$$

$$Y = \int_{400}^{850} D(\lambda) R(\lambda) y(\lambda) d\lambda , \quad (2)$$

$$Z = \int_{400}^{850} D(\lambda) R(\lambda) z(\lambda) d\lambda , \qquad (3)$$

где $D(\lambda)$ спектральная мощность _ Рисунок 1 – Алгоритм источника падающего света (в данной вычисления цветовых координат работе В расчётах использовался sRGB стандартный D65); источник света $R(\lambda)$ диффузного экспериментальный спектр отражения; $x(\lambda),$ y(λ), $z(\lambda)$ кривые сложения цветов XYZ стандартного колориметрического наблюдателя в цветовом пространстве CIE 1931 г.

В соответствии с рекомендациями СІЕ 709 переход от цветовых координат СІЕ ХҮΖ к координатам основных цветов СІЕ RGB производился с помощью матричных преобразований по формуле (4). Пересчет координат RGB CIE в координаты цветового пространства sRGB (r, g, b) выполнялся с помощью sRGB-преобразований. Для отображения полученных координат в

Определение пвета

Получение экспериментального спектра

диффузного отражения R(λ)

Расчет координат XYZ СІЕ 1931 г.

Пересчет координат XYZ CIE >> RGB CIE

Пересчет координат RGB CIE >> sRGB

привычном виде [0, 255] рассчитанные значения домножались на 255. Алгоритм вычисления цветовых координат sRGB пространства показан на рисунке 1, где R, G, B – это основные цвета с длинами волн R = 700 нм, G = 546,1 нм, B = 435,8 нм:

$$\begin{bmatrix} R\\ G\\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3,240479 & -1,537156 & -0,49853\\ -0,969256 & 1,875992 & 0,041556\\ 0,055648 & -0,204043 & 1,057311 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X\\ Y\\ Z \end{bmatrix},$$
 (4)

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

Схематическое изображение сформированных многослойных структур представлено на рисунке 2, (а). Данная структура состоит из двух функциональных слоев – прозрачного проводящего оксида ITO и материала с изменяющимся фазовым состоянием Ge₂Sb₂Te₅ (GST), а также металлического Al-слоя, играющего роль гладкой зеркальной поверхности.

Цвет формируемой структуры определяется толщиной слоя ITO и может изменяться в широком диапазоне. Слой материала GST отвечает за светопропускание и оттенок структуры, поэтому в данном слое в видимом диапазоне длин волн должно происходить как можно меньшее поглощение падающего света.

В видимой области спектра кристаллический GST (с-GST) отражает и поглощает света больше, чем аморфный (a-GST), поэтому, изменяя фазовое состояние GST, можно управлять световым потоком и регулировать яркость формируемой структуры. Согласно данным РФА исходные тонкие пленки GST находятся аморфном состоянии. Для В получения c-GST сформированные многослойные структуры отжигались в течение 15 минут при T = 220°C. Расшифровка рентгенограмм, полученных от образцов, прошедших термообработку, показала, что выбранный режим приводит к кристаллизации аморфных пленок Ge₂Sb₂Te₅ в fcc-структуру.

Внешний вид исследуемых многослойных структур сразу после осаждения GST и после термического отжига представлены на рисунке 2 (б). Из рисунка видно, что термическое воздействие приводит к изменению оттенка структуры, что позволяет осуществлять управление световым потоком и регулировать яркость формируемой структуры.



Рисунок 2 – Схематическое изображение (а) и внешний вид до/после отжига (б) исследуемых многослойных структур GIA

На рисунке 3, (а) изображены экспериментальные спектры отражения исследуемых структур. При переходе из аморфного в кристаллическое состояние спектральный максимум коэффициента отражения смещается в область коротковолнового излучения. Сравнение результатов моделирования с экспериментально полученными данными показало хорошее совпадение. Кроме того, спектры отражения структур, с толщиной ITO = 50, 100 и 180 нм имеют максимумы при 415, 525 и 765 нм, что близко к спектральным основных RGB-цветов. Толшины слоев ITO максимумам трех в смоделированных структурах отличаются от экспериментальных не более, чем на 12% и принимают значения, равные 60, 110, 200, 225 и 280 нм.

С момента развития цветных дисплеев было разработано много различных колориметрических систем, позволяющих определить границы цветового пространства и определить видимое множество цветов, которые могут быть переданы устройством отображения без искажения и потери яркости для наблюдателя. Система координат ХҮZ СIE 1931 г. является исходной системой для других аддитивных пространств, и позволяет выражать реально существующие R-, G-, B-цвета через координаты цветности ХҮZ. На рисунке 4, (а) изображена хроматическая СIE-диаграмма, представляющая цветовой охват человеческого зрения. Данная диаграмма ограничена спектральной линией цветовых тонов с отмеченными на ней длинами волн чистых неразбавленных цветов и линией пурпурных цветовых тонов (не спектральная).

Большинство современных дисплеев для представления цветов используют sRGB-пространство, цветовой охват которого существенно меньше классического пространства СІЕ; цвета, которые могут быть воспроизведены данным пространством лежат внутри области, ограниченной пунктирным треугольником (см. рис. 4, б).



Рисунок 3 – Спектры отражения полученные экспериментально (а) и в результате математического моделирования (б)

Согласно литературным данным [1], применение тонких пленок GST в технологии создания отражающих дисплеев позволит существенно расширить цветовую палитру благодаря различию показателей n и k в аморфном и кристаллическом состояниях. Круглыми и квадратными точками на рисунке 4, (б) отмечены рассчитанные по экспериментальным спектрам диффузного отражения цветовые координаты XYZ для всех исследуемых образцов. Из рисунка видно, что две точки ($h_{ITO} = 205$ нм/с-GST и $h_{ITO} = 250$ нм/а-GST) выбиваются из области, охваченной пунктирным треугольником, что свидетельствует о возможности воспроизведения данных цветов в sRGB-пространстве исключительно с помощью тонких пленок GST.



Рисунок 4 – Цветовая диаграмма классического СІЕ-пространства (а) и возможности расширения цветового охвата sRGB-пространства с применением тонких пленок GST (б)

4. ВЫВОДЫ

В ходе проведения экспериментальных исследований было установлено, что в структурах GST/ITO/Al толщина ITO определяет цвет исследуемой структуры, а фазовое состояние GST – ее оттенок. Сопоставление экспериментальных спектров отражения с результатами моделирования показало возможность определения цвета формируемой структуры в широком интервале толщин ITO, что может быть использовано для создания полноцветной энергонезависимой пиксельной RGB-матрицы.

Расширение цветовой гаммы возможно за счет формирования различной доли кристаллической фазы в объеме тонкой пленки GST и за счет пропускной способности верхнего слоя ITO в четырехслойной структуре ITO/GST/ITO/A1, что предполагается изучить в дальнейших исследованиях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. P. Hosseini. An optoelectronic framework enabled by low-dimensional phase-change films // Nature. – Vol. 511. – 2014. – P. 206-211.

GUIDELINES FOR PAPER LAYOUT

V.B. Glukhenkaya

National Research University of Electronic Technology "MIET" (Shokin sq., 1, Moscow, Zelenograd, Russia, 124498) e-mail: kapakycek2009@yandex.ru

Influences of the Ge2Sb2Te5 (GST225) phase state and thickness of the functional films on the optical parameters of multilayer GST225/ITO/Al structure were investigated. It was shown, that the ITO thickness determine the primary color, while the GST phase state – the tint of the investigated structure Simulation reflective spectra and calculation of CIE color coordinates allowed to optimize multilayer GST225/ITO/Al structure and identify thickness of each layer necessary for obtaining certain RGB-colors. In this work we also demonstrated how the sRGB colour gamut can be expanded by application of GST225 thin films.

Keywords: GST225, reflective displays, PCM, SRD, thin films, CIE, sRGB