

## СПЕКТРОСКОПИЯ, ДИАГНОСТИКА И ТОМОГРАФИЯ

### Управление радиочастотным полем в магнитно-резонансной томографии на ядрах фтора $^{19}\text{F}$

*Н.В. Анисимов, М.В. Гуляев, Д.В. Волков, О.С. Павлова, Ю.А. Пирогов* ..... 4

### Новый взгляд на рН воды

*В.Г. Артемов, А.А. Волков, Н.Н. Сысоев, А.А. Волков* ..... 6

### Спектроскопия фрустрированного антиферромагнетика $\text{Ni}_3\text{V}_2\text{O}_6$

*К.Н. Болдырев, А.Д. Молчанова, Р.В. Писарев* ..... 8

### Неконтролируемая примесь $\text{Vi}^{3+}$ в $\text{RFe}_3(\text{VO}_3)_4$ : влияние на физические свойства

*К.Н. Болдырев, М.Н. Попова, И.А. Гудим, Темеров, Л.Н. Безматерных* ..... 11

### Нелинейные волны и структурные переходы в ДНК

*А.Н. Бугай* ..... 14

### Особенности эхо-спектроскопии тонких поликристаллических полупроводниковых пленок

*Н.С. Вашурин, И.И. Попов* ..... 18

### Механизм СВЧ-нагрева воды

*А.А. Волков* ..... 21

### Акустическое поле в неоднородных средах в виде костей черепа

*Л.И. Гильфанова, С.А. Цысарь, П.В. Юлдашев, В.Д. Свет* ..... 22

### Новый метод определения хиральности водных сред и ее классификации

*А.В. Хахалин, О.Н. Градобоева* ..... 27

### Режим перемежаемости перемежаемостей в поведении характерных осцилляторных паттернов на эпилептической ЭЭГ

*В.В. Грубов, Е.Ю. Ситникова, А.А. Короновский, А.Е. Храмов* ..... 31

### Рентгенография и спектроскопия редкоземельных галлиевых боратов со структурным типом хантита

*Е.А. Добрецова, К.Н. Болдырев, Е.Ю. Боровикова, С.М. Аксенов, С.А. Кокарев* ..... 34

### Оптические и магнитные свойства редкоземельных хромовых боратов $\text{RCr}_3(\text{VO}_3)_4$ , где $R = \text{Gd}, \text{Dy}, \text{Ho}$

*Е.А. Добрецова, К.Н. Болдырев, С.Ю. Гаврилкин* ..... 36

<b>Температурная зависимость константы скорости реакции димольного излучения синглетного кислорода в полосе 634 нм</b>	
<i>А.С. Инсапов, М.В. Загидуллин.....</i>	38
<b>Сопоставление методов восстановления параметров системы барорефлекторной регуляции артериального давления</b>	
<i>Ю.М. Иибулатов, А.С. Караваев, В.И. Пономаренко, М.Д. Прохоров, Б.П. Безручко ....</i>	40
<b>Исследование распределения тяжелых ядер в организме лабораторных животных с применением мультиядерной МРТ визуализации</b>	
<i>А.В. Косенков, М.В. Гуляев, Н.В. Анисимов, В.И. Лобышев, Ю.А. Пирогов .....</i>	44
<b>СВЧ фотопроводимость двусторонних кремниевых солнечных элементов <math>p^+ - n - n^+</math> типа при освещении лазером</b>	
<i>О.Г. Кошелев, Г.Г. Унтила .....</i>	48
<b>Проблемы нелинейной акустической томографии третьего порядка на основе кодированных волн</b>	
<i>Р.В. Крюков, О.Д. Румянцева, П.А. Иванова.....</i>	51
<b>Исследование нанокompозитов с квантовыми точками CdSe методом люминесцентной микроскопии с высоким пространственным разрешением</b>	
<i>К.А. Магарян, М.А. Михайлов, К.Р. Каримуллин, М.В. Князев, И.Ю. Еремчев, А.В. Наумов, И.А. Васильева .....</i>	55
<b>Механизм самоорганизации в поверхностном микрослое воды с использованием термокапиллярной конвекции</b>	
<i>М.Е. Мазуров, В.А. Твердислов.....</i>	58
<b>Нелинейная динамика вогнутых спиральных автоволн, переносящих энергию и их приложения</b>	
<i>М.Е. Мазуров, И.М. Калюжный.....</i>	62
<b>Диэлектрическая спектроскопия и микроволновое воздействие на материалы</b>	
<i>А.К. Малышкин, И.А. Малышкина, Ю.А. Пирогов .....</i>	66
<b>Измерение распределения толщины оптически прозрачных объектов на основе акустооптической фильтрации интерференционных изображений</b>	
<i>А.С. Мачихин, Л.И. Бурмак, В.Э. Пожар.....</i>	68
<b>Обнаружение новых магнитных фазовых переходов в <math>CuV_2O_4</math> методом ЛМД спектроскопии высокого разрешения</b>	
<i>К.Н. Болдырев, А.Д. Молчанова, Р.В. Писарев .....</i>	71

<b>Метод интеграла Рэлея для исследования импульсных ультразвуковых источников</b>	
<i>Д.А. Николаев, С.А. Цысарь.....</i>	<i>74</i>
<b>Температурная трансформация микроволновых диэлектрических спектров сегнетовой соли в модели динамической проводимости</b>	
<i>Г.И. Овчинникова, И.Ю. Полякова, А.П. Еремеев.....</i>	<i>77</i>
<b>Метод оптической регистрации акустических полей в жидкостях</b>	
<i>С.А. Петросян, С.А. Цысарь, В.Д. Свет, Д.А. Дементьев, А.В. Чуренков.....</i>	<i>80</i>
<b>Магнитно-резонансная томография и локальная ЯМР спектроскопия на ядрах фтора-19</b>	
<i>Ю.А. Пирогов.....</i>	<i>84</i>
<b>Получение спектральных голографических изображений прозрачных объектов на основе акустооптической фильтрации излучения в интерферометре Маха-Цендера</b>	
<i>А.С. Мачихин, В.Э. Пожар, О.В. Польщикова, А.Г. Рамазанова.....</i>	<i>85</i>
<b>Модель геоакустической томографии на волнах поверхностного типа</b>	
<i>Д.А. Преснов, А.Л. Собисевич, А.С. Шуруп.....</i>	<i>87</i>
<b>Автоволновая самоорганизация в природно-антропогенных экосистемах</b>	
<i>А.Э. Сидорова, Н.Т. Левашова, А.А. Мельникова, Н.Н. Дерюгина, Н.А. Поспелов, А.Е. Семина.....</i>	<i>91</i>
<b>Математические принципы настройки аппаратных функций измерительно-вычислительных систем</b>	
<i>Е.Н. Терентьев, Н.Е. Терентьев.....</i>	<i>92</i>
<b>Использование открытой акустической системы Verasonics для измерения скорости сдвиговых волн в полимерных фантомах CIRS</b>	
<i>Р.Ш. Халитов, С.Н. Гурбатов, И.Ю. Демин.....</i>	<i>97</i>
<b>Методы профилирования шлама в нефтяных хранилищах</b>	
<i>С.А. Цысарь, В.Д. Свет.....</i>	<i>101</i>
<b>Метод импедансной спектроскопии на электродах двухфазных систем</b>	
<i>М.А. Чоба, В.А. Сафонов, Ю.К. Алешин.....</i>	<i>105</i>
<b>Возможность восстановления параметров мелкого моря методами пассивной томографии по данным с донных гидрофонов</b>	
<i>В.А. Буров, С.Н. Сергеев, А.С. Шуруп, А.В. Щербина.....</i>	<i>106</i>

## Управление радиочастотным полем в магнитно-резонансной томографии на ядрах фтора $^{19}\text{F}$

Н.В. Анисимов<sup>1</sup>, М.В. Гуляев<sup>1</sup>, Д.В. Волков<sup>2</sup>, О.С. Павлова<sup>2</sup>, Ю.А. Пирогов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Факультет фундаментальной медицины МГУ имени М.В. Ломоносова

<sup>2</sup>Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова

[anisimovnv@mail.ru](mailto:anisimovnv@mail.ru)

Магнитно-резонансная томография (МРТ) широко применяется для медицинской диагностики благодаря высокой информативности и безопасности исследования [1]. Кроме того, МРТ применяется для исследований малых лабораторных животных, других биологических объектов, а также в ряде технологических приложений – дефектоскопия, МРТ-микроскопия. Недостаток специализированных томографов приводит к тому, что для исследовательских приложений стараются приспособить медицинский томограф. Однако в его базовой комплектации обычно не предусмотрена регистрация ядер, отличных от протонов, приемные катушки не всегда учитывают специфику объекта сканирования, основная передающая катушка (далее в тексте просто «основная») жестко фиксирована в полости магнита. Это создает проблему получения РЧ поля нужной интенсивности и локализации. Цель данной работы – показать некоторые приемы, позволяющие решать эти проблемы.

Эффективным методом преодоления указанных проблем является введение в конфигурацию томографа дополнительной приемно-передающей катушки (ДК), способной размещаться вблизи зоны интереса. Если размер этой зоны много меньше размеров основной катушки, то при ее использовании мощность передатчика расходуется нерационально, поскольку величина РЧ поля  $B_1 \sim LI/D^2$ , где  $D$  – диаметр основной катушки,  $L$  – ее индуктивность, а  $I$  – ток, протекающей через нее. Если в качестве передающей катушки задействовать ДК, диаметр которой меньше, чем у основной, то необходимое РЧ поле можно получить за счет меньшего тока, т.е. меньшей мощности передатчика. При этом данную катушку можно использовать и в качестве приемной, поскольку РЧ возбуждение спинов и регистрация их отклика разделены во времени. Обычно в МРТ применяются квадратурные приемные катушки – фактически, две отдельные приемные катушки, оси которых взаимно перпендикулярны. При использовании такой катушки вместе с ДК необходимо предусмотреть возможность независимого размыкания каждой из катушек, чтобы избавиться от эффектов, связанных с взаимной индукцией.

Оптимизируя размеры ДК, можно добиться, чтобы РЧ напряжения, поступающие к ней от передатчика, не превышали сотни вольт. Тогда отпадает необходимость в оборудовании (кабели, конденсаторы) с большим пробивным напряжением, что позволяет изготовить ДК компактной, а подводящие кабели гибкими и легкими.

Учитывая вышесказанное, можно предложить простое практическое решение по реализации ДК – адаптировать один из каналов уже готовой приемной квадратурной катушки для работы его в качестве приемно-передающего. При этом упрощаются схемотехнические решения – отпадает потребность в размыкателях катушек, т.к. взаимная индукция взаимно перпендикулярных катушек мала. А поскольку в схеме размыкателя обычно устанавливают элементы типа рип-диодов, несколько снижающие добротность контура, то удалив их, можно повысить чувствительность катушки.

Мы применили подобный подход при проведении МРТ экспериментов с животными (крысами), которым внутривенно вводились фторуглеродные соединения [2]. Эксперименты проводились на 0,5 Тл медицинском томографе *Bruker Tomikon S50*, который ориентирован на регистрацию сигналов протонного ЯМР на частоте 21,08

МГц. Помимо того, что размеры его основной катушки не оптимальны для подобных исследований (внутренний диаметр 59 см), ее диапазон частотной перестройки оказался недостаточен, чтобы с помощью 2 кВт передатчика обеспечить приемлемую величину РЧ поля на частоте ЯМР фтора  $^{19}\text{F}$  19,83 МГц. Поэтому в качестве ДК, адаптированной для исследования малого объекта (крысы), был использован один из каналов квадратурной катушки, предназначенной для исследования коленного сустава человека с внутренним диаметром 18 см. Из схемы этой катушки удален размыкатель, а вместо варикапов установлены конденсаторы переменной емкости с металлическими пластинами. В результате были получены  $^{19}\text{F}$ -МР-томограммы при ослаблении РЧ напряжения от передатчика на 30 дБ, в то время как при использовании основной катушки при съемке  $^1\text{H}$ -МР-томограмм это ослабление составляло лишь 10 дБ.

ДК можно использовать не только как компактный аналог основной, но и как средство управления РЧ полем в локальной области. В последнем случае ДК вводится в конфигурацию томографа как пассивный контур. Эффект достигается за счет генерации ДК вторичного поля от тока, протекающего в ДК, причем этот ток возникает из-за ЭДС индукции, наведенной в ДК от внешнего РЧ поля. Это может быть востребовано при сканировании большой зоны, когда нужно усилить или подавить РЧ поле в ограниченной области. Подавление РЧ полезно для зоны локализации металлсодержащего импланта, поскольку РЧ поле может вызвать его нагрев. Эффект подавления РЧ можно получить, если концы ДК закортить, а ее ось разместить параллельно направлению РЧ поля, которое генерирует основная катушка. Однако при планировании подобных экспериментов надо учитывать, что поскольку основная катушка жестко зафиксирована, то и направление РЧ поля изменить нельзя. Это надо принимать во внимание при позиционировании исследуемого объекта.

Если при вышеописанной конфигурации не замыкать ДК, а оставить в составе резонансного контура, то можно получить усиление РЧ в  $Q$  раз, где  $Q$  - добротность контура. Поскольку  $Q$  может достигать  $\sim 10^2$ , то эффект усиления РЧ поля может быть весьма существенным. Это может быть востребовано, если по каким-то причинам РЧ поле, создаваемое основной катушкой, слишком мало. Такая ситуация возможна не только из-за аппаратных проблем, но и при переходе на работу с другими ядрами, когда основную катушку невозможно настроить в резонанс. Тогда можно надеяться, что усиление слабого РЧ поля поможет улучшить условия возбуждения сигнала ЯМР.

Таким образом, подбирая в магнитно-резонансном томографе конфигурацию, режим работы и внутренние переключения основной и дополнительной катушек, можно обеспечить либо однородное РЧ поле в большой или малой зоне, либо в основном однородное, но с локальным ослаблением или усилением этого поля. Поэтому полезно предусмотреть в составе МР томографа дополнительную катушку, способную не только размещаться в требуемой зоне интереса, но и перестраиваться по частоте. Это расширяет эксплуатационные возможности МР томографа – создает условия для исследований объектов малых размеров и мультиядерных приложений.

Работа выполнена при поддержке гранта Минобрнауки РФ № 14.604.21.0060 (RFMEFI60414X0060).

## ЛИТЕРАТУРА

1. E.M. Haake et al. «Magnetic Resonance Imaging: Physical Principles and Sequence Design» John Wiley & Sons, 1999.
2. Н.В. Анисимов и др. // Известия ВУЗов (Физика). 2015. (в печати).

## Новый взгляд на рН воды

В.Г. Артемов<sup>1</sup>, А.А. Волков<sup>2</sup>, Н.Н. Сысоев<sup>2</sup>, А.А. Волков<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт общей физики имени А.М. Прохорова РАН

<sup>2</sup>Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова

[vartemov@bk.ru](mailto:vartemov@bk.ru)

Фундаментальным свойством жидкой воды является протонная проводимость  $\sigma_0 = 5.5 \times 10^{-6} \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^{-1}$ . По принятому представлению она отражает наличие в воде ионов  $\text{H}_3\text{O}^+$  и  $\text{OH}^-$ , которые порождаются процессом автодиссоциации молекул  $\text{H}_2\text{O}$  [1-3]. Автодиссоциация компенсируется обратным процессом рекомбинации. Считается, что время жизни выделенной молекулы воды составляет  $\sim 10$  часов [2].

На явлении разборки-сборки молекул воды базируется важная для практики концепция показателя кислотности рН [4]. Для чистой воды при комнатной температуре рН=7, концентрация ионов  $\text{H}_3\text{O}^+$  и  $\text{OH}^-$  составляет  $10^{-7}$  моль/л ( $\sim 2 \times 10^{-7} \%$  от общей концентрации молекул  $\text{H}_2\text{O}$ ).

Количественно склонность воды к автоионизации передается константой  $K_w$ , десятичный логарифм которой для чистой воды равен  $2\text{pH}$ . Проблему большой практической и научной значимости составляет объяснение зависимости  $K_w$  от температуры, имеющей выраженный немонотонный характер (минимум в области 220-240 °С). Считается, что причина температурного изменения  $K_w$  кроется в процессах гидратации ионов  $\text{H}_3\text{O}^+$  и  $\text{OH}^-$ . Описание зависимости  $K_w(T)$  представляет собой сложную многочастичную задачу, предполагающей величину  $K_w$  очень далекой от наглядности [5, 6].

Экспериментально  $K_w$  определяют из кондуктометрических измерений на чистой воде и водных растворах электролитов [3]. Сначала из перекрестного сравнения параметров ионного разделения в растворах электролитов разного химического состава отдельной строкой выделяют проводящие свойства ионов  $\text{H}_3\text{O}^+$  и  $\text{OH}^-$ , а далее рассчитывают их концентрацию.

Принципиально, что в принятой концепции рН Ионы  $\text{H}_3\text{O}^+$  и  $\text{OH}^-$  считаются независимыми. Недавно мы показали, что это, скорее всего, не так [7]. Из рассмотрения диссоциативно-ассоциативных процессов в воде с учетом их временных характеристик следует, что фундаментальную динамику протонов в воде отражает не низкочастотное плато  $\sigma_0$  в спектре проводимости (ниже  $10^7$  Гц), как считается, а высокочастотное спектральное плато  $\sigma_\infty$  в области  $10^{11}$  Гц (дебаевская релаксация). Последняя порождается диффузным движением сильно взаимодействующих зарядов (ионов - протонированных молекул  $\text{H}_2\text{O}$ ). Выполненный расчет дает для концентрации ионов  $\text{H}_3\text{O}^+$  и  $\text{OH}^-$ , присутствующих в воде, величину, которая на 7 порядков превышает стандартную для рН = 7, и от температуры не зависит. В нашей модели стандартная константа  $K_w$  (или рН) изменяет свой смысл. Она характеризует не развал-сборку молекул  $\text{H}_2\text{O}$ , как принято считать, а термоактивацию ионов  $\text{H}_3\text{O}^+$  и  $\text{OH}^-$  из динамического потенциала их взаимодействия.

В докладе мы демонстрируем те радикальные изменения в концепции рН, которые следуют из замены базового параметра  $\sigma_0$  на  $\sigma_\infty$ . В терминах величин, измеряемых, на практике – удельных проводимостей  $\sigma$  и эквивалентных проводимостей  $\Lambda$  – смена парадигмы выглядит, как переход от нижней пары кривых на Рис. 1 к верхней паре. Графики построены на базе устоявшихся и многократно апробированных справочных данных [8-10]. Электродинамику жидкой воды в новом свете определяет не спонтанная автодиссоциация воды, а происходящий в её объеме быстрый непрерывный процесс протонного обмена между ионами, ( $\text{H}_3\text{O}^+$  и  $\text{OH}^-$ ), и

нейтральными молекулами  $\text{H}_2\text{O}$ . Выделенная молекула  $\text{H}_2\text{O}$  сохраняется при этом в течение не более 0.1 нс, что полностью исключает существование в воде популярных для расчетов долговременных ажурных структур.

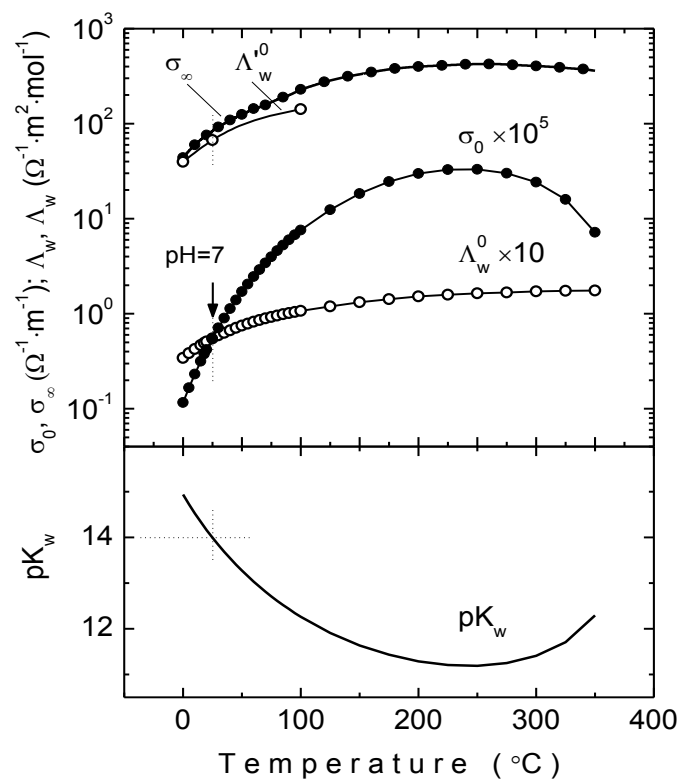


Рис. 1. Температурные зависимости электрических параметров жидкой воды: проводимостей – «на постоянном токе»  $\sigma_0$  [8] и СВЧ  $\sigma_\infty$  [9], предельных эквивалентных проводимостей –  $\Lambda_w^0$  и  $\Lambda_w^1$  [10], и показателя константы автоионизации  $\text{pK}_w$  [8]. Пунктиром отмечена температура 25 °C, при которой  $\text{pK}_w=14$  и  $\text{pH}=7$ .

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Д. Эйзенберг, В. Кауцман “Структура и свойства воды“ Л.: Гидрометеиздат, 1975.
2. P.L. Geissler et al. // Science. 2001. V. 291. P. 2121.
3. J.O’M. Bockris, A.K.N. Reddy “Modern Electrochemistry“ N.Y.: Kluwer, 1998.
4. Р. Бейтс “Определение pH. Теория и практика” 2-е изд. Л.: Химия, 1972.
5. A.V. Bandura, S.N. Lvov // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2006. Vol. 35. No. 1. P. 15.
6. T. Yagasaki et al. // J. Chemical Physics. 2005. V. 122, P. 144504.
7. A.A. Volkov, V.G. Artemov, A.V. Pronin // Eur. Phys. Letters. 2014. V. 106. 46004.
8. T.S. Light, S.L. Licht // Anal. Chem. 1987. V. 59. P. 2327.
9. В. Щербаков, Ю. Артемкина, В. Ермаков “Растворы электролитов. Электропроводность растворов и диэлектрические свойства полярных растворителей” Palmarium Acad. Publishing, Saarbrucken, 2012.
10. CRC Handbook of Chemistry, and Physics, 70th Edition, Weast, R. C., Ed. (CRC Press, Boca Raton, FL) 1989.

## Спектроскопия фрустрированного антиферромагнетика $\text{Ni}_3\text{B}_2\text{O}_6$

К.Н. Болдырев<sup>1</sup>, А.Д. Молчанова<sup>1</sup>, Р.В. Писарев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт спектроскопии Российской академии наук

<sup>2</sup>Физико-технический институт имени А.Ф.Иоффе Российской академии наук

[kn.boldyrev@gmail.com](mailto:kn.boldyrev@gmail.com)

Оксиборат никеля  $\text{Ni}_3\text{B}_2\text{O}_6$  (пространственная группа –  $Pnnt$  (#58), точечная группа симметрии  $mmm$  ( $D2h$ )) кристаллизуется в орторомбической системе и обладает структурой природного минерала котоита. Ионы  $\text{Ni}^{2+}$  локализуются внутри кислородных октаэдров  $[\text{NiO}_6]$  и занимают две различные позиции ( $2a$  и  $4f$ ). Обе подсистемы никеля упорядочиваются антиферромагнитно при температуре  $T_N = 46\text{K}$ . Вычисление обменных интегралов [1] в рамках простой косвенной модели взаимодействия показало конкуренцию между ферромагнитными и антиферромагнитными обменными взаимодействиями. Наличие этой конкуренции, а также фрустрированных магнитных взаимодействий приводит к появлению интересных магнитных особенностей и фазовых переходов, природа которых остаётся до конца не ясной.

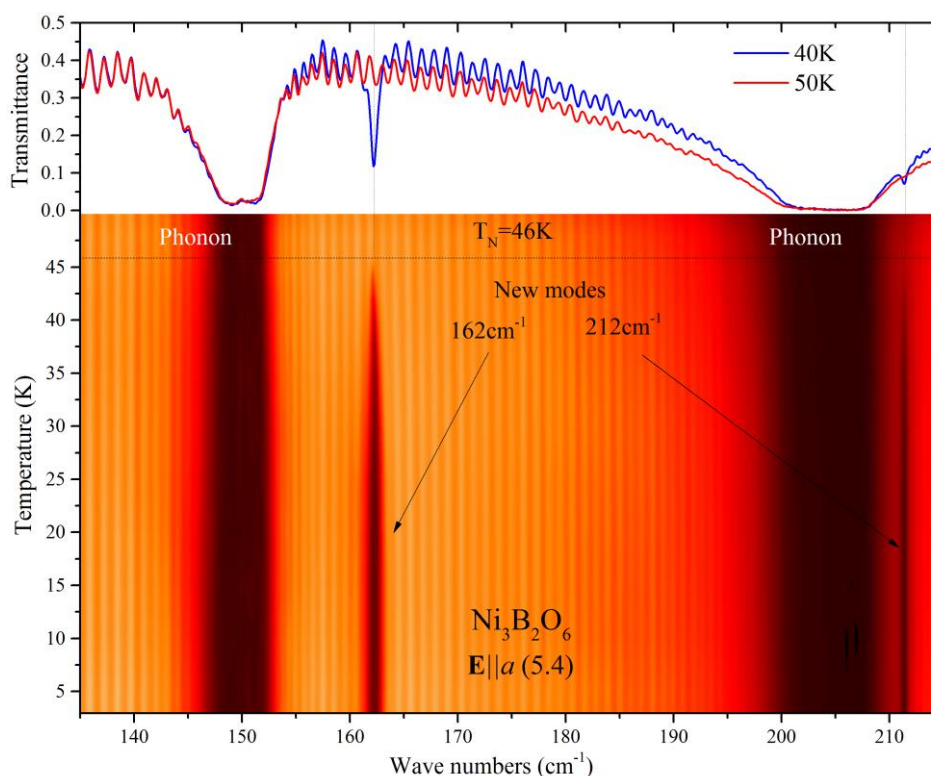


Рис.1. Карта интенсивностей спектров пропускания поляризованного света кристалла  $\text{Ni}_3\text{B}_2\text{O}_6$  (снизу) и два спектра при температурах 40 и 50K (сверху).

В данной работе представлено первое оптическое исследование монокристалла  $\text{Ni}_3\text{B}_2\text{O}_6$ . Были зарегистрированы спектры отражения от граней миллиметрового монокристалла при комнатной температуре со всеми возможными направлениями поляризации падающего света (вдоль трёх кристаллографических осей) в спектральном диапазоне  $30\text{--}2000\text{ cm}^{-1}$ . Кроме того, было проведено измерение спектров пропускания исследуемого соединения в частотном диапазоне  $13\text{--}300\text{ cm}^{-1}$  при разных



температурах (от 3 до 50К) и для двух направлений поляризации. На рисунке 1 показана карта интенсивностей спектров пропускания кристалла в далёкой инфракрасной области при различных температурах. Как можно видеть, при температуре антиферромагнитного упорядочения наблюдается появление новых, достаточно слабых, спутников вблизи интенсивных фононов. Такое поведение свидетельствует о структурном фазовом переходе. В работах [2, 3], посвященных нейтронному рассеянию в  $\text{Ni}_3\text{B}_2\text{O}_6$  и изоструктурном соединении  $\text{Co}_3\text{B}_2\text{O}_6$ , были обнаружены дополнительные пики ниже температуры антиферромагнитного упорядочения, появление которых было расценено авторами, как удвоение периода магнитной решётки вдоль двух кристаллографических направлений. Однако наблюдаемый нами фазовый переход - структурный и связан, по всей видимости, с удвоением элементарной кристаллической ячейки, вследствие чего происходит «складывание» зоны Бриллюэна (“folding”) и появление в спектре фононных линий, соответствующих краю зоны Бриллюэна.

Наблюдаемые нами линии достаточно узкие. Так, линия  $162\text{ см}^{-1}$  имеет ширину около  $1\text{ см}^{-1}$ , линия  $212\text{ см}^{-1} - 0.5\text{ см}^{-1}$ , что соответствует ранее наблюдавшимся линиям при удвоении элементарной ячейки вследствие спин-пайерлсовского перехода в других соединениях [4]. Однако для соединения  $\text{Ni}_3\text{B}_2\text{O}_6$  исключается возможность спин-пайерлсовского перехода из-за целого спина ионов  $\text{Ni}^{2+}$  ( $S=1$ ).

На рисунке 2 (слева) приведены поляризованные спектры пропускания кристалла никелевого бората в далёкой инфракрасной области при различных температурах. Как видно из рисунка, ниже температуры  $T_N = 46\text{K}$  наблюдается появление низкочастотных возбуждений. На рисунке 2 (справа) показано изменение частот этих возбуждений с температурой, согласующееся с поведением магнитного параметра порядка. Такое температурное изменение частот, а также сам частотный диапазон ( $15\text{--}30\text{ см}^{-1}$ ), позволяет нам сделать предварительный вывод, что обнаруженные возбуждения имеют магнитную природу.

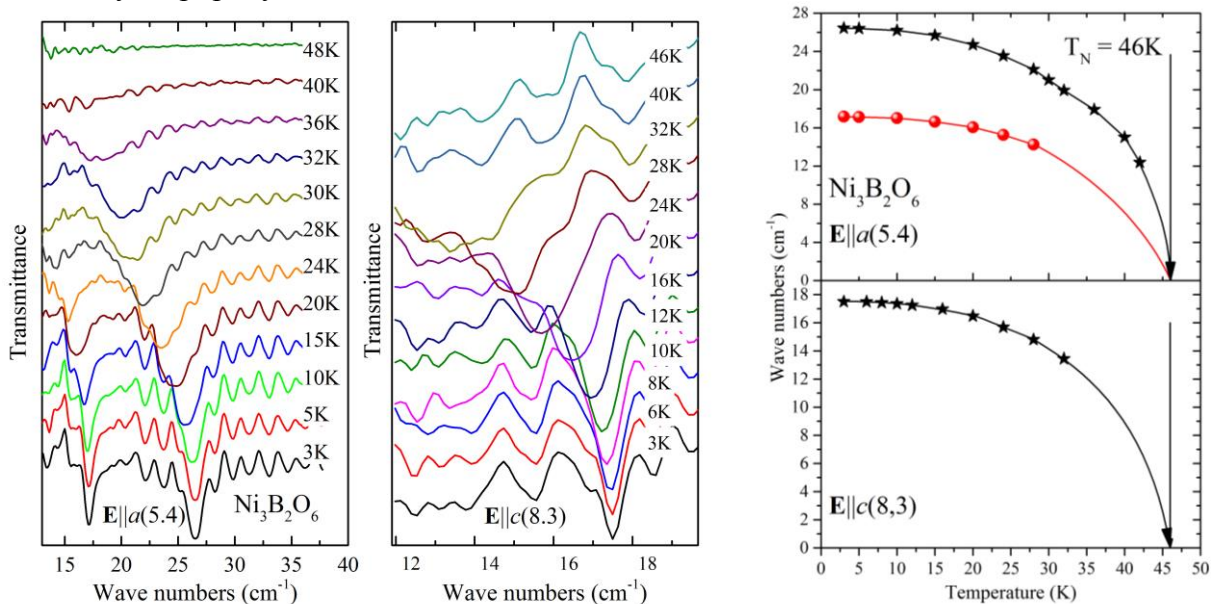


Рис.2. Поляризованные спектры пропускания  $\text{Ni}_3\text{B}_2\text{O}_6$  в далёкой инфракрасной области (слева) и температурные зависимости частот возбуждений (справа).

На рисунке 3 приведён спектр пропускания тонкого (150 мкм) монокристалла  $\text{Ni}_3\text{B}_2\text{O}_6$  в широком спектральном диапазоне при температуре 6К (сверху) и его сравнение со спектром, снятым при таких же параметрах, но при температуре 50К

(снизу). На низкотемпературном спектре мы наблюдаем узкие линии шириной порядка  $10 \text{ cm}^{-1}$ , которых нет на спектре, снятом при комнатной температуре. Появление этих линий связано с d-d переходами в ионе  $\text{Ni}^{2+}$ . Такие переходы запрещены в изолированных d-ионах, но в кристаллическом поле (кислородных октаэдров) d-уровни расщепляются, и d-d переходы становятся возможны.

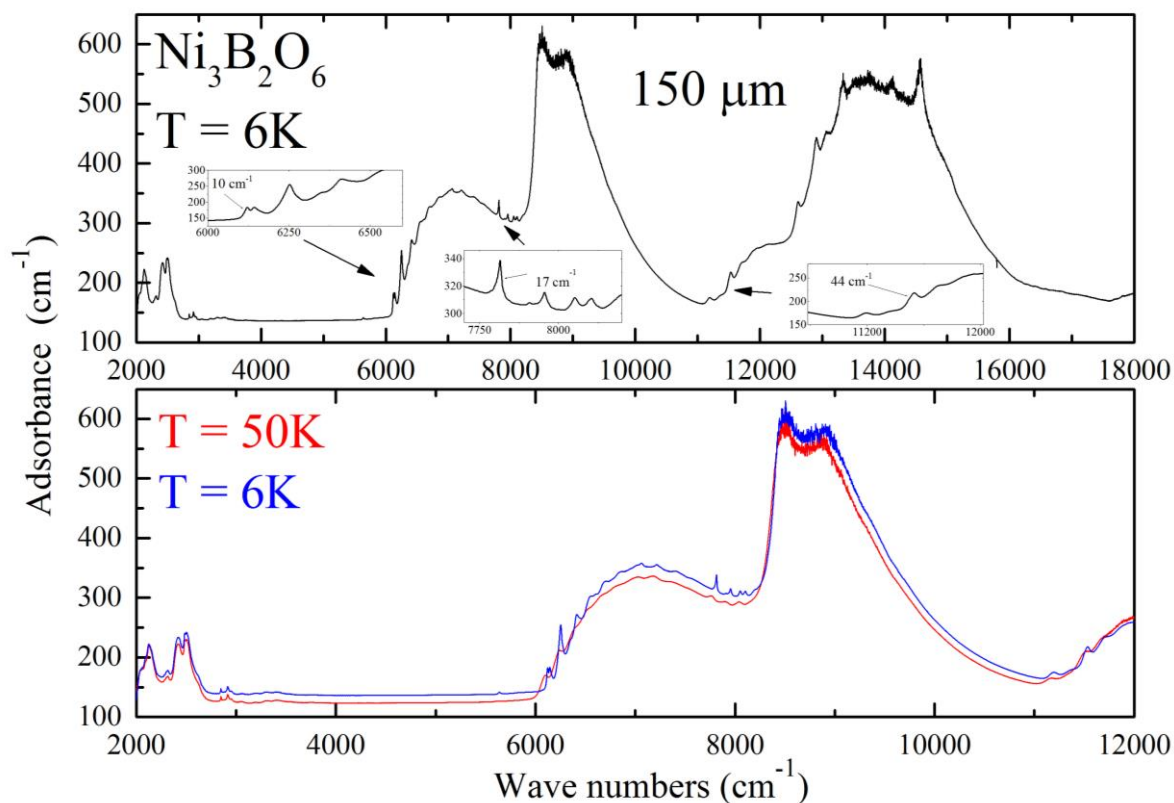


Рис. 3. Спектр поглощения тонкого монокристалла  $\text{Ni}_3\text{B}_2\text{O}_6$  при температуре  $T = 6\text{K}$  (сверху) и его сравнение со спектром поглощения при температуре  $T = 50\text{K}$  (снизу).

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №15-02-04222а и гранта Президента РФ для поддержки молодых ученых (МК-3521-2015.2).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. L.N. Bezmaternykh, S.N. Sofronova, N.V. Volkov, et al. // *Phys. Stat. Solidi B*. 2012. V. 249. P. 1628.
2. R. E. Newnham M. J. Redman, P. Santoro // *Z. Kristallogr.* 1965. V. 121. P. 418.
3. R. E. Newnham, R. P. Santoro, P. F. Seal, G. R. Sallings // *Phys. Status Solidi*. 1966. V. 16. P. K17.
4. М.Н. Попова, А.Б. Сушков, А.Н. Васильев, И. Исобэ, Ю. Уэда // *Письма в ЖЭТФ*. 1997, V. 65(9). P. 711.

## Неконтролируемая примесь $\text{Bi}^{3+}$ в $\text{RFe}_3(\text{BO}_3)_4$ : влияние на физические свойства

К.Н. Болдырев<sup>1</sup>, М.Н. Попова<sup>1</sup>, И.А. Гудим<sup>2</sup>, Темеров<sup>2</sup>, Л.Н. Безматерных<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт спектроскопии Российской академии наук

<sup>2</sup>Институт физики им. Л.В. Киренского Российской академии наук

[kn.boldyrev@gmail.com](mailto:kn.boldyrev@gmail.com)

Редкоземельные ферроборатыбораты с общей формулой  $\text{RFe}_3(\text{BO}_3)_4$  ( $\text{R} = \text{Y}, \text{La-Lu}$ ) имеют нецентросимметричную структуру типа хангита (пространственная группа симметрии  $\text{R}32$  или  $\text{P}3_121$  [1]), характерной особенностью которой является наличие спиральных цепочек –  $\text{Fe} - \text{O} - \text{Fe}$  – вдоль кристаллографической оси  $c$ . Проведенные ранее исследования показали, что в кристаллах редкоземельных ферроборатов  $\text{RFe}_3(\text{BO}_3)_4$  наблюдается антиферромагнитное упорядочение подсистемы железа при температурах около 40 К. Кроме того, в некоторых соединениях ферроборатов был обнаружен гигантский магнитоэлектрический эффект и установлено, что данные соединения относятся к классу мультиферроиков [2,3], что открывает возможности в их практическом применении в качестве элементов систем спинтроники, магнитной энергонезависимой и радиационноустойчивой памяти, магнитных переключателей, управляемых электрическим полем и т.п.

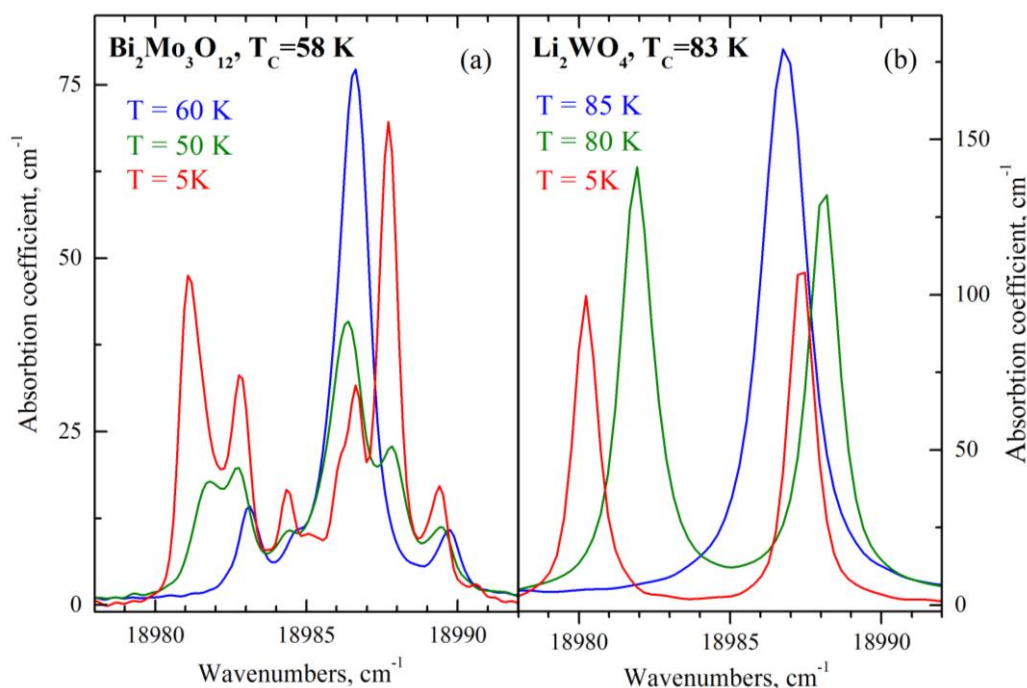


Рис.1. Спектр  $\text{Eu}^{3+}$  в области оптического перехода  ${}^7\text{F}_0 \rightarrow {}^5\text{D}_1$  до фазового перехода  $\text{R}32 - \text{P}3_121$  (синий), после фазового перехода  $\text{R}32 - \text{P}3_121$  (зеленый) и после магнитного фазового перехода (красный) для кристаллов  $\text{EuFe}_3(\text{BO}_3)_4$ , выращенных с помощью растворителя (а)  $\text{Bi}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ ; (б)  $\text{Li}_2\text{WO}_4$ .

Лишь недавно удалось получить крупные кристаллы редкоземельных ферроборатов. Монокристаллы  $\text{RFe}_3(\text{BO}_3)_4$  с различными редкоземельными элементами были синтезированы при помощи раствор-расплавного метода на затравке, с использованием в качестве растворителя  $\text{Bi}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$  [4]. Однако исследование физических свойств поликристаллов, выращенных твердофазным синтезом [5], и монокристаллов, выращенных раствор-расплавным методом [1,6] показало различие в температуре

структурных фазовых переходов R32 – R3<sub>1</sub>21. В частности, для ферробората европия в первом случае температура была 88 К [5], в то время как во втором - 58 К [6,7], для ферробората гадолиния разница составляла 180 К [1] против 156 К [5]. Ранее нами были исследованы алюмобораты, где было показано, что при раствор-расплавном методе на основе  $\text{Bi}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$  в кристалл входят неконтролируемые примеси молибдена и висмута [8, 9]. Здесь мы также предположили, что в кристаллы ферроборатов попадают компоненты растворителя. Для доказательства был выращен кристалл ферробората европия с использованием другого растворителя  $\text{LiWO}_4$ , не содержащего висмут и молибден. Данная работа посвящена сравнительному исследованию двух монокристаллов ферробората европия, выращенных с помощью различных растворителей.

Полученные данные показывают, что температура структурного фазового перехода в ферроборате европия, выращенного при использовании нового растворителя, возвращается к значению, полученному на чистых поликристаллических образцах, полученных твердофазным синтезом. Это подтверждает нашу гипотезу о вхождении компонентов растворителя в кристалл. Также в оптических спектрах кристалла, выращенного при помощи растворителя  $\text{Bi}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ , наблюдались дополнительные линии, связанные с появлением неэквивалентных позиций  $\text{Eu}^{3+}$ , в то время как в спектрах кристалла, выращенного с растворителем  $\text{LiWO}_4$ , спектры хорошо описывались в рамках теории кристаллического поля (см. рис. 1).

Кроме того, сравнивая ионные радиусы редкоземельного катиона и катиона трехвалентного висмута, нам удалось оценить концентрацию последнего во всем ряде выращенных редкоземельных ферроборатах. Так, концентрация  $\text{Bi}^{3+}$  в различных кристаллах, по нашим данным, варьируется от 3 до 7% по отношению к  $\text{R}^{3+}$ . Данное исследование говорит о важности учета неконтролируемых примесей при описании свойств кристаллов редкоземельных ферроборатов (см. рис. 2).

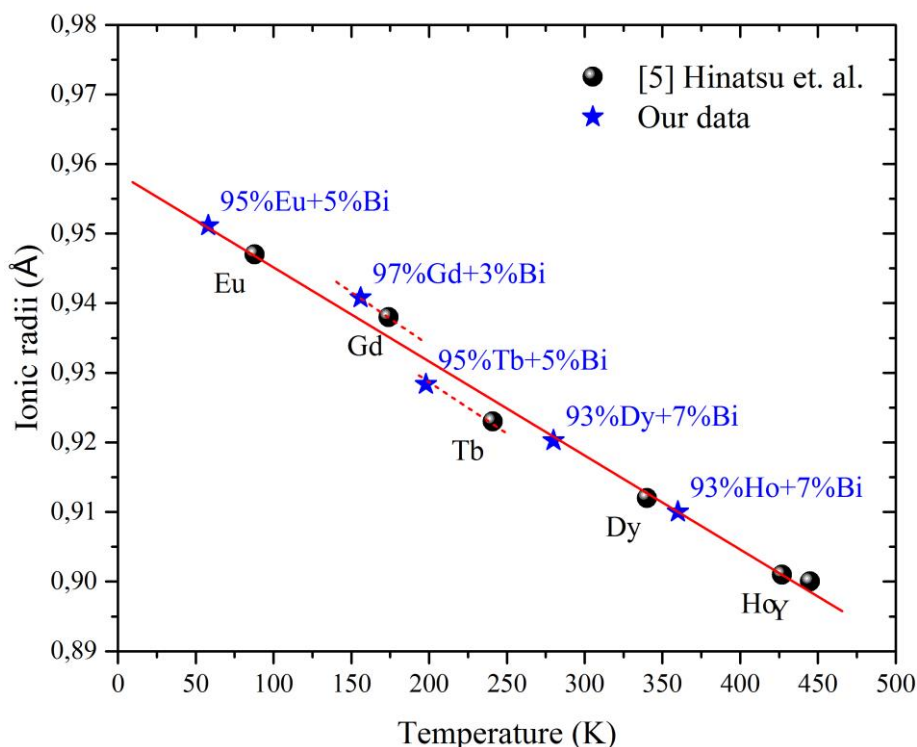


Рис. 2. Концентрация висмута в различных редкоземельных ферроборатах, полученных раствор-расплавным методом с использованием растворителя  $\text{Bi}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ .

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (Грант №14-12-01033).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. D. Fausti, A.A. Nugroho, P.H.M. van Loosdrecht, S.A. Klimin, M.N. Popova, L.N. Bezmaternykh // *Phys. Rev. B*. 2006. V. 74. P. 024403.
2. А.Н. Васильев, Е.А. Попова // *Физика Низких Температур*. 2006. V. 32. P. 968.
3. А.М. Кадомцева, Ю.Ф. Попов, Г.П. Воробьев и др. // *Физика низких температур*. 2010. V. 36. P. 640.
4. A. D. Balaev, L. N. Bezmaternykh, I. A. Gudim, et al. // *JMMM*. 2003. V. 258-259. P. 532.
5. Y. Hinatsu et.al. // *J. Solid State Chem*. 2003. V. 172. P. 438.
6. M. N. Popova // *J. Magn. Magn. Mater*. 2009. V. 321. P. 716.
7. K.N. Boldyrev, T.N. Stanislavchuk, S.A. Klimin, M.N. Popova, L.N. Bezmaternykh // *Physics Letters A*. 2012.V. 376. P. 2562.
8. К.Н. Болдырев, М.Н. Попова, Л.Н. Безматерных, М. Bettinelli // *Квантовая электроника*. 2011. V. 41. N. 2. P. 120.
9. K.N. Boldyrev, M.N. Popova, M. Bettinelli, V.L. Temerov, I.A. Gudim, L.N. Bezmaternykh, P. Loiseau, G. Aka, N.I. Leonyuk // *Optical Materials*. 2012. V. 34. P. 1885.

## Нелинейные волны и структурные переходы в ДНК

А.Н. Бугай

Объединенный институт ядерных исследований

[bugay\\_aleksandr@mail.ru](mailto:bugay_aleksandr@mail.ru)

В последние годы наметилась устойчивая тенденция применения к биологическим системам хорошо отработанных в физике теоретических и экспериментальных методов исследования. Одной из наиболее важных биомолекул, привлекающих внимание специалистов по нелинейной науке, является ДНК. В настоящем докладе рассматривается историческое развитие, достижения и современные проблемы теории нелинейной динамики структурных переходов в ДНК, связанных с различными типами ее активности.

Пионерские работы А.С. Давыдова по солитонам в альфа-спиралях белков [1] вместе с развитием теории солитонов и молекулярной биологии привели в 1980-х годах к рождению нелинейной физики ДНК. Здесь основное внимание стало уделяться не транспорту заряда, а конформационным возбуждениям, т.е. изменению внутренней структуры молекулы.

Первые работы по нелинейным возбуждениям в ДНК [2] касались описания локального расплетания двойной спирали в ходе процесса транскрипции (считывания генетической информации, закодированной в последовательности оснований). Как правило, в задачах такого типа состояние ДНК описывается нелинейным гамильтонианом вида [2]:

$$H = \frac{1}{2} \sum_n [I\dot{\varphi}_n^2 + B(1 - \cos(\varphi_n)) + S(1 - \cos(\varphi_{n+1} - \varphi_n))], \quad (1)$$

где точкой обозначена производная по времени,  $\varphi_n$  характеризует относительное угловое смещение в  $n$ -й паре оснований,  $I$  – момент инерции, коэффициент  $B$  характеризует энергию водородных связей в паре оснований, а  $S$  учитывает взаимодействие между соседними основаниями вдоль цепи ДНК (стэкинг-взаимодействие).

Уравнения движения, соответствующие (1), при переходе к континуальному пределу дают известное нелинейное волновое уравнение синус-Гордона для угла  $\varphi$ . Решения этого уравнения типа кинков, представляющих собой раскрученные участки спирали ДНК. В последнее время значительное внимание в исследованиях таких моделей уделяется влиянию неоднородностей в последовательностях генетического кода, а также влиянию диссипации и внешних факторов [3].

Другой важной областью приложения нелинейных моделей, тесно связанной с экспериментом, является моделирование флуктуаций в ДНК и ее тепловой денатурации. Здесь основной степенью предполагается растяжение водородных связей между парами оснований ДНК, что приводит к нелинейным моделям типа Пейярда и Бишопа [4]:

$$H = \frac{1}{2} \sum_n [m\dot{y}_n^2 + 2D(\exp(-\alpha y_n) - 1)^2 + k(y_{n+1} - y_n)^2]. \quad (2)$$

Здесь  $y_n$  характеризует относительное поперечное смещение (растяжение связей) между основаниями первой и второй цепей с массами  $m$ ,  $D$  характеризует энергию водородных связей в паре оснований, а  $k$  учитывает взаимодействие между соседними основаниями вдоль цепи.

Рассмотрение локальных возмущений структуры ДНК в виде малоамплитудных осцилляций приводит к дискретному или континуальному нелинейному уравнению Шредингера, имеющему решения солитонного типа. Статистический анализ с использованием гамильтониана типа (2) дает корректное описание тепловой денатурации ДНК. В последние годы появилось много модификаций данной модели с целью уточнения описания взаимодействия ДНК с окружением, так и предсказания потенциальных мест функциональной активности в ходе регуляции транскрипции [5].

Наряду с представленными простыми моделями с одной независимой степенью свободы предложены и более сложные многокомпонентные модели. Хорошо известна модель Барби [6], объединяющая свойства представленных выше гамильтонианов:

$$H = \sum_n \left[ \frac{m}{2} (\dot{R}_n^2 + R_n^2 \dot{\theta}_n^2) + k \sqrt{h^2 + (R_{n+1} - R_n)^2 - 4R_{n+1}R_n \sin^2[(\theta_{n+1} - \theta_n)/2]} - \ell_0 \right]^2 + D_n (\exp[-\alpha(R_n - R_0)] - 1)^2, \quad (3)$$

где  $\ell_0^2 = h^2 + 4R_0^2 \sin^2(\theta_0/2)$ ,  $R$  – расстояние между комплементарными основаниями,  $\theta$  – угол кручения цепей ДНК,  $m$  – приведенная масса пары оснований,  $h$  – расстояние между соседними нуклеотидами вдоль оси двойной спирали, величины  $D$  и  $k$  характеризуют энергии водородных связей и стэкинг-взаимодействия.

В отличие от предыдущих моделей, спектр решений нелинейных волновых уравнений, соответствующих (3), гораздо богаче. В малоамплитудном пределе возникают солитоны нелинейного уравнения Шредингера (НУШ) [6] и солитоны уравнения Кортевега-де-Вриза (КдВ) [7], а при больших структурных деформациях – открытые состояния двойной спирали типа кинков [8].

Для описания конформационных переходов между различными типами вторичной структуры ДНК (В-формой и А-формой) Волковым [9] была предложена модель с двумя независимыми степенями свободы:

$$H = \frac{1}{2} \sum_n [m\dot{r}_n^2 + I\dot{\theta}_n^2 + \sigma(\theta_{n+1} - \theta_n)^2 + q(r_{n+1} - r_n)^2 + g(r_n^2 - r_0^2)(\theta_{n+1} - \theta_{n-1}) + cr_n - br_n^2 + ar_n^4], \quad (4)$$

где  $\theta_n$  обозначает относительное кручение пары оснований как целого, а  $r_n$  – смещение внутри сегмента двойной спирали, обуславливающего конформационный переход. Величины  $\sigma$  и  $q$  характеризуют стэкинг-взаимодействие,  $g$  описывает взаимодействие рассматриваемых степеней свободы при отклонении от В-формы ДНК, а последние три слагаемых задают двухямный потенциал, определяющий устойчивые состояния, между которыми и происходит конформационный переход. Для соответствующих (4) уравнений движения известны как солитонные решения типа кинков, так и решения колоколообразной формы.

Можно показать, что уравнения движения, соответствующие (3) или (4) приводят к еще одной интегрируемой системе нелинейных волновых уравнений, а именно – системе Ядзимы-Ойкавы вида:

$$i \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\beta}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} + \eta v u = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial t} = \frac{\chi}{2} \frac{\partial |u|^2}{\partial \xi}, \quad (5)$$

где  $u$  задает огибающую локализованного волнового пакета для радиальных смещений, а  $v$  выражается через угол кручения. Коэффициенты  $\beta$ ,  $\eta$  и  $\chi$  характеризуют дисперсию и нелинейность. Данные уравнения описывают взаимодействие длинно- и коротковолновых локализованных колебаний малой

амплитуды. В случае (3) учет слагаемых более высокого порядка малости приводит к выводу обобщенной системы Ядзими-Ойкавы более сложного вида, заключающей в себе как частные случаи помимо (5), также уравнения НУШ и КдВ для переменных  $u$  и  $v$ , соответственно. Применительно к рассматриваемой физической системе данный результат позволяет разрешить вопрос о протекании начальной стадии конформационного перехода и оптимальных условиях возбуждения необходимой для него «затравки».

В отличие от многих других физических систем, где возможно образование солитонов, в случае нелинейных волн конформации в ДНК существенно затухание, обусловленное внешним окружением, в первую очередь, молекулами воды. По различным оценкам характерные времена релаксации, определяющие затухание рассматриваемых колебаний, составляют единицы – десятки пикосекунд [10]. Частоты же колебаний лежат в терагерцовом диапазоне. Следует отметить, что характер возникающих сил трения, обычно оцениваемый в гидродинамическом приближении, вообще говоря, требует специального рассмотрения. В первую очередь, это связано с необходимостью учета молекулярной структуры воды вблизи поверхности полимера, где вода имеет стеклоподобное состояние. Воздействие затухания ограничивает время жизни малоамплитудных осцилляций, а также влияет на скорость распространения структурных переходов, описываемых топологическими решениям типа кинков. Теоретически влияние затухания на динамику указанных частных решений описывается с помощью теории возмущений, метода коллективной координаты и т.д. Применение численных методов с использованием стохастических уравнений ланжевеновского типа позволяет получить более корректную физическую картину влияния термостата, необходимую для описания внешних воздействий, речь о которых пойдет далее.

Еще несколько десятков лет назад физики задавались вопросом о резонансном воздействии электромагнитных полей на колебания в биосистемах. Появившиеся в последние годы доступные источники терагерцового излучения позволили исследовать данный вопрос более детально с точки зрения эксперимента, причем было выявлено изменение структуры и функционирования ДНК при облучении [11,12]. Теоретическое объяснение данных эффектов до сих пор встречает значительные трудности. Тем не менее, простые нелинейные модели ДНК позволяют выявить некоторые качественные особенности.

Возможны две характерные схемы воздействия на ДНК внешней силы терагерцовой частоты. Первая из них предполагает прямое резонансное возбуждение колебаний ДНК [13], а вторая параметрическое возбуждение [14]. Таким образом, в малоамплитудном континуальном пределе моделей (1)-(4) можно получить диссипативное нелинейное уравнение Шредингера вида

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\beta}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} + \mu |\psi|^2 \psi = -\gamma \psi + \varepsilon_1 \exp(i(\omega_{ext} - \omega)t) + \varepsilon_2 \psi^* \exp(i(\omega_{ext} - 2\omega)t), \quad (6)$$

где  $\psi$  задает огибающую локализованного волнового пакета деформации ДНК с частотой  $\omega$ , коэффициенты  $\beta$ ,  $\mu$  и  $\gamma$  характеризуют дисперсию, нелинейность и затухание. Предпоследнее и последнее слагаемые в (6) учитывают прямое и параметрическое резонансное возбуждение внешней силой на частоте  $\omega_{ext}$  с амплитудами  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$ , соответственно. Уравнение (6) допускает решения как в виде одиночных диссипативных солитонов, так и их комплексов. В отличие от консервативных солитонов, рассмотренных ранее, амплитуда и длительность



диссипативных солитонов не являются свободными параметрами, а определяются внешней силой и затуханием.

Данный аналитический результат позволяет описать начальную стадию воздействия, причем принципиальным оказывается предварительное наличие некоторой «затравки», которая затем стабилизируется. Предполагается, что «затравка» образуется из тепловых флуктуаций.

Поскольку искомый эффект сильно зависит от тепловых флуктуаций и влияния ближайшего окружения молекулы в общем случае необходимо использовать численное моделирование полной системы уравнений движения. К настоящему времени, такие расчеты проделаны лишь для простейших гамильтонианов (1), (2) лишь при учете прямого резонансного возбуждения [11,13]. В настоящем докладе впервые приводятся результаты численных расчетов для более сложных систем (3) и (4), в том числе с учетом параметрического механизма возбуждения. При этом предсказывается образование долгоживущих структурных деформаций, сохраняющих форму даже после прекращения внешнего воздействия. Следует иметь в виду, что никаких повреждений ДНК не происходит, а возникающий эффект локального нарушения ее структуры может сказаться лишь в протекании некоторых биохимических процессов, что и наблюдалось в [11,12].

В заключение отметим, что описание структурных переходов в ДНК сводится к анализу известных модельных нелинейных волновых уравнений. При этом перспективным является рассмотрение систем с несколькими степенями свободы, имеющими богатый набор решений и позволяющих выявлять неизвестные ранее закономерности функционирования ДНК. Исследование механизмов внешнего воздействия на ДНК и взаимодействия ее с окружением приводит к анализу динамики диссипативных структур, что открывает новое поле для работы специалистов в различных областях нелинейной науки.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 13-02-00199а).

## ЛИТЕРАТУРА

1. A.S. Davydov // *Physica Scripta*. 1979. V. 20. P. 387.
2. S.W. Englander et al. // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 1980. V. 77. No 12. P. 7222.
3. A.A. Grinevich, A.A. Ryasik, L.V. Yakushevich // *Chaos, Solitons & Fractals*. 2015. V. 75. P. 62.
4. M. Peyrard, A.R. Bishop // *Phys. Rev. Lett.* 1989. V. 62. P. 2755.
5. B.S. Alexandrov et al. // *Nucleic Acids Research*. 2010. V. 38. No. 6. P. 1790.
6. M. Barbi, S. Cocco, M. Peyrard // *Phys. Lett. A*. 1999. V. 253. P.358.
7. A.N. Bugay, G.F. Aru // *Nonlin. Phenom. in Comp. Syst.*. 2014. V.17. No.1. P.1.
8. A. Campa // *Phys. Rev. E*. 2001. V. 63. P. 021901.
9. S.N. Volkov // *J. Theor. Biol.* 1990. V.143. P. 485.
10. M.D. Frank-Kamenetskii, S. Prakash // *Physics of Life Reviews*. 2014. V.11 P.153.
11. J. Bock et al. // *PloS One*. 2010. V.5. P. e15806.
12. V.L. Titova et al. // *Sci. Rep.* 2013. V.3. P.2363.
13. B.S. Alexandrov et al. // *Phys. Lett. A*. 2010. V. 374. No.10. P.1214.
14. А.Н. Бугай // *Изв. РАН. Сер. физ.* 2011. Т. 75. №12. С. 1681.

## Особенности эхо-спектроскопии тонких поликристаллических полупроводниковых пленок

Н.С. Вашурин, И.И. Попов

ФГБОУ ВПО «Поволжский государственный технологический университет»

[popov@volgatech.net](mailto:popov@volgatech.net)

В работе сообщается об экспериментальных исследованиях методом оптической спектроскопии на основе фотонного эха, формировавшегося при двухфотонном возбуждении, экситонных переходов в тонких поликристаллических пленках. Изучаемые в данной работе спектральные линии полупроводниковых тонких пленок представляют большой практический интерес с позиции изучения высоких концентраций собственных дефектов, возникающих при определенных методах роста этих пленок. Эти пленки формировались путем конденсации осаждаемого материала на подложку в режиме вакуумно-магнетронного распыления. При данном виде осаждения [1] образуются рентгеноаморфные и поликристаллические системы. На поверхности формируемых кристаллических волокон, на границе с рентгеноаморфной фазой, возникают дефекты кристаллической структуры и дефекты, вносимые примесями. Обычно в тонких полупроводниковых пленках широкий пик излучения в ультрафиолетовой области 3,35 эВ обязан экситонам локализованным на дефектах, предпочтительно реализуемых на примесях Li и Na [2]. Таким образом, наноразмерные дефекты и локализованные на них экситоны поликристаллических структур тонких полупроводниковых пленок интересны с позиции возможности возбуждения в них оптических переходных процессов и формирования при комнатной температуре сигналов фемтосекундного фотонного эха. В этом случае систему имеющихся поверхностных дефектов можно формализовать как ансамбль квантооразмерных неоднородных по размеру объектов. Метод же фемтосекундного фотонного эха позволяет вести спектроскопические исследования этих квантооразмерных объектов.

В качестве резонансной среды использовались пленки оксида цинка толщиной 100, 600 и 800 нм, в которых резонансно возбуждался квантовый переход между уровнем основного состояния, лежащем в валентной зоне, и верхним экситонным уровнем на длине волны. Спектральная полоса возбуждающего лазерного излучения находилась в диапазоне от 790-840 нм. В этом случае прямое резонансное возбуждение электронного перехода оксида цинка в эксперименте было невозможно, так как ширина запрещенной зоны оксида цинка составляла 3,37 эВ [3]. Поэтому в наших экспериментах использовался двухфотонный режим возбуждения этого перехода. Задействованные квантовые переходы хорошо изучены путем наблюдения люминесценции оксида цинка на дискретных спектральных линиях, соответствующим длинам волн от 380 до 400 нм. При этом использовалось двухфотонное поглощение лазерного излучения с дискретными значениями длин волн в диапазоне 710-800 нм [4]. В нашей работе сигнал фотонного эха регистрировался на длинах волн от 800 до 820 нм. Регистрация эхо-сигнала на длинах волн, значительно превышающих длину волны излучения резонансного квантового перехода, объясняется в рамках процесса каскадной релаксации горячих экситонов, включающего в себя следующие шаги [5]: первый – двухфотонное поглощение падающих фотонов с возбуждением экситона; второй – релаксация этого экситона в более низкие энергетические состояния с последующей эмиссией оптических LO фононов [6] через каскадный процесс; третий – излучательная рекомбинация экситонов через центры свечения, представленные в

данном случае дефектами слоя оксида цинка (вакансиями цинка, и междуузельным атомом кислорода), расположенными на уровне  $V_{ZnO}^O = 1,47$  эВ и  $O_{i,o}^{-1} = 1,57$  эВ.

Условия пространственного синхронизма для наблюдаемых сигналов стимулированного фотонного эха совпадают с этими условиями для газовых сред [7]. Потому для вычисления спектроскопических констант исследуемых квантовых переходов нами использовались математические соотношения, применявшиеся в оптической эхо-спектроскопии газовых сред [7]. Приводятся результаты обнаружения сигналов первичного и стимулированного фотонного эха и исследование релаксационных зависимостей интенсивности эха-сигналов на пленках с толщиной как меньшей длины волны возбуждающего излучения, так соизмеримой с ней.

Из значений времени релаксации  $T_1$ , полученных для пленок ZnO толщиной 100 нм, 800 нм и 2400 нм, путем анализа зависимостей спада интенсивности стимулированного фотонного эха при возрастании временного интервала  $\tau_{23}$ , приведенных на рисунке 1, установлено, что по мере уменьшения толщины пленки значение времени релаксации  $T_1$  возрастает. Оно составило: 0,96 пс для толщины пленки, равной 2400 нм; 2,96 пс для толщины пленки, равной 800 нм; 4,312 пс для толщины пленки, равной 100 нм. Это объясняется значительным уменьшением числа столкновений возбужденных частиц экситонного газа, участвующих в формировании эхо-сигнала, в направлении, ортогональном поверхности пленки, по сравнению с направлением, коллинеарным поверхности пленки, поскольку толщина пленки много меньше сечения возбуждаемой площадки пленки.

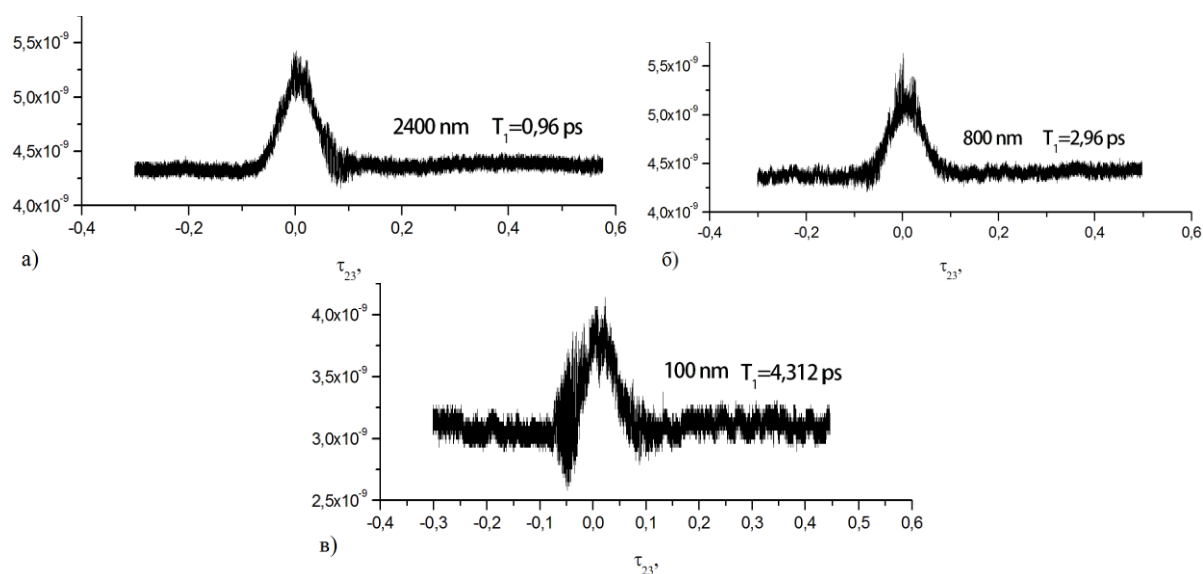


Рис. 1. Кривые спада интенсивности стимулированного фотонного эха при увеличении временного интервала  $\tau_{23}$  между возбуждающими импульсами при постоянном значении временного интервала  $\tau_{12}$  для пленок оксида цинка толщиной 2400 нм (а), 800 нм (б) и 100 нм (в)

## ЛИТЕРАТУРА

1. А.Ф. Белянин, М.И. Самойлович «Наноматериалы» М.: Техномаш, 2008..
2. D.Li, Y. H. Leung, A. B. Djuricic et al. // Appl. Phys. Lett., 2004. N 85. P 160
3. E.V. Chelnokov, N. Bityurin, I. Ozerov, W. Marine. // Applied physics letters 2006, No 89, P. 171119
4. Hyeong Seop Shim, Noh Soo Han, Joo Hee Seo, Seung Min Park, and Jae Kyu Song // Bull. Korean Chem. Soc. 2010, Vol. 31, No. 9, P. 2675-2678

5. В.К. Meyer et al. // Phys. stat. sol. (b) 241. 2004. P. 231 – 260
6. R.M. Martin, C.M. Varma // Phys. Rev. Lett. 1971. V. 26. is. 20. P. 1241 – 1244.
7. И.В. Евсеев, Н.Н. Рубцова, В.В. Самарцев «Когерентные переходные процессы в оптике» М.: Физматлит, 2009.

## Механизм СВЧ-нагрева воды

А.А. Волков

Институт общей физики имени А.М. Прохорова РАН

[aavolkov@ran.gpil.ru](mailto:aavolkov@ran.gpil.ru)

Как это ни удивительно, широко известное и практически используемое свойство воды нагреваться в СВЧ плите внятного объяснения на атомно-молекулярном уровне до сих пор не имеет. Со времен Дебая известно, что на частотах в области  $10^{11}$  Гц вода сильнейшим образом поглощает электромагнитное излучение, и, казалось бы, в силу доступности, предоставляет полную возможность разобраться в вопросе. Однако, уже более ста лет тайна СВЧ поглощения сохраняется. Общие впечатление исследователей от этого явления можно найти во множестве учебников, книг и обзоров. Подробные описания сопровождают бесчисленные инструкции и руководства по использованию промышленных нагревательных и сушильных приборов.

Квинтэссенцию современных представлений о механизме СВЧ нагрева воды дает Википедия [1]: «Нагрев в печи (микроволновой) основан на принципе так называемого «дипольного сдвига». Молекулярный дипольный сдвиг под действием электрического поля происходит в материалах, содержащих *полярные молекулы*. ... Сдвигаясь, молекулы «раскачиваются», сталкиваются, ударяются друг о друга ... Таким образом, дипольный сдвиг — это механизм преобразования энергии электромагнитного излучения в тепловую энергию материала».

В английском варианте: «Many molecules (such as those of water) are *electric dipoles*. ... Rotating molecules hit other molecules and put them into motion ... This energy, when dispersed as molecular vibration in solids and liquids (i.e. as both potential energy and kinetic energy of atoms), is heat».

Ссылки включают оригинальные работы 2011-2013 годов.

Как видно, ключевым свойством жидкой воды, ответственным за СВЧ поглощение, считается *полярность* молекул  $H_2O$ , из которых, как считается, состоит вода. Предполагается, что жидкая вода представляет собой набор тех же жестких молекул  $H_2O$ , которые спектральным способом идентифицируются в газовой фазе. Объединение молекул  $H_2O$  при конденсации объясняется существованием специфической химической связи, называемой водородной. Ею объясняют подавляющее число макроскопических свойств жидкой воды, которые по отдельности, а еще более в совокупности, ведут себя нетривиально. Последовательное объяснение СВЧ нагрева в таком ключе крайне затруднено, поскольку требует обеспечения, с одной стороны, закрепления молекул  $H_2O$  в жесткой системе направленных водородных связей, а с другой стороны – простора для их ориентационного движения. При замерзании воды СВЧ поглощение труднообъяснимым образом падает.

В докладе обсуждается недавно найденный новый подход к решению проблемы, предполагающий отказ от представления о долгоживущей неделимой молекуле  $H_2O$  [2]. Роль связующего фактора в новой модели от водородных связей передается ионам  $H_3O^+$  и  $OH^-$ , диффузное движение которых объясняет СВЧ нагрев естественным образом.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Микроволновая печь. <https://ru.wikipedia.org>.
2. A.A. Volkov, V.G. Artemov, A.V. Pronin // Eur. Phys. Letters. 2014. V. 106. 46004.

## Акустическое поле в неоднородных средах в виде костей черепа

Л.И. Гильфанова<sup>1</sup>, С.А. Цысарь<sup>1</sup>, П.В. Юлдашев<sup>1</sup>, В.Д. Свет<sup>2</sup>

<sup>1</sup> МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет

<sup>2</sup> Акустический институт имени академика Н.Н. Андреева

[allarepossible@gmail.ru](mailto:allarepossible@gmail.ru)

Сегодня ультразвук активно используется во многих областях науки, техники и медицины. Широкий спектр применений ультразвука связан с его способностью проникать внутрь исследуемых объектов. На этом основан целый ряд методов ультразвуковой диагностики.

Целью работы является разработка метода для расчёта структуры волновых полей в условиях неоднородной среды. Практическая ценность метода обусловлена необходимостью расчёта полей в задаче визуализации структур головного мозга сквозь кости черепа, являющиеся рассматриваемыми неоднородностями [1]. Для возможности проведения численного анализа и модельного эксперимента необходимо иметь фантомы костей с известными акустическими параметрами: скоростью звука, скоростью сдвиговых волн, коэффициентом затухания и его частотной зависимостью. Однако для воспроизведения таких эффектов можно обойтись и без сложного фантома и, более того, можно сделать его однородным с некоторыми усреднёнными параметрами плотности и скорости, которые можно легко варьировать. При этом рассеяние звука на внутренних неоднородностях кости можно симитировать дополнительными неровностями нижней границей кости с заданным пространственным масштабом, который также можно изменять, применяя соответствующую механическую обработку этой поверхности. Многочисленные исследования акустических параметров черепной костной ткани показывают, что она характеризуется очень широким диапазоном плотностей, скоростей продольных волн и коэффициентов поглощения [2].

В работе для создания фантомов кости черепа использовались модифицированная эпоксидная смола марки ЭД-20 из состава клея ЭДП (производство г. Дзержинск), отвердитель и порошок оксида алюминия. Плотность смолы составляет  $1.2 \text{ г/см}^3$ , плотность оксида алюминия  $4 \text{ г/см}^3$ . Для отверждения композиции применялся высококачественный отвердитель 961(ОП), который подходит для изготовления толстых слоев (вплоть до 10 см) без типовых дефектов, присущих классическим отвердителям типа ПЭПА. Плотность отвердителя  $1 \text{ г/см}^3$ . При изготовлении образцов сначала смешивались отвердитель и смола в постоянной пропорции 3:5 по массе, а затем добавлялся оксид алюминия для изменения коэффициента поглощения.

Для определения акустических параметров фантомов кости была создана экспериментальная установка, состоящая из излучателя и приемника, расположенных в резервуаре с дегазированной водой (рис. 1). Исследуемый образец помещался между преобразователями. В качестве излучающего и приемного преобразователей использовались плоские пьезокерамические датчики Panametrics NDT 5052 UA, диаметром 3.8 см, имеющие центральную частоту 1.0 МГц, и ширину рабочего диапазона частот 62% по уровню -6 дБ. Преобразователи были размещены соосно на расстоянии 9 см друг от друга. Зондирующий сигнал задавался в виде короткого импульса различной формы длительностью 1-2 мкс. Измерения проводились в воде при температуре 21 °С.

Характерный вид зондирующих импульсов и соответствующих спектров на приёмном преобразователе показан на рис. 2. Сплошная линия соответствует прохождению сигнала в воде без образца, штриховая – в воде при наличии образца.

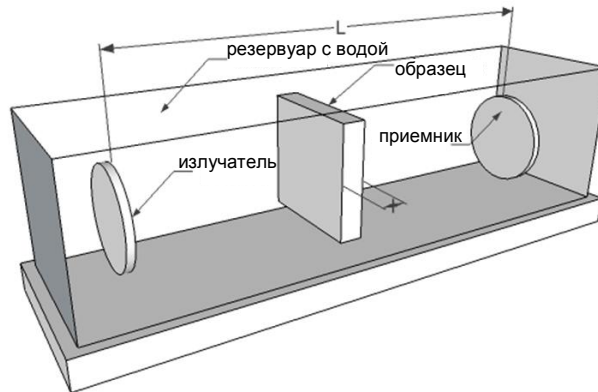


Рис. 1. Расположение излучателя, приемника и образца фантома кости.

Метод определения скорости звука в образце основан на измерении разности времен прихода зондирующего импульса в воде без образца  $t_0$  и в воде при наличии плоскопараллельного образца  $t_1$ . Скорость звука в этом случае определяется из соотношения [3]:

$$c_1 = \frac{c_0 l}{c_0(t_1 - t_0) + l}, \quad (1)$$

где  $l$  – толщина исследуемого образца,  $c_0$  - скорость звука в воде (1485 м/с при 21 °С).

Коэффициент поглощения определялся путем сравнения спектров измеренных сигналов (рис. 2б). Расчетная формула представлена ниже:

$$\alpha(\omega) = -\frac{1}{l} \ln \left| \frac{V_1(\omega)}{V_0(\omega)} \frac{1}{T_{01}T_{10}} \right| \quad (2)$$

здесь  $\omega$  - круговая частота,  $V_1(\omega)$  - амплитуда спектра сигнала при наличии образца,  $V_0(\omega)$  - амплитуда спектра сигнала в воде,  $T_{10} = 2Z_0/(Z_0 + Z_1)$ ,  $T_{01} = 2Z_1/(Z_0 + Z_1)$  - коэффициенты прохождения из материала образца в воду и наоборот,  $Z_0 = c_0\rho_0$ ,  $Z_1 = c_1\rho_1$  - акустические импедансы воды и материала образца соответственно.

Полученная частотная зависимость коэффициента поглощения на основе приведенных сигналов показана на рис. 2в. Отметим, что в частотных областях, где спектры сигналов близки к нулю, коэффициент поглощения определяется с существенной ошибкой и при аппроксимации такие области не учитываются.

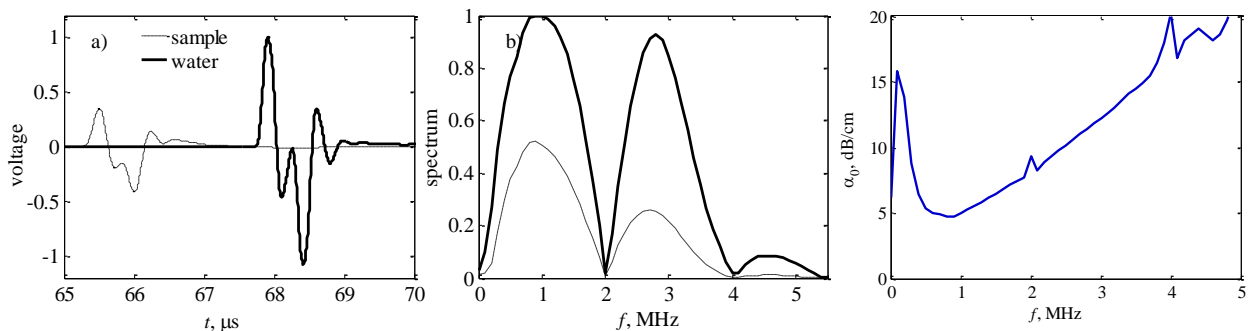


Рис. 2. Принимаемый сигнал в воде (сплошная линия) и при наличии фантома (штриховая линия) (а), соответствующие амплитуды спектров (б). Справа синей линией показана частотная зависимость коэффициента поглощения, рассчитанная на основе приведенных сигналов.

Плотность образцов определялась методом гидростатического взвешивания. Согласно данному методу, масса образца измерялась один раз в воздухе ( $m_a$ ) и один раз в воде ( $m_w$ ). В результате становятся известными объем образца и его плотность:

$$\rho_1 = \frac{\rho_w}{1 - m_w / m_a} \quad (3)$$

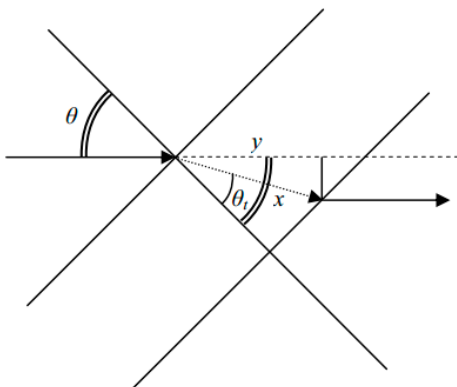
Здесь  $\rho_w$  - плотность воды, которая вычислялась согласно общепринятым формулам зависимости плотности воды от температуры. При температуре 20 °С плотность  $\rho_w$  составила 997.4 кг/м<sup>3</sup>.

Скорость поперечных волн  $c_t$  – важный акустический параметр, необходимый для расчета распространения акустических волн через кость с учетом частичного граничного преобразования в сдвиговые волны. Прямые измерения скорости поперечных волн представлялись невозможными ввиду отсутствия в распоряжении преобразователей сдвиговых волн. Чтобы обойти проблему прямого создания и регистрации сдвиговых волн, был использован метод, основанный на преобразовании продольных волн в сдвиговые на границе плоского фантома. Для этого образец помещался под углом к акустическому пучку (рис. 3а). Регистрация проводилась в воде после того, как происходило обратное преобразование поперечных волн в продольные.

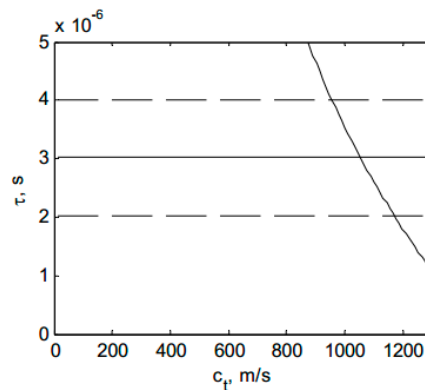
Для исследуемых образцов угол полного внутреннего отражения составил величину порядка 44°. При углах больше критического продольной волны в образце нет, и выходящая из образца волна есть обратно преобразованная сдвиговая волна. Чтобы найти скорость сдвиговых волн, необходимо знать общую разницу акустического времени пробега для импульса, прошедшего через пустое пространство  $\tau_0$  и прошедшего через образец с переходом к поперечной волне и вернувшегося обратно  $\tau_1$ . Обозначим эту величину как  $\Delta\tau$ . Из геометрических соображений нетрудно получить, что

$$\Delta\tau = \frac{l}{\cos\left(\arcsin\left(\frac{c_t \sin\theta}{c_0}\right)\right)} \left( \frac{1}{c_t} - \frac{\cos\left(\theta - \arcsin\left(\frac{c_t \sin\theta}{c_0}\right)\right)}{c_0} \right), \quad (4)$$

где  $x$  и  $y$  являются эффективными длинами пути в фантоме для импульса, прошедшего через пустое пространство и прошедшего через фантом с преобразованием в поперечную волну и обратно. Для данного уравнения невозможно получить явное выражение для  $c_t$ . Это уравнение может быть решено графически (рис. 3б).



а)



б)



Рис. 3. Иллюстрация для расчета акустического пути и разницы для свободного луча и преломленного луча сдвиговой волны (а). Графическое решение уравнения (4) (сплошная) и горизонтальные линии границы ошибок (пунктирные линии) (б).

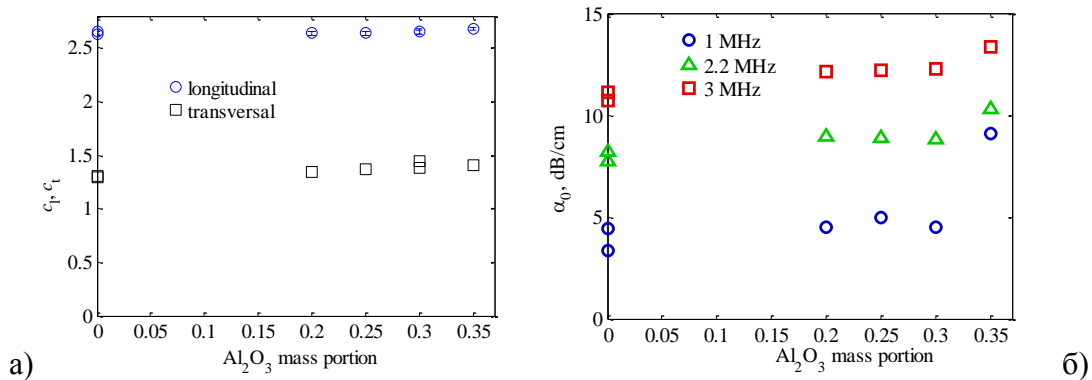


Рис.4. Зависимости скоростей продольной и сдвиговой волн (а) и коэффициента поглощения на разных частотах (б) от состава измеряемого образца.

На рис. 4 представлены экспериментальные зависимости коэффициента поглощения для фантомов кости от частоты и состава измеряемого образца. Также представлена зависимость различных компонент скорости звука от состава исследуемого образца. Представленная серия изготовленных образцов имеет акустические характеристики, близкие к реальной кости черепа.

На следующем этапе из описанных фантомов будет изготовлен искривлённый образец, повторяющий реальный профиль черепа для детальной разработки метода расчета акустических полей в такой структуре. Предварительно была проверена возможность измерения профиля реальной кости с использованием промышленного УЗ толщиномера Olympus (рис. 5).

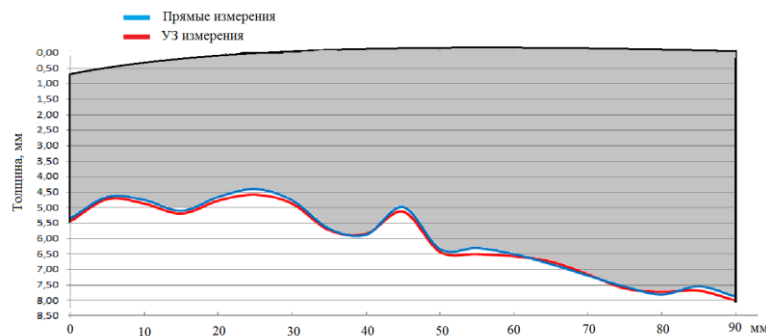


Рис.5. Общий полиномиально аппроксимированный профиль части кости свода черепа, измеренный прямым и ультразвуковым методами. Длина участка кости – 90 мм, толщина изменяется от 4,5мм до 8,2мм.

Как следует из полученных данных, оценка профиля черепной кости ультразвуковыми измерениями достаточно хорошо совпадает с данными прямых измерений, и УЗ данные могут быть использованы в дальнейшей обработке.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ №14-15-00665.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Л.Б. Лихтерман. Ультразвуковая томография и тепловидение в нейрохирургии // М. : Медицина, 1983. - 144 с.

2. К. Хилл, Дж. Бэмбер, Г. Тер Хаар «Ультразвук в медицине» // второе издание, изд-во ФИЗМАТЛИТ, Москва, 2008. -544 с.

3. Гурбатов С.Н., Руденко О.В. Акустика в задачах. Москва, Издательство "Наука. Физматлит", 1996 год - 336 с.

## **Новый метод определения хиральности водных сред и ее классификации**

А.В. Хахалин, О.Н. Градобоева

*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, физический факультет, кафедра молекулярной физики.*

[krashenart@mail.ru](mailto:krashenart@mail.ru)

Отличительной чертой живой природы является наличие свойства хиральности у биологических мономеров. Хиральность – свойство молекулы не совмещаться в пространстве со своим зеркальным отражением. Данное свойство влияет на способность биологической макромолекулы функционировать, все её составляющие должны иметь одинаковую хиральность. Все аминокислоты в протеинах – "левосторонние" в то время как все сахара в ДНК, РНК и в метаболических путях – "правосторонние" [1]. Большинство биологических объектов находятся в водном окружение, которое может влиять на хиральность системы. Поэтому изучение хиральности водных систем является актуальным направлением исследований.

Существуют два основных способа определения хиральности: с помощью численных методов и с помощью оптических, т.к. хиральность влияет на оптическую активность объекта. Для водных систем применим только численный метод из-за малых размеров структурных элементов. Все численные методы определения хиральности можно разделить на две основные группы. Первая группа методов основана на различных вариантах точного координационного совмещения объектов с их зеркальным образом. Вторая группа методов – на поиске элементов симметрии, т.к. при наличии в конфигурации элементов симметрии (центра симметрии, оси симметрии, плоскости симметрии) она является ахиральной. В данной работе описывается новый метод, имеющий принципиально иной подход. Его целью является не только определение хиральности объекта без изменения его структуры, но и сравнение различных конфигураций по хиральности между собой в рамках типа структуры [2].

Метод, описанный в данной работе, основан на построении матриц для каждой водной конфигурации. Вычисленные матрицы зависят только от взаимного расположения атомов кислорода и от направлений водородных связей между молекулами воды. Данный метод позволяет исследовать хиральные свойства водных систем, с помощью анализа водных оболочек примесных частиц, которыми могут быть и макромолекулы.

Исследование конфигураций по типам хиральности производилось в рамках типа структуры исследуемой водной системы. Она представлялась в виде набора водородо-связанных геометрических фигур. Каждая из которых являлась связанным ориентированным (ребро направлено от кислорода, являющегося донором протона к кислороду – акцептору) графом, вершинами которого являются атомы кислорода, а ребрами – водородные связи между молекулами воды [2].

Разработанный численный метод основывается на том, что водная конфигурация не совмещается со своим зеркальным образом только, если в ней есть элемент с направлением закрученности. Таким минимальным элементом в водной системе являются три молекулы воды, последовательно соединенные водородными связями. Но, для того чтобы учесть ориентацию элементов закрученности относительно друг друга, необходимо учитывать положение четвертой молекулы относительно плоскости, образованной данными тремя молекулами. Четвертая молекула должна быть так же связана с цепочкой водородной связью.

Реализация метода происходила в пять этапов. На первом этапе для каждой водной конфигурации, принадлежащей к одному типу структуры, строился зеркальный образ. Исходная конфигурация и ее отраженная конфигурация на последующих этапах исследовались независимо.

На втором этапе осуществлялся поиск цепочек из трех молекул воды. Причем, при последовательном прохождении цепочки должно было соблюдаться следующее условие: атом водорода первой молекулы цепочки имел связь с кислородом второй молекулы цепочки, а атом водорода второй молекулы цепочки имел связь с кислородом третьей молекулы цепочки. Для каждой найденной цепочки из трех молекул строились два вектора: вектор  $\mathbf{a}_1$  – брал начало в центре атома кислорода первой молекулы цепочки, а его конец совпадал с центром атома кислорода второй молекулы цепочки; вектор  $\mathbf{a}_2$  – брал начало в центре атома кислорода второй молекулы цепочки, а его конец совпадал с центром атома кислорода третьей молекулы цепочки. После чего, строился вектор закрученности  $\mathbf{a}_0$  с помощью векторного произведения данных векторов:

$$\vec{a}_0 = [\vec{a}_1 \times \vec{a}_2] \quad (1)$$

В качестве первой молекулы цепочки последовательно перебирались все молекулы рассматриваемой конфигурации.

На третьем этапе производился поиск четвертой молекулы. Четвертая молекула должна была иметь водородную связь с любой из трех молекул цепочки, причем связь могла быть как через атом кислорода, так и через атом водорода четвертой молекулы. В рамках рассматриваемой цепочки необходимо было учитывать наличие водородных связей между её элементами. Для этого производился поиск количества молекул, входящих в цепочку, имеющих водородную связь с первой молекулой цепочки (соседи первой молекулы).

На этом же этапе необходимо было исключить замыкающиеся цепочки и дублирование расчетов одних и тех же цепочек. Для исключения замыкания цепочек, т.е. цепочек вида 1-2-3-1, где цифры являются номерами молекул, четвертая молекула не должна была быть равной первой, второй или третьей молекуле цепочки.

Повторные вычисления цепочек возникали в случае наличия у четвертой молекулы цепочки двух водородных связей с молекулами из цепочки. Для исключения данного дублирования такие совокупности из четырех молекул упорядочивались по возрастанию номера молекулы, т.е. сочетание вида 3-1-4-2 после упорядочивания становилось 1-2-3-4, где цифры – номера молекул воды в конфигурации. После чего, упорядоченное сочетание записывалось в массив. В случае если новая цепочка после упорядочивания по номеру молекулы совпадала с уже записанным сочетанием в массив, то для неё расчеты не производились.

В цепочках, в которых количество водородных связей с элементами цепочки у четвертой молекулы не равно двум, только первые три молекулы в наборе из четырех молекул упорядочивались по возрастанию номера молекулы. Например, для трех сочетаний: 1-2-3-4, 2-3-1-4 и 1-4-3-2 (после упорядочивания: 1-2-3-4, 1-2-3-4 и 1-3-4-2), производилось два расчета, так как цепочка 1-2-3-4 встречалась 2 раза. А для трех сочетаний: 5-6-7-8, 8-7-6-4 и 7-6-8-5 (после упорядочивания: 5-6-7-8, 6-7-8-4 и 6-7-8-5) производилось три расчета, так как все данные цепочки различные.

Далее, находился вектор  $\mathbf{a}_3$  с началом в центре атома кислорода молекулы воды, входящей в цепочку, с которой четвертая молекула имеет водородную связь, и концом в центре атома кислорода четвертой молекулы.

Четвертый этап метода был посвящен заполнению матрицы T4 (см. табл. 1) отдельно для исходной конфигурации и ее зеркального образа.

Один сосед первой молекулы									Два соседа первой молекулы									Три соседа первой молекулы											
«+1»			«0»			«-1»			«+1»			«0»			«-1»			«+1»			«0»			«-1»					
3	2	1	3	2	1	3	2	1	3	2	1	3	2	1	3	2	1	3	2	1	3	2	1	3	2	1	3	2	1

Таблица 1. Структура матрицы T4.

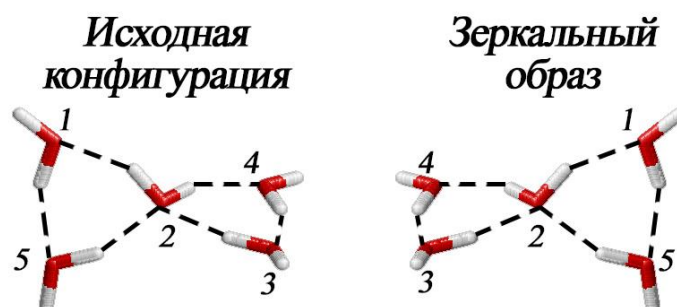
Первая строка столбцов табл. 1 характеризовала количество молекул цепочки имеющих с первой молекулой цепочки водородную связь. Вторая строка столбцов табл. 1 характеризовала положение четвертой молекулы цепочки относительно остальной цепочки. Для этого вычислялось скалярное произведение:

$$t = (\vec{a}_3, \vec{a}_0) \quad (2)$$

Если  $t > 0$ , то 1 заносилась в столбец «+1» (см. таблица 1), если  $t = 0$ , то 1 заносилась в столбец «0», если  $t < 0$ , то 1 заносилась в столбец «-1». Данные расчеты производились для каждой найденной цепочки из четырех молекул.

Третья строка столбцов табл.1 характеризовала с какой молекулой цепочки четвертая молекула цепочки имеет водородную связь. В случае, если четвертая молекула цепочки имела водородную связь с первой, второй и третьей молекулами цепочки, то 1 заносилась только в ячейку «3». Если она была связана с первой и второй молекулами цепочки, то 1 заносилась только в ячейку «2». Если с первой и третьей, то 1 заносилась только в ячейку «3». Если со второй и третьей, то 1 заносилась только в ячейку «3». Аналогичным образом находилась матрица T4 для зеркального образа конфигурации.

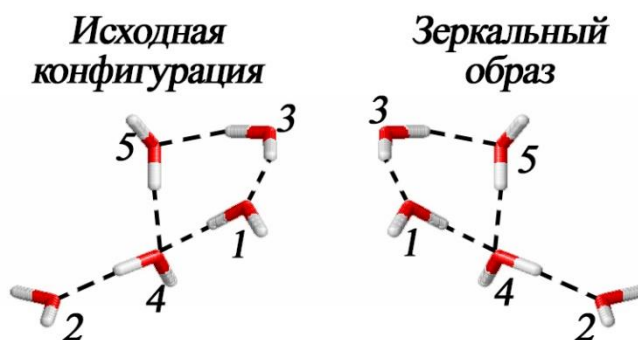
На пятом этапе метода производился анализ полученных матриц T4. Если матрицы исходной конфигурации и её зеркального образа совпадали, то исходная конфигурация считалась ахиральной, если не совпадали – то хиральной. На рис. 1 представлен пример хиральной конфигурации с ее зеркальным образом и соответствующими им матрицами T4, а на рис. 2 пример ахиральной конфигурации. Водным конфигурациям, относящимся к одному типу структуры и характеризующимся совпадающими матрицами T4, присваивался один тип хиральности. В случае несовпадения матриц T4 они относились к разным типам хиральности.



Исходная конфигурация																										
0	0	0	2	0	0	0	0	0	0	2	0	2	0	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	2

Зеркальный образ																											
0	0	0	0	0	2	0	0	0	2	0	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	2

Рис.1. Пример хиральной водной конфигурации с ее зеркальным образом и соответствующими им матрицами T4.



Исходная конфигурация																					
1	0	1	1	0	1	0	0	0	1	0	1	0	0	0	1	0	1	0	0	0	0
Зеркальный образ																					
1	0	1	1	0	1	0	0	0	1	0	1	0	0	0	1	0	1	0	0	0	0

Рис.2. Пример ахиральной водной конфигурации с ее зеркальным образом и соответствующими им матрицами T4.

Описанный численный метод позволяет быстро и однозначно определять хиральность водной системы, т.к. основан на сравнении матриц, структура которых не зависит от размеров исследуемой системы.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. В.М. Марков «Новые критерии степени симметрии и хиральности молекул» //Диссертация, Челябинск, 2001.
1. А.В. Хахалин, А.В. Теплухин // Биомедицинские технологии и радиоэлектроники №1-2, 2006. С. 71.

## Режим перемежаемости перемежаемостей в поведении характерных осцилляторных паттернов на эпилептической ЭЭГ

В.В. Грубов<sup>1,2</sup>, Е.Ю. Ситникова<sup>3</sup>, А.А. Короновский<sup>1</sup>, А.Е. Храмов<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского

<sup>2</sup>Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А.

<sup>3</sup>Институт высшей нервной деятельности и нейрофизиологии РАН

[vvgrubov@gmail.com](mailto:vvgrubov@gmail.com)

Многие методы для анализа сложных колебательных систем, разработанные в радиофизике и нелинейной динамике, находят применение в различных других областях естествознания, включая биологию, медицину, нейрофизиологию. Данные методы оказываются особенно актуальными при анализе электрической активности головного мозга, которая является результатом синхронной работы сложноорганизованных нейронных сетей, состоящих из огромного числа отдельных колебательных элементов – нейронов

Одним из наиболее распространенных источников информации о работе головного мозга является электроэнцефалограмма (ЭЭГ). ЭЭГ представляет собой усредненную сумму токов, генерируемых группой нейронов в области регистрирующего электрода. С точки зрения анализа ЭЭГ – сложный сигнал экспериментальной природы с определенным набором частотных диапазонов (альфа, бета, гамма и т.д.). Доказано, что существует четкая корреляция между активностью на ЭЭГ в определенном частотном диапазоне (формированием осцилляторного паттерна) и функциональным состоянием организма. Таким образом, задача исследования характерных осцилляторных паттернов на ЭЭГ является весьма важной, особенно в случае различных патологий нервной системы, когда определенные осцилляторные паттерны выступают в роли биомаркеров того или иного заболевания.

Одной из распространенных патологий нервной системы, вызывающей интерес исследователей, является абсанс-эпилепсия, поскольку приступ абсанс-эпилепсии сопровождается появлением на ЭЭГ характерного осцилляторного паттерна – пик-волнового разряда [1]. Известно, что пик-волновые разряды являются результатом гиперсинхронизации в таламо-кортикальной нейронной сети. Однако таламо-кортикальная нейронная сеть способна генерировать и неэпилептическую активность, например, сонные веретена – короткие (0.5-1.5 с) эпизоды колебаний с частотой 10-16 Гц и характерной веретенообразной формой [2]. Можно предположить существование глубокой связи между сонными веретенами и пик-волновыми разрядами, однако в настоящее время этот вопрос остается плохо изученным.

Целью данной работы является исследование сложной частотно-временной динамики характерных осцилляторных паттернов на ЭЭГ животных с наследственной предрасположенностью к абсанс-эпилепсии (крысы линии WAG/Rij) с использованием методов, основанных на непрерывном вейвлетном преобразовании. Исследования проводились на 24-часовых записях ЭЭГ, полученных у шести крыс WAG/Rij.

Для исследования сигналов ЭЭГ было использовано непрерывное вейвлетное преобразование [3],  $k$  представляет собой свертку исследуемого сигнала ЭЭГ,  $x(t)$ , и набора базисных функций  $\varphi_{s,\tau}$ , причем каждая из базисных функций  $\varphi_{s,\tau}$  может быть получена из так называемого материнского вейвлета  $\varphi_0$ :

$$W(s, \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} x(t) \varphi_{s,\tau}^*(t) dt, \quad \varphi_{s,\tau}(t) = \frac{1}{\sqrt{s}} \varphi_0\left(\frac{t-\tau}{s}\right) \quad (1)$$

где  $s$  – временной масштаб,  $\tau$  – временной сдвиг вейвлетного преобразования,  $\varphi_0(\eta)$  – материнский вейвлет.

В работе используется материнский Морле-вейвлет:

$$\varphi_0(\eta) = \pi^{-1/4} e^{j\omega_0\eta} e^{-\eta^2/2} \quad (2)$$

На основе непрерывного вейвлетного преобразования был разработан метод для автоматического выделения пик-волновых разрядов и сонных веретен на ЭЭГ [1]. С помощью данного метода была выполнена автоматическая разметка исследуемых экспериментальных сигналов ЭЭГ крыс WAG/Rij. Для изучения закономерностей появления характерных осцилляторных паттернов на ЭЭГ был проведен статистический анализ временных интервалов (длительностей ламинарных фаз)  $l$  и  $s$  между последовательными событиями на ЭЭГ – сонными веретенами и пик-волновыми разрядами соответственно. Пример выделения таких временных интервалов представлен на рис. 1.

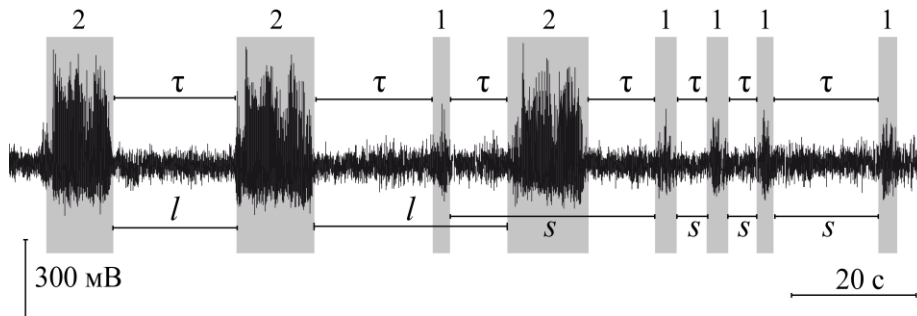


Рис. 1. Пример разметки ЭЭГ и выделения временных интервалов между последовательными событиями на ЭЭГ для сонных веретен (1) и пик-волновых разрядов (2).

Для исследования динамики появления осцилляторных паттернов на ЭЭГ были построены статистические распределения временных интервалов (длительностей ламинарных фаз)  $N(l)$  и  $N(s)$  для сонных веретен и пик-волновых разрядов соответственно. Ряд исследователей [4] сообщают о наличии перемежаемости в поведении некоторых осцилляторных паттернов на ЭЭГ человека и животных, поэтому было выдвинуто предположение, что динамика сонных веретен и пик-волновых разрядов также может быть описана в рамках теории перемежаемости. Полученные экспериментальные распределения  $N(l)$  и  $N(s)$  тестировались на соответствие теоретическому степенному закону  $N(l) = \beta l^\alpha$ . В данном случае важную роль играет значение параметра  $\alpha$ , поскольку некоторые специфические значения  $\alpha$  соответствуют наличию в системе режима перемежаемости.

Значение показателя  $\alpha$  искалось отдельно для сонных веретен и пик-волновых разрядов, и было обнаружено, что  $\alpha = -3/2$  для обоих типов осцилляторных паттернов на ЭЭГ (рис. 2). Известно, что значение показателя степени в степенном законе  $\alpha = -3/2$  соответствует наличию режима on-off перемежаемости в системе. Таким образом, поведение сонных веретен и пик-волновых разрядов может быть описано в рамках теории on-off перемежаемости.

Нужно отметить, что большинство работ, направленных на исследование перемежаемости, обычно ограничиваются случаями, когда в системе присутствует лишь один тип перемежаемости. Однако, как было обнаружено недавно, различные типы перемежаемости могут сосуществовать в системе одновременно, сменяя друг друга, что приводит к возникновению нового уровня организации временной динамики – режима перемежаемости перемежаемостей [5].



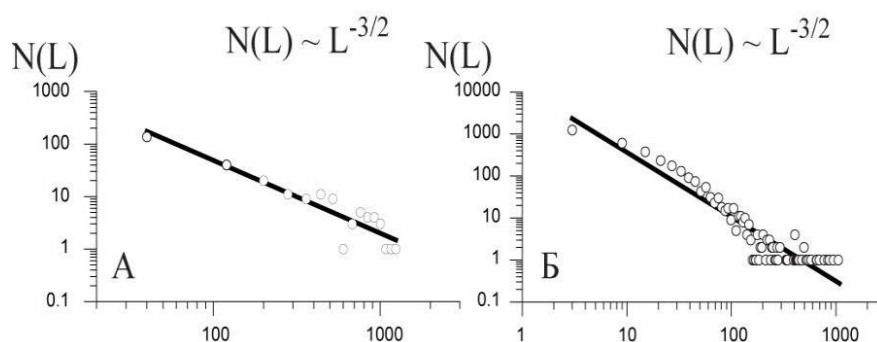


Рис. 2. Пример экспериментальных (обозначены точками) и теоретических (обозначены линиями) распределений  $N(l)$  и  $N(s)$  для сонных веретен (А) и пик-волновых разрядов (Б).

В настоящей работе было выдвинуто предположение, что совместная динамика сонных веретен и пик-волновых разрядов может соответствовать режиму перемежаемости перемежаемостей. Для этого автоматическая разметка сонных веретен и пик-волновых разрядов рассматривалась совместно и анализировались временные интервалы  $\tau$  (см. рис. 1). Полученные экспериментальные распределения  $N(\tau)$  тестировались на соответствие теоретическому степенному закону  $N(l) = \beta l^\alpha$  как и в предыдущем исследовании on-off перемежаемости (рис. 3). Было обнаружено, что в данном случае  $\alpha = -2$ , что соответствует режиму on-off – on-off перемежаемости перемежаемостей.

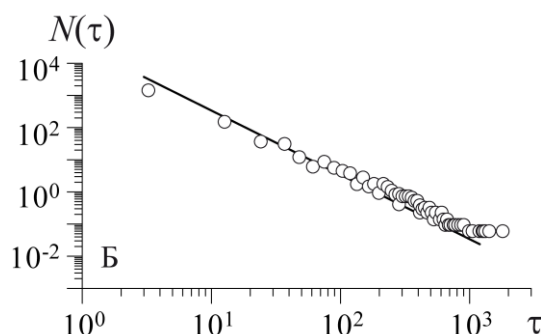


Рис. 3. Пример экспериментального (обозначено точками) и теоретического (обозначено линиями) распределения  $N(\tau)$  для совместного анализа сонных веретен и пик-волновых разрядов.

Наличие перемежаемости в поведении осцилляторных паттернов на ЭЭГ имеет важное значение для фундаментальных исследований сна и абсанс-эпилепсии, позволяет лучше понять взаимосвязь между механизмами регуляции сна и эпилепсии.

Работа поддержана РФФИ (14-02-31235) и Фондом содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере (конкурс "У.М.Н.И.К.", № 0002038).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. G. Kostopoulos // Clin. Neurophysiol. 2000. V. 111. P. 27–38.
2. L. De Gennaro and M. Ferrara // Sleep Med. Rev. 2003. V. 7. P. 423-440.
3. А.Е. Hramov "Wavelets in neurodynamics and neurophysiology (In Russian)" Moscow, Fizmatlit, 2013.
4. J.L. Perez // European Journal of Neuroscience. 1999. V. 11. P. 2571-2576.
5. А.Е. Hramov // Chaos. 2013. V. 23. P. 033129.

## Рентгенография и спектроскопия редкоземельных галлиевых боратов со структурным типом хантита

Е.А. Добрецова<sup>1</sup>, К.Н. Болдырев<sup>1</sup>, Е.Ю. Боровикова<sup>2</sup>, С.М. Аксенов<sup>3</sup>, С.А. Кокарев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Институт спектроскопии РАН

<sup>2</sup> Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Геологический факультет, Кафедра кристаллографии и кристаллохимии

<sup>3</sup> Институт кристаллографии РАН

[elena-dobrecova@yandex.ru](mailto:elena-dobrecova@yandex.ru)

В работе представлены исследования структурных и физических свойств редкоземельных галлиевых боратов  $R\text{Ga}_3(\text{BO}_3)_4$ , где  $R = \text{Nd} - \text{Er}$ .

Кристаллы были получены методом спонтанной кристаллизации из раствора в расплаве с использованием в качестве растворителя  $\text{Bi}_2\text{O}_3 - \text{V}_2\text{O}_5$  [1].

Рентгенодифракционные рефлексы для составов  $\text{EuGa}_3(\text{BO}_3)_4$  и  $\text{HoGa}_3(\text{BO}_3)_4$  зарегистрированы от монокристаллов в полной сфере обратного пространства на дифрактометре Xcalibur Oxford Diffraction, оснащённом CCD-детектором. Кристаллические структуры расшифрованы в пр.гр.  $R32$  с параметрами элементарной ячейки  $a = 9.4642(2) \text{ \AA}$ ,  $c = 7.4653(2) \text{ \AA}$  и  $a = 9.4409(5) \text{ \AA}$ ,  $c = 7.4334(1) \text{ \AA}$  для Eu- и Ho-боратов соответственно.

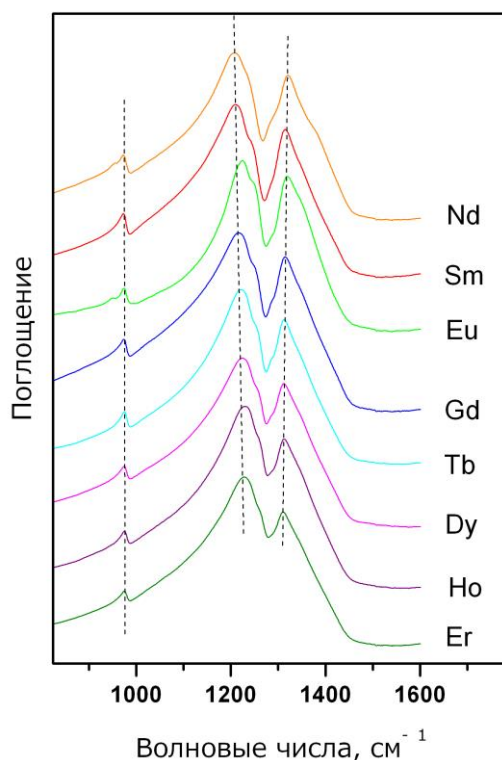


Рис. 1. ИК-спектры редкоземельных галлиевых боратов  $R\text{Ga}_3(\text{BO}_3)_4$  в области асимметричных валентных колебаний групп  $\text{BO}_3^{3-}$ . Рядом со спектрами обозначен тип редкоземельного иона.

Спектры поглощения в средней и далекой ИК-областях были зарегистрированы на Фурье-спектрометре Bruker IFS 125HR при комнатной температуре. С учетом фактор-группового анализа [2] нами были определены области внутренних и внешних колебаний групп  $\text{BO}_3^{3-}$ , трансляционных колебаний  $\text{Ga}^{3+}$  и  $\text{R}^{3+}$  и количество этих колебаний в структуре  $R32$ . Спектры редкоземельных галлиевых боратов практически идентичны, что указывает на изоструктурность этих соединений. На рис. 1

представлены ИК-спектры в области валентных колебаний. Расщепление полосы  $975\text{ см}^{-1}$  указывает на наличие небольшого процента политипной фазы с моноклинной структурой. Встраивание доменов смежной фазы в основную структуру характерно для боратов семейства хантитов.

Спектры пропускания ориентированных монокристаллов ряда редкоземельных галлиевых боратов также были получены на Фурье-спектрометре Bruker IFS 125HR в широких спектральных и температурных диапазонах. По оптическим спектрам была определена штарковская структура уровней основного и возбужденного состояний редкоземельных ионов. На основе экспериментально полученных данных по энергиям и симметрии штарковских уровней в настоящий момент ведутся теоретические расчеты параметров кристаллического поля.

Спектры люминесценции и кривые затухания люминесценции  $\text{EuGa}_3(\text{BO}_3)_4$  (рис. 2) и  $\text{HoGa}_3(\text{BO}_3)_4$  были измерены при комнатной температуре. В качестве источника возбуждения был использован азотный лазер ( $\lambda = 337\text{ нм}$ ). Спектры люминесценции были зарегистрированы с помощью спектрографа Oriel MS257, оснащенного детектором Marconi CCD, кривые затухания люминесценции - с помощью осциллографа Tektronix TDS 2022. Наблюдаемые в спектрах люминесценции пики соотношены с электронными переходами в ионе  $\text{Eu}^{3+}$  и  $\text{Ho}^{3+}$ . Постоянная времени затухания люминесценции в  $\text{EuGa}_3(\text{BO}_3)_4$  при излучении  $614\text{ нм}$  составляет около  $940\text{ мкс}$ , что типично для  $\text{Eu}^{3+}$  (рис. 2).  $\text{HoGa}_3(\text{BO}_3)_4$  имеет время затухания люминесценции, в несколько раз меньше, около  $140\text{ мкс}$ . Полученные данные доказывают перспективность Eu и Ho-галлиевых боратов при использовании в голубых и ультрафиолетовых лазерах.

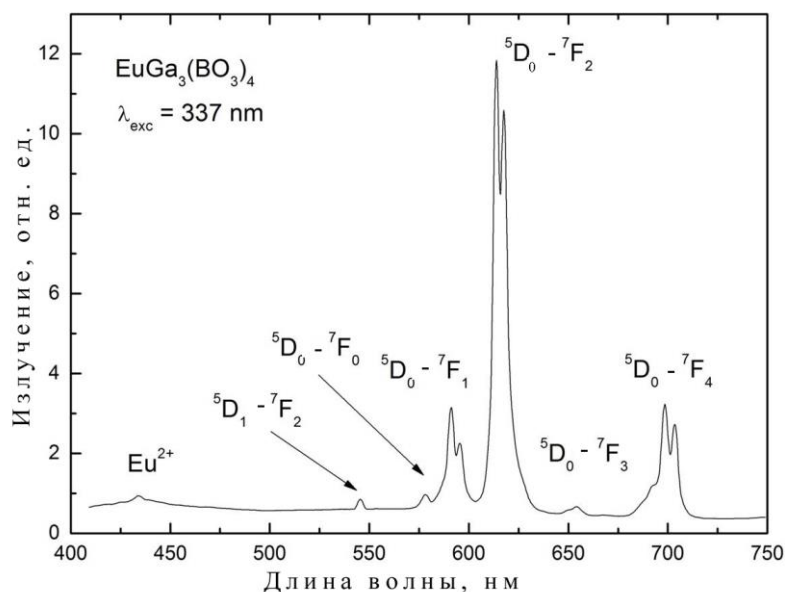


Рис. 2. Спектр люминесценции  $\text{EuGa}_3(\text{BO}_3)_4$  при возбуждении  $337\text{ нм}$ .

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант РНФ № 14-12-01033) и стипендии Президента РФ (СП-754.2015.1)

#### ЛИТЕРАТУРА

1. L.I. Alshinskaya, N.I. Leonyuk, T.I. Timchenko // Kristal und Technik. 1979. V.14. P. 897.
2. E.Yu. Borovikova et al. // Vibr. Spectr. 2013. V. 68. P. 82.

## Оптические и магнитные свойства редкоземельных хромовых боратов $R\text{Cr}_3(\text{BO}_3)_4$ , где $R = \text{Gd}, \text{Dy}, \text{Ho}$

Е.А. Добрецова<sup>1</sup>, К.Н. Болдырев<sup>1</sup>, С.Ю. Гаврилкин<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Институт спектроскопии РАН

<sup>2</sup> Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН

[elena-dobrecova@yandex.ru](mailto:elena-dobrecova@yandex.ru)

В данной работе представлены исследования оптических и магнитных свойств редкоземельных хромовых боратов  $R\text{Cr}_3(\text{BO}_3)_4$ , где  $R = \text{Gd}, \text{Dy}, \text{Ho}$ . Кристаллы были получены методом спонтанной кристаллизации из раствора в расплаве с использованием в качестве растворителя тримолибдата калия и при соотношении борат/растворитель = 1:1. Оптические исследования проводились на монокристаллических образцах, магнитные и калориметрические – на поликристаллах. Оптические спектры пропускания были зарегистрированы на Фурье-спектрометре высокого разрешения Bruker IFS 125HR в широком спектральном и температурном диапазонах. Магнитные измерения и измерение теплоемкости были выполнены с помощью автоматизированного комплекса PPMS-9 (Quantum Design).

По оптическим спектрам удалось определить штарковскую структуру уровней основного и возбужденных состояний  $\text{Dy}^{3+}$  и  $\text{Ho}^{3+}$  в данных соединениях. Кристаллы  $\text{GdCr}_3(\text{BO}_3)_4$  были легированный 1%  $\text{Nd}^{3+}$ , который использовался в качестве зонда. В низкотемпературных спектрах при температурах магнитных переходов наблюдается изменение формы линии редкоземельных ионов, будь то сужение линии, смещение или расщепление на компоненты (в случае крамерсовских ионов). На рисунке 1 показано расщепление спектральных линий иона  $\text{Nd}^{3+}$  в борате  $\text{GdCr}_3(\text{BO}_3)_4:\text{Nd}(1\%)$ , начинающееся ниже температуры  $7.0 \pm 0.5$  К.

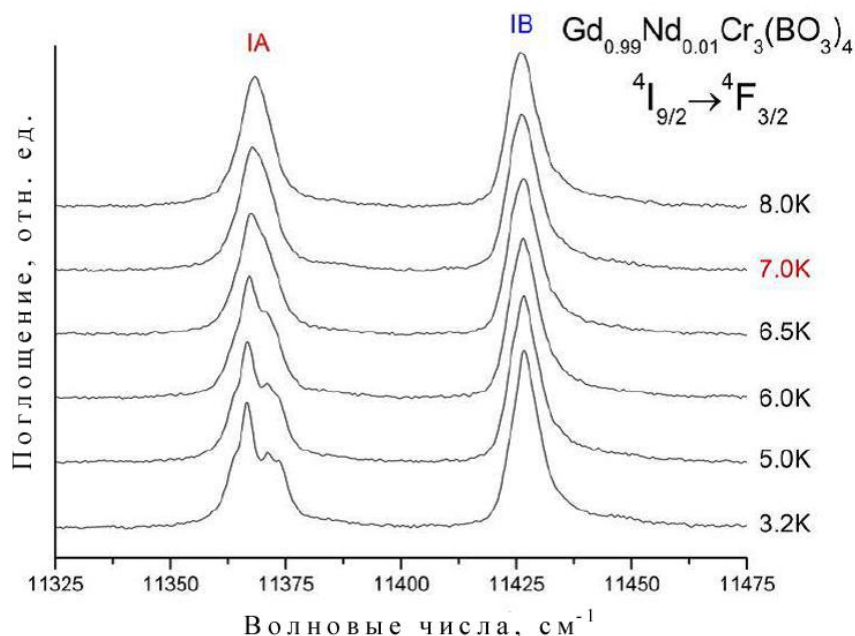


Рис. 1. Расщепление спектральных линий в иона  $\text{Nd}^{3+}$  в области спектрального перехода  $4I_{9/2} \rightarrow 4F_{3/2}$  в кристалле  $\text{GdCr}_3(\text{BO}_3)_4:\text{Nd}(1\%)$ .

При  $T > 30$  К кривая магнитной восприимчивости  $\chi(T)$  в магнитном поле  $B = 1$  кГс хорошо описывается законом Кюри-Вейса с эффективным магнитным моментом, который находится по формуле (1):

$$\mu_{eff} = \sqrt{3\mu_{eff}(Cr^{3+})^2 + \mu_{eff}(R^{3+})^2} \quad (1)$$

Значение температуры Вейса близко к 0К, что указывает на конкуренцию ферромагнитного и антиферромагнитного обменного взаимодействия. Отклонение же от закона Кюри-Вейса задолго до фазовых переходов в  $RCr_3(BO_3)_4$  ( $T > 40$  К) так же, как и в случае с  $NdCr_3(BO_3)_4$  [1] и  $SmCr_3(BO_3)_4$  [2], по-видимому, свидетельствует о низкой размерности хромовой магнитной системы

На температурной зависимости теплоемкости хромовых боратов наблюдается несколько особенностей. Для каждого состава можно выделить на кривой три пика, указывающих на изменения в магнитной структуре соединений. При этом, как правило, два первых пика соответствуют по своей форме фазовым переходам второго рода, а самый низкотемпературный – фазовому переходу первого рода, вероятней всего, спин-переориентации магнитных моментов хрома. На рис. 2 представлена кривая температурной зависимости теплоемкости  $HoCr_3(BO_3)_4$ .

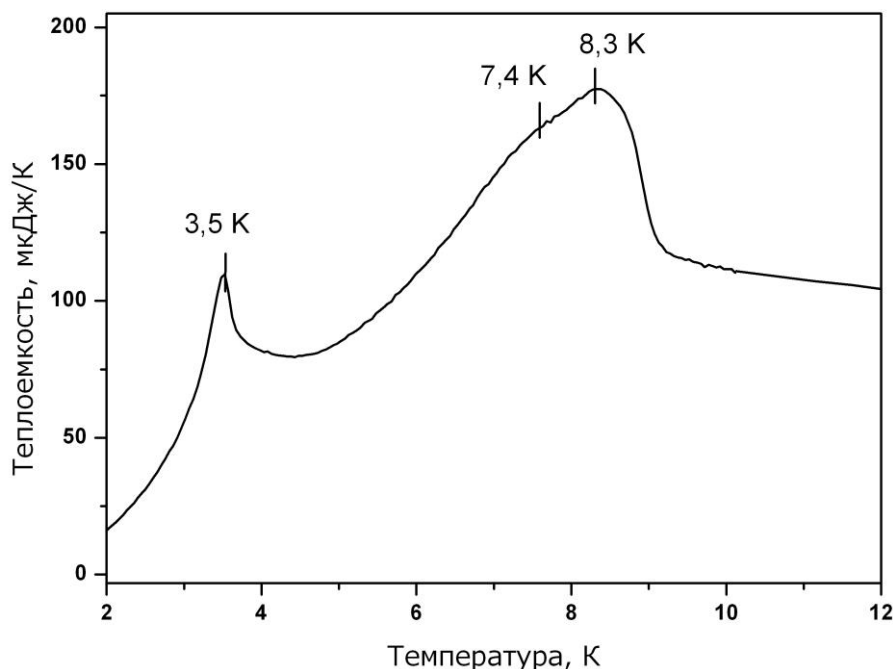


Рис. 2. Температурная зависимость теплоемкости  $HoCr_3(BO_3)_4$ .

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант РНФ № 14-12-01033) и стипендии Президента РФ (СП-754.2015.1) Поглощение, отн. ед.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Е.А. Попова et al. // Phys. Rev. B 2007. V. 75. No 5. P. 054446-054441.
2. К.Н. Болдырев и др. // Вестник НИЯУ «МИФИ». 2014. Т. 3. № 4. С. 484

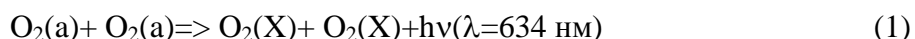
## Температурная зависимость константы скорости реакции димольного излучения синглетного кислорода в полосе 634 нм

А.С. Инсапов, М.В. Загидуллин

<sup>1</sup>Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королева  
[ainlolcat@gmail.com](mailto:ainlolcat@gmail.com)

Синглетный кислород - это молекулярный кислород  $O_2$ , находящийся в первом  $^1\Delta_g$  ( $O_2(a)$ ) или втором  $^1\Sigma_g$  ( $O_2(b)$ ) электронно-возбужденных состояниях. Синглетный кислород участвует во многих физических, химических, биологических, атмосферных процессах. Молекулы  $O_2(a)$  являются источником энергии в кислородно-йодных лазерах [1]. В фотодинамической терапии молекулы  $O_2(a)$  вызывают некроз раковых клеток [2]. Показано, что добавление синглетного кислорода в горючую смесь турбореактивных двигателей способно снизить время иницирования реакции и температуру воспламенения смеси [3].

Корректное определение концентраций молекул  $O_2(a)$  становится важным при анализе и оптимизации процессов с его участием. Одним из способов определения концентрации  $O_2(a)$  является метод эмиссионной спектроскопии с использованием полосы столкновительно – индуцированного излучения (СИИ) или димольного излучения на длине волны 634 нм:



В СИИ (1) могут принимать участие свободные или связанные комплексы  $(O_2(a))_2$ .

В работах [4], [5] была измерена температурная зависимость константы скорости СИИ (1). Показано, что константа скорости СИИ имеет минимум около температуры 200К и затем резко возрастает при температуре ниже 120К (см.рисунок 1). Целью работы является теоретическое объяснение наблюдаемой температурной зависимости скорости СИИ (1).

Число пар  $(O_2(a))_2$  в объеме  $V$  при концентрации молекул  $n_a$ , находящихся на взаимном расстоянии в интервале  $(R, R+dR)$  с взаимной ориентацией молекул относительно соединяющей их оси в интервале  $(\Omega_1, \Omega_1+d\Omega_1), (\Omega_2+d\Omega_2)$  равно:

$$dN(R, \Omega_1, \Omega_2) = \frac{1}{Q} n_a^2 \exp\left(-\frac{\varepsilon(R, \Omega_1, \Omega_2)}{T}\right) R^2 dR d\Omega_1 d\Omega_2, \quad (2)$$

где  $\varepsilon$  – энергия взаимодействия в комплексе  $(O_2(a))_2$ ,  $Q$  – нормировочный коэффициент.

$$Q = \frac{1}{(4\pi)^2 V} \int_{R, \Omega} \exp\left(-\frac{\varepsilon(R, \Omega_1, \Omega_2)}{T}\right) R^2 dR d\Omega_1 d\Omega_2 \approx 1$$

Тогда для константы скорости СИИ получим:

$$k = \frac{1}{Q} \int A(R, \Omega_1, \Omega_2) \exp\left(-\frac{\varepsilon(R, \Omega_1, \Omega_2)}{T}\right) R^2 dR d\Omega_1 d\Omega_2 \quad (3)$$

где  $A$  – вероятность излучения фотона, когда молекулы синглетного кислорода находятся на расстоянии  $R$  и ориентацией  $\Omega_1, \Omega_2$ . В работе [6] показано, что только димеры  $(O_2(a))_2$  со структурой  $D_{2h}$  (оси молекул параллельны) величина  $A$  отлична от нуля. Представим энергию  $\varepsilon$  для  $N$  конфигурации в виде потенциала Леннарда-Джонса:

$$\varepsilon(R) = e \left[ \left( \frac{R_0}{R} \right)^{12} - 2 \left( \frac{R_0}{R} \right)^6 \right] \quad (4)$$

где  $e = 175\text{K}$ ,  $R_0 = 0.339\text{nm}$  [7]. Для вероятности излучения фотона воспользуемся приближением  $A(R) = A_0 \exp(-R/a)$  [9], где  $a$ -размерный параметр. Параметр  $a$  определим по наилучшему совпадению расчетной и экспериментальной температурной зависимостью величины  $k$ .

Расчетные и измеренная температурные зависимости константы  $k$  для различных значений размерного параметра  $a$  приведены на рисунке 1. Как показывает анализ, что наилучшее совпадение с экспериментом достигается при  $a = 0.04019R_0$ . При выбранной зависимости  $A(R)$  наблюдается минимум при  $T \approx 200\text{K}$  и рост при температуре ниже  $120\text{K}$ .

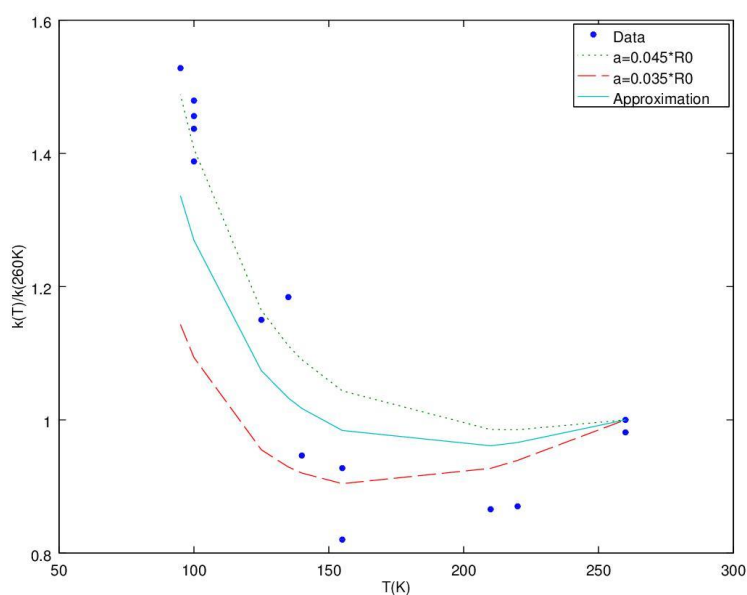


Рис 1 Температурная зависимость константы скорости СИИ (1).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Manish Gupta et al. // Chemical Physics Letters. 2004. P. 42–46.
2. Guo et al. // Nanomedicine: Nanotechnology, Biology and Medicine. 2010. V.6. P. 486-495
3. A M Starik et al. // Plasma Sources Sci. Technol. 2012. V. 21. No 3.
4. Borrel et al. J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1988. V. 84. P. 727-735.
5. Загидуллин et al. // Оптика и спектроскопия. 2014. V. 116. No 4. P. 581-587.
6. Goodman // The Journal of Chemical Physics. 1977 V.67. P. 4398-4407.
7. Bussery // Chemical Physics. 1994. V. 184. P. 29–38.
8. E. A. Ogryzlo et al. // J. Chem. Phys. 1970. V. 52. P. 3718.

## Сопоставление методов восстановления параметров системы барорефлекторной регуляции артериального давления

Ю.М. Ишбулатов<sup>1</sup>, А.С. Караваев<sup>1,2</sup>, В.И. Пономаренко<sup>1,2</sup>,  
М.Д. Прохоров<sup>2</sup>, Б.П. Безручко<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

<sup>2</sup>Саратовский филиал Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН  
[ishbulatov95@mail.ru](mailto:ishbulatov95@mail.ru)

Системы с запаздывающей обратной связью широко распространены среди объектов живой и неживой природы. Исследованию таких систем способствует наличие формализованных представлений об их структуре и динамике в виде дифференциальных уравнений с запаздывающим аргументом. Особую роль системы с запаздыванием играют при моделировании биологических систем. Это связано с низкими скоростями распространения сигналов в организме, что требует явного учета времени запаздывания в моделях [1-4]. Модели в виде дифференциальных уравнений с задержкой широко используются также для описания радиофизических и оптических систем [5-9]. Наличие математической модели открывает возможности для прогнозирования поведения объекта в различных условиях и при изменении управляющих параметров, а также оценивания параметров системы, недоступных непосредственным измерениям, по сигналу системы.

Универсального метода реконструкции, позволяющего производить динамическую реконструкцию систем по их реализациям не существует [10]. Поэтому исследователи вынуждены предлагать методы, ориентированные на узкие классы систем, учитывая особенности структуры конкретных объектов. Задача реконструкции параметров периодических систем с задержкой дополнительно осложнена простотой их колебательных режимов, несущих малое количество информации об исследуемой системе. В таких ситуациях методы реконструкции, хорошо зарекомендовавшие себя при анализе хаотических систем, оказываются неприменимыми или имеют узкие границы применимости.

В силу того что поведение близкое к периодическому особенно характерно для систем биологического происхождения, задача реконструкции периодических систем важна как для получения фундаментальных знаний о живых объектах, так и для решения прикладных задач медицинской диагностики [11-13]. Поэтому настоящая работа посвящена изучению границ применимости известных ранее и предложенного нами оригинального метода реконструкции систем с запаздыванием по зашумленным периодическим временным рядам на примере системы барорефлекторной регуляции среднего артериального давления [2]. Модельное уравнение имеет вид дифференциального уравнения первого порядка с запаздыванием:

$$\varepsilon \dot{x}(t) = -x(t) + f(x(t-\tau)), \quad (1)$$

где  $\tau$  — время запаздывания,  $\varepsilon$  — инерционность, а нелинейная функция  $f$  имеет следующий вид:

$$f(x) = k \left( \frac{r^*}{1 + \alpha e^{-\beta x}} - \frac{r^*}{1 + \alpha e^{\beta x}} \right). \quad (2)$$

При  $\varepsilon = 2$ ,  $\tau = 3.6$ ,  $\alpha = 1$ ,  $\beta = 2$ ,  $r^* = 1$ ,  $k = -1.65$  исследуемая система демонстрирует периодические колебания с периодом около 10 секунд.



В нашем исследовании мы рассматривали границы применимости пяти методов оценки времени запаздывания, широко применяемых для анализа хаотических систем, и подхода, основанного на использовании дополнительной системы с синхронным откликом [14]. В рамках исследования сопоставлялись следующие известные методы: оценка автокорреляционной функции (АКФ), построение статистики распределения экстремумов [10], подсчет информационной энтропии [15], расчет филл-фактора траектории системы в трехмерном пространстве [16], определение длины проекции траектории системы в двумерное пространство [17].

Важнейшим этапом реконструкции систем с запаздыванием является восстановление времени задержки. Этот шаг, как правило, выполняется на первом этапе реконструкции. При этом небольшие ошибки при оценке  $\tau$  приводят к резкому росту погрешности при последующей оценке остальных параметров системы [14]. Если  $\tau$  восстановлено точно, то прочие параметры могут быть реконструированы, например, с помощью метода предложенного в [17]. Поэтому, в данной работе мы использовали точность оценки времени запаздывания в качестве критерия работоспособности сопоставляемых подходов, считая допустимой ошибку в одну единицу шага выборки.

Предложенный нами метод восстановления времени задержки основан на использовании дополнительной системы с синхронным откликом. Временной ряд  $x(t)$  исследуемой системы подается на вход вспомогательной системы, имеющей структуру аналогичную исследуемой, но с разорванной петлей обратной связи. Затем мы вычисляем разность сигналов  $z(t) = x(t) - v(t)$ , где  $v(t)$  — сигнал вспомогательной системы. Если параметры вспомогательной системы идентичны параметрам исследуемой, то дисперсия  $D$  разностного сигнала  $z(t)$  будет определяться только шумами. Таким образом, параметры оценивались путем минимизации целевой функции  $D(\tau; \varepsilon; f)$  — дисперсии сигнала  $z(t)$ .

В ходе численного моделирования мы подвергали систему воздействию измерительных и динамических шумов, всегда присутствующих в реальной системе. Интенсивность добавленного шума рассчитывалась как отношение среднеквадратичного отклонения шума к стандартному отклонению системы без шума, выраженное в процентах.

Также в ходе численных экспериментов мы оценивали зависимость точности реконструкции параметров от уровня динамических шумов. Важно отметить, что широкополосное шумовое воздействие на динамику системы в некоторых случаях может облегчить реконструкцию параметров. Внешний широкополосный сигнал, например импульсы, интервалы между которыми меняются по случайному закону, будет сталкивать траекторию с аттрактора, и система будет постоянно находиться в режиме переходных процессов. Однако использование такого подхода не всегда приводит к положительным результатам. Случайная последовательность импульсов вводилась в динамику исследуемой системы в соответствии с представлениями, предложенными в работе [3] следующим образом:

$$\varepsilon \dot{x}(t) = -x(t) + f(x(t - \tau)) + y(t), \quad (3)$$

где  $y(t)$  — динамический шум, представляющий собой последовательность симметричных биполярных прямоугольных импульсов длительность которых равна 1, а расстояние между передними фронтами импульсов меняется случайным образом в интервале от 3 до 5. Такие параметры воздействующего сигнала были выбраны в связи с тем, что они могут быть качественно воспроизведены в натурном эксперименте в физиологических тестах с механической или электрической стимуляцией групп каротидных барорецепторов с частотой от 3 до 5 секунд. В ходе проведенных исследований использовались и другие временные параметры такого воздействующего

импульсного сигнала, однако преимуществ по сравнению с указанными параметрами не было выявлено.

В качестве внешнего воздействия нами также использовались цветные шумы с различными распределениями и случайные последовательности импульсов различной формы. Однако использование именно случайной последовательности биполярных прямоугольных импульсов с невысокой скважностью оказалось наиболее эффективным для восстановления времени запаздывания системы (3).

В ходе проведенных исследований нами были получены следующие результаты.

Методы, основанные на оценке АКФ, расчете информационной энтропии и построении статистики распределения экстремумов не позволяют оценить время запаздывания исследуемой периодической системы даже в отсутствие измерительных шумов. Изменение уровня динамических шумов не оказывает влияние на работоспособность методик, основанных на оценках АКФ и информационной энтропии. Метод построения статистики распределения экстремумов начинает демонстрировать локальный минимум на верном времени запаздывания при уровне динамических шумов более 75%, однако, при дальнейшем увеличении уровня внешнего воздействия минимум не становится абсолютным, даже при длинах реализаций более 360 характерных периодов (что соответствует часовой записи в натурном эксперименте и, фактически, является пределом возможностей для исследований *in vivo*).

Метод, основанный на определении длины проекции траектории системы в двумерное пространство, по временному ряду автономной системы точно восстанавливал значения времени запаздывания  $\tau = 3.6$  и инерционности  $\varepsilon = 2$ . Для успешной реконструкции параметров оказалось достаточно реализации длиной 10 характерных периодов. Однако, метод продемонстрировал высокую чувствительность к измерительным шумам. Даже увеличение длины реализации, вплоть до 360 характерных периодов, не позволяет провести удачную реконструкцию в присутствии измерительного шума со среднеквадратичным отклонением в 1%. Добавление динамических шумов также отрицательно сказывалось на работоспособности метода.

Мы исследовали также работоспособность метода, основанного на расчете флуктуационного индекса траектории системы в трехмерном пространстве с помощью подсчета количества занятых кубических элементов этого пространства. Результаты численного моделирования показали, что метод груб к выбранному размеру грани куба  $\delta$  при  $\delta < 0.007$ . Поэтому, при расчетах мы использовали  $\delta = 0.0035$ .

Установлено, что в отсутствие широкополосного возбуждающего воздействия методика не позволяет восстановить время запаздывания. В отсутствие измерительных шумов время запаздывания точно восстанавливается в присутствии воздействия  $u(t)$  со среднеквадратичным отклонением в 5% от среднеквадратичного отклонения автономной системы по временной реализации длиной 15 характерных периодов. В присутствии измерительного шума со среднеквадратичным отклонением в 1% от среднеквадратичного отклонения автономной системы точная реконструкция времени запаздывания оказалась возможной при увеличении длины реализации до 360 характерных периодов и среднеквадратичного отклонения воздействия  $u(t)$  до 75%

Метод, основанный на использовании вспомогательной системы с синхронным откликом, показал лучшую устойчивость к измерительным шумам. При длине реализации в 360 характерных периодов метод оказался работоспособным при уровнях измерительных шумов от 0 до 7%. При этом наличие динамического шума с уровнем меньше 20% не оказывает значимого эффекта на точность реконструкции  $\tau$ . Отсутствие явного учета широкополосного возбуждения в структуре вспомогательной системы

приводит к потере методом работоспособности при более высоких уровнях динамического шума.

В работе выявлялись возможности и исследовались границы применимости предложенного нами подхода и нескольких известных методов реконструкции времени задержки генераторов с запаздывающей обратной связью вида (1) по их временным рядам, соответствующим движению системы вблизи предельного цикла. Исследования проводились на примере временных реализаций модельной системы барорефлекторной регуляции среднего артериального давления [2]. Исследовалась работоспособность методов при наличии возбуждающего систему воздействия в виде случайной последовательности биполярных прямоугольных импульсов со скважностью порядка нескольких единиц и в присутствии измерительного шума.

Необходимость максимального учета априорной информации о системе для решения задачи реконструкции подтверждается результатами проведенного нами численного моделирования. Было установлено, что методы, основанные на оценке автокорреляционной функции, информационной энтропии, статистике распределения экстремумов и не учитывающие особенности структуры конкретной системы оказались неприменимы для оценки параметров модели с периодической реализацией даже в отсутствие измерительных шумов.

Результаты численного моделирования свидетельствуют о том, что предложенный нами метод, использующий вспомогательную систему с синхронным откликом, демонстрирует лучшую устойчивость к измерительным шумам. Метод, основанный на расчете филл-фактора траектории системы в трехмерном пространстве, оказался работоспособным в наиболее широком диапазоне динамических шумов, но сильно уступает нашему подходу в устойчивости к измерительным шумам. Методика определения длины проекции траектории системы в двумерное пространство оказалась наименее требовательной к длине реализации при анализе автономной системы, но также проявила высокую уязвимость к шумам различной природы.

*Работа была выполнена при поддержке гранта РФФИ 14-12-00291.*

#### ЛИТЕРАТУРА

1. H. Seidel et al. // *Physica D*. 1998. V. 115. P. 145.
2. J.V. Ringwood, S.C. Malpas // *American Physiol.* 2001. V. 280. P. 1105.
3. D.E. Burgess // *American Physiol.* 1997. V. 273. 1878.
4. M.C. Mackey, L. Glass // *Science*. 1977. V. 197. –P. 287.
5. K. Ikeda // *Opt. Commun.* 1979. V. 30. P. 257.
6. M. Hasler // *Proc. of IEEE*. 1987. V. 75. No 8. P. 40.
7. R. Hegger et al. // *Chaos*. 1998. V. 8. No 3. P. 727.
8. Б.П. Безручко и др. // *Письма в ЖТФ*. 1994. Т. 20. В. 19. С. 75.
9. R. Lang et al. // *IEEE J. Quantum Electron.* 1980. V. 16. P. 347.
10. B.P. Bezruchko et al. // *Physical Review E*. 2001. V.64. 056216
11. M.D. Prokhorov et al. // *Phys. Rev. E*. 2003. V. 68. 041913.
12. A.S. Karavaev et al. // *Chaos*. 2009. V. 19. 033112.
13. A.R. Kiselev et al. // *Annals of Noninvasive Electrocardiology*. 2012. V. 17. P. 204.
14. M.D. Prokhorov et al. // *Physica D*. 2005. V. 203. No. 3. P.209.
15. Y.-C. Tian, F. Gao // *Physica D*. 1997. V. 108. P. 113.
16. M.J. Bünner et al. // *Phys. Rev. E*. 1997, V. 56, P. 5083.
17. M.J. Bünner et al. // *Phys. Rev. E*. 1996. V. 54. P. 3082.

## Исследование распределения тяжелых ядер в организме лабораторных животных с применением мультиядерной МРТ визуализации

А.В. Косенков, М.В. Гуляев, Н.В. Анисимов, В.И. Лобышев, Ю.А. Пирогов

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

[av.kosenkov@physics.msu.ru](mailto:av.kosenkov@physics.msu.ru)

С момента открытия эффекта ядерного магнитного резонанса (ЯМР) перед исследователями все чаще встает вопрос о возможности исследования воздействия разнообразных веществ биологической или синтетической природы на живой организм, особенно, когда речь идет о патологических тканях [1]. Так, например, были открыты парамагнитные вещества, введение которых в живой организм значительно улучшает визуализацию различного типа опухолей на изображениях, полученных с помощью магнитно-резонансной томографии (МРТ) [2]. Влияние же тяжелых ядер на живой организм не до конца изучено [3]. В данном исследовании рассматривается распределение ядер дейтерия ( $^2\text{D}$ ) и фтора ( $^{19}\text{F}$ ) в организме лабораторных животных с помощью мультиядерной МРТ.

В литературе показано, что тяжелая вода  $2\text{H}_2\text{O}$  ( $\text{D}_2\text{O}$ ) оказывает ингибирующий эффект на процессы деления и роста живых клеток, причем наибольший эффект наблюдается на быстро делящихся клетках, в том числе опухолевой природы: лимфосаркомы и карциномы у мышей замедляют свое развитие при повышении концентрации  $\text{D}_2\text{O}$  в организме [4]. Также показаны положительные результаты совместного применения тяжелой воды с химио- и лучевой терапией [5]. Кроме того, тяжелая вода как действующее вещество хороша тем, что, вследствие естественного водообмена, она легко выводится из организма в отличие от многих фармакологических препаратов [6]. Известно также, что перфторуглероды (ПФУ) локализуются в живом организме преимущественно в печени и селезенке, а также в зонах воспаления (например, в опухолевых тканях) [7], они способны растворять очень большие объемы газов, совершенно инертны, не токсичны, а будучи введенными в живой организм выводятся в основном с выдыхаемым воздухом [8]. Таким образом, исследуемые вещества  $\text{D}_2\text{O}$  и ПФУ оказываются полезными при исследовании развития патологических процессов в живом организме.

В настоящей работе показано, что наблюдать за распределением тяжелых ядер внутри живого организма можно с помощью мультиядерной МРТ. Обычно томографы (медицинские томографы тотально) настроены на прием ЯМР-сигналов только от протонов. Чтобы получать ЯМР-отклики от других ядер, необходимо перестроить приемно-передающий тракт томографа на нужные ларморовы частоты. Такая возможность имеется на биоспектротомографе BioSpec 70/30 USR фирмы Bruker с постоянным магнитным полем 7 Тл, предназначенном для исследования лабораторных животных. Помимо наличия широкого канала пропускаемых частот, необходимо иметь еще специализированные катушки, которые могут настраиваться на определенные резонансные ларморовы частоты. Так, в магнитном поле 7 Тл ларморова частота ядер дейтерия составляет 46,17 МГц, ядер фтора 283,01 МГц, ядер водорода (протонов) 300,80 МГц.



Рис. 1. Приемно-передающие катушки для ядер дейтерия (А) и для ядер фтора (В).

Для реализации поставленной задачи была сконструирована поверхностная приемо-передающая катушка, способная принимать ЯМР-сигналы от ядер дейтерия (Рис.1А), а также модифицирована протонная приемо-передающая катушка, настраиваемая на частоту фтора (Рис.1В).

Поверхностная приемо-передающая катушка на частоте дейтерия изготовлена в виде кольцевой рамки, содержащей 6 витков диаметром 2 см. В экранированном корпусе размещены подстроечные конденсаторы, необходимые для настройки колебательного контура в резонанс на частоте 46,17 МГц и его согласования с выходным сопротивлением передатчика (50 Ом). Для регистрации 2D-ЯМР-спектров применялась импульсная последовательность, в которой используется один возбуждающий  $90^\circ$ -ый радиочастотный импульс. Для получения спектров высокого разрешения использовались 64 накопления. Время получения одного 2D-ЯМР-спектра составило 1 минуту.

Глубина считывания 2D-ЯМР-сигнала для данной катушки составляет около 1,5 см. Поэтому, чтобы снизить зависимость чувствительности датчика от расстояния от плоскости витков, сканирование проводилось дважды – сначала катушка располагалась снизу, а затем сверху от животного. В качестве лабораторных животных использовались крысы Wistar весом 200-250 грамм. Животных содержали в специальном помещении со свободным доступом к воде и пище, 12-ти часовым циклом день/ночь, с регулируемой температурой и влажностью.

Кроме того, для получения общей картины распределения ядер дейтерия внутри всего тела животного необходимо было разделить мысленно объект исследования на несколько отделов: головной мозг, верхнегрудной, нижнегрудной, поясничный, крестцовый (Рис.2С). Таким образом, соседние зоны были разнесены на расстояние, соответствующее зоне чувствительности данной катушки – 2 см. В итоге получены 2D-ЯМР-спектры путем подсчета среднеарифметической суммы для каждого участка тела крыс при естественном содержании дейтерия в организме (Рис.2А) и после двухнедельного употребления 1%-ого раствора  $D_2O$  (Рис.2В). Следует отметить, что интенсивность 2D-ЯМР-спектров после двухнедельного потребления 1%-го раствора  $D_2O$  в различных отделах тела крысы в 7 раз превышает интенсивность 2D-ЯМР-спектров при естественном содержании дейтерия: для наглядности на Рис.2А и Рис.2В полученные 2D-ЯМР-спектры выравнены по интенсивности.

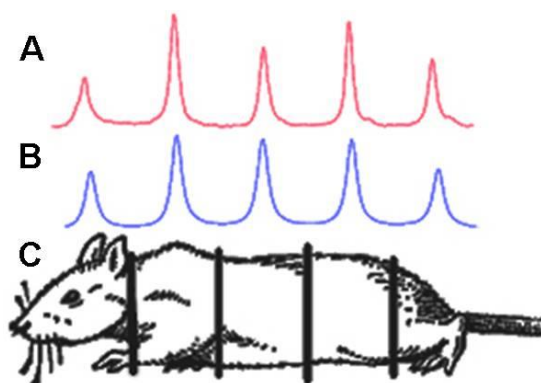


Рис. 2. А: 2D-ЯМР-спектры с естественным содержанием дейтерия в различных отделах тела крысы; В: 2D-ЯМР-спектры после 2-недельного потребления 1%-го раствора  $D_2O$  в различных отделах тела крысы; С: Макет крысы, тело которой условно поделено на отделы.

Анализ полученных 2D-ЯМР-спектров от различных отделов тела крыс показывает, что у тех крыс, которые пили тяжелую воду, ядра дейтерия распределяются в основном в одинаковой концентрации в верхнегрудном,

нижнегрудном и поясничном отделах крысы, то есть главным образом в области органов жизнеобеспечения, в отличие от крыс с естественным содержанием дейтерия, где в области нижнегрудного отдела наблюдался не такой интенсивный 2D-ЯМР-сигнал (область печени, селезенки).

Определенный интерес представляет анализ возможности перераспределения  $^1\text{H}$ -ЯМР-сигналов для разных тканей организма крыс, которые пили тяжелую воду (1% раствор  $\text{D}_2\text{O}$ ) по сравнению с крысами, которые пили обычную проточную воду. Сопоставив 2D-ЯМР-спектры с протонными спектрами в тех же зонах считывания ЯМР-сигналов, можно оценить вариабельность их распределения для различных органов (тканей) крыс. По предварительным данным можно сделать вывод, что картина распределения  $^1\text{H}$ -ЯМР-сигналов в живом организме не отличается для крыс, которые пили проточную или тяжелую воду.

Помимо 2D-ЯМР-спектров представляется возможным получать 2D-MPT-изображения ввиду довольно высокой интенсивности спектральных линий у крыс, которые пили 1%-ый раствор  $\text{D}_2\text{O}$ . На Рис.3А показано 2D-MPT-изображение верхнегрудного отдела тела крысы. Такое изображение получено с помощью импульсной последовательности FLASH, в которой используется один возбуждающий радиочастотный импульс. Время получения 2D-MPT-изображения составило 10 минут. На Рис.3В представлено протонное MPT-изображение этой же области тела крысы. Как видно из данных рисунков, с помощью сопоставления 2D-MPT-изображений и  $^1\text{H}$ -MPT-изображений можно определить точечную локализацию ядер дейтерия внутри тела крысы. Это позволит ответить на вопрос, где именно локализируются ядра дейтерия. Особенно перспективным такой метод может оказаться при исследовании животных с различными воспалениями или опухолями.

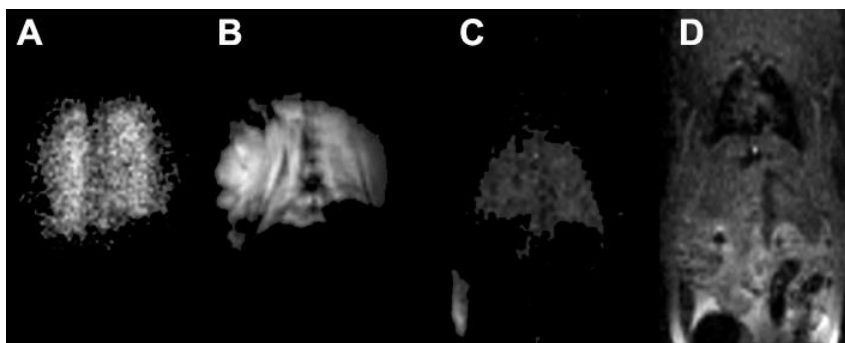


Рис. 3. А: 2D-MPT-изображение верхнегрудного отдела крысы после 2-недельного употребления 1%-го раствора  $\text{D}_2\text{O}$ ; В:  $^1\text{H}$ -MPT-изображение верхнегрудного отдела этой же крысы; С:  $^{19}\text{F}$ -MPT-изображение всего тела крысы с введенным препаратом Перфторан®; D:  $^1\text{H}$ -MPT-изображение всего тела этой же крысы.

Было исследовано также распределение ПФУ в организме крыс после их внутривенного введения в яремную вену. В качестве ПФУ использовался препарат Перфторан® [9]. Для регистрации  $^{19}\text{F}$ -ЯМР-сигналов применялась приемопередающая катушка, предназначенная для регистрации ЯМР-сигналов протонов, однако в данной катушке была модернизирована электрическая схема, в результате резонансная частота катушки была настроена на ларморову частоту ядер фтора.

Полученные  $^{19}\text{F}$ -ЯМР-спектры свидетельствуют о том, что препарат Перфторан® в течение первых нескольких часов после его введения равномерно распределяется по всему организму тела крысы, однако затем, спустя сутки после его введения он преимущественно сосредотачивается в печени и селезенке (как и было показано в литературе ранее). Данный факт позволяет получать  $^{19}\text{F}$ -MPT-изображения (Рис 3С).

Ввиду довольно широкого и сложного  $^{19}\text{F}$ -ЯМР-спектра  $^{19}\text{F}$ -МРТ-изображения были получены с помощью импульсной последовательности MSME, в которой используется два радиочастотных импульса ( $90^\circ$ -ый возбуждающий и  $180^\circ$ -ый инвертирующий импульс) [10]. Время получения  $^{19}\text{F}$ -МРТ-изображения составило 15 минут. На Рис.3D представлено протонное МРТ-изображение этой же области тела крысы. Таким образом, сопоставляя  $^{19}\text{F}$ -МРТ-изображения и  $^1\text{H}$ -МРТ-изображения от одной и той же области исследования можно судить о распределении ядер фтора внутри живого организма.

**Выводы.** Получено распределение ядер дейтерия по различным отделам тела крыс (головной мозг, верхнегрудной, нижнегрудной, поясничный, крестцовый). Данное распределение фиксировалось с помощью 2D-ЯМР-спектров, а также с помощью 2D-МРТ-изображений различных отделов тела крыс, которые пили 1%-ый раствор  $\text{D}_2\text{O}$ . В результате анализа полученных спектров можно заключить, что в естественных концентрациях распределение дейтерия в тканях крысы коррелирует с распределением водорода. Также показано нарушение корреляции при искусственном повышении концентрации дейтерия путем 2-недельного приема 1%-го раствора  $\text{D}_2\text{O}$ , а именно, концентрация ядер дейтерия выравнивается в органах жизнеобеспечения. Кроме того, исследовалось распределение ядер фтора, содержащихся в препарате Перфторан®. С помощью  $^{19}\text{F}$ -МРТ-изображений показано, что спустя сутки данный препарат целиком попадает в печень и селезенку.

Таким образом, показано, что с помощью мультиядерной МРТ визуализации можно следить за распространением тяжелых ядер внутри живого организма. Данный метод является неинвазивным, безопасным и не требующим много времени.

Работа выполнена при поддержке гранта Минобрнауки РФ № 14.604.21.0060 (RFMEFI60414X0060).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. G.P. Yan, L. Robinson, P. Hogg // Radiography. 2007. V. 13. No 1. P. e5-e19.
2. W. Xu et al. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2012. V. 14. No 37. P. 12687-12700.
3. J. Thomson // Ann. N. Y. Acad. Sci. 1960. V. 84. No 16. P. 736-744.
4. H.G. Barbour, E. Allen // Amer. J. Cancer. 1938. V. 32. No 3. P. 440-446.
5. M.W. Biggs, J.E. Eiselein, G. Wilcox // Cancer Res. 1963. V. 23. No 7. P. 1059-1062.
6. В.И. Лобышев, Л.П. Калиниченко // «Изотопные эффекты  $\text{D}_2\text{O}$  в биологических системах». М.: Наука, 1978.
7. R.P. Mason et al. // Magn. Reson. Imag. 1989. V. 7. No 5. P. 475-485.
8. U. Gross, S. Rüdiger, H. Reichelt // J. Fluor. Chem. 1991. V. 53. No 2. P.155-161.
9. Г.Р. Иваницкий, С.И. Воробьев // Вестник РАН. 1997. V. 67. No 11. P. 998-1013.
10. М.В. Гуляев и др. // Журнал радиоэлектроники: электронный журнал. 2013. No 8. URL: <http://jre.cplire.ru/jre/aug8/text.pdf>.

## СВЧ фотопроводимость двусторонних кремниевых солнечных элементов $p^+ - n - n^+$ типа при освещении лазером

О.Г. Кошелев<sup>1</sup>, Г.Г. Унтила<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Физический факультет Московского государственного университета

<sup>2</sup> Научно-исследовательский институт ядерной физики Московского государственного университета  
[scon282@phys.msu.ru](mailto:scon282@phys.msu.ru)

Одним из основных параметров, определяющих эффективность солнечных элементов (СЭ) из монокристаллического кремния с  $p-n$  переходами, является время жизни  $\tau_0$  неравновесных носителей заряда (ННЗ) в базовой области. Для определения  $\tau_0$  исходных пластин кремния широко используют методы, основанные на измерении спада СВЧ фотопроводимости при импульсном освещении [1]. В этом случае сканирование поверхности лучом лазера позволяет определять распределение  $\tau_0$  по площади этих пластин. Для определения  $\tau_0$  в базе готовых СЭ обычно используют методы, основанные на измерении тока короткого замыкания в зависимости от длины волны света [2]. Эти методы основаны на предположении, что разделение неравновесных электронов и дырок происходит только на  $p-n$  переходе (на лицевой стороне СЭ). Однако в случае увеличения удельного сопротивления базы такое разделение происходит также и на тыльной стороне СЭ. Согласно измерениям [3], в режиме холостого хода фотоэдс на  $p-p^+$  переходе возрастает от 10 до 90 мВ с увеличением удельного сопротивления кремния от 10 до 100 Ом·см. Поэтому представляет интерес измерение  $\tau_0$  в базе СЭ другими методами, в частности, основанными на измерении СВЧ фотопроводимости. Однако при локальном освещении неосвещаемая часть СЭ шунтирует освещённую часть вследствие токов по  $p^+$  и  $n^+$  слоям и нанесённым на них сеткам металлических контактов. В результате исчезновение ННЗ в освещаемой части базовой области происходит не только за счёт рекомбинации, но и благодаря току через  $p-n$  переход. Очевидно, что это должно привести к снижению времени релаксации СВЧ фотопроводимости относительно  $\tau_0$ .

Цель настоящей работы – оценить, насколько время релаксации СВЧ фотопроводимости освещаемой области СЭ вследствие её шунтирования неосвещаемой частью СЭ может отличаться от времени рекомбинации ННЗ базовой области.

Измерения проводились на СЭ со структурой  $(p^+nn^+)Si$ , изготовленных из пластин монокристаллического кремния  $n$ -типа с удельным сопротивлением 6 Ом·см, толщиной 0.4 мм. Другие их параметры и технология изготовления контактов подробно описаны в [4]. Освещение СЭ производилось либо немодулированным светом от лампы накаливания, либо светом от лазера с длиной волны 0.98 мкм, модулированным на частоте  $f$ . При этом интенсивность  $W$  падающего на СЭ света менялась со временем  $t$  по закону  $W = W_0[1 + m \cdot \sin(\omega t)]$ , где  $\omega = 2\pi f$ ,  $m$  – глубина модуляции. Освещение лучом лазера производилось через отверстие в стенке волновода. Диаметр пятна света на СЭ составлял около 3 мм. Измерения СВЧ фотопроводимости проводились по модуляции СВЧ волны, отраженной от СЭ. Время релаксации СВЧ фотопроводимости определялось по сдвигу фазы сигнала с СВЧ детектора относительно фазы модуляции света.

На рис.1 показана измеренная зависимость напряжения  $V$  на СЭ (при отсутствии внешней нагрузки) от площади  $\sigma$ , освещаемой лампой накаливания. Общая площадь СЭ  $\sigma_0 = 6.1 \text{ см}^2$ , а напряжение холостого хода  $V_{oc} = 0.5 \text{ В}$ . Как видно, с уменьшением освещаемой площади на 3 порядка напряжение на  $p-n$  переходе снижается примерно в 3 раза по сравнению с  $V_{oc}$ .



Для определения усредненного по толщине базы времени релаксации фотопроводимости  $\tau_{av}$  предварительно вычислялась зависимость концентрации ННЗ  $\bar{p}$

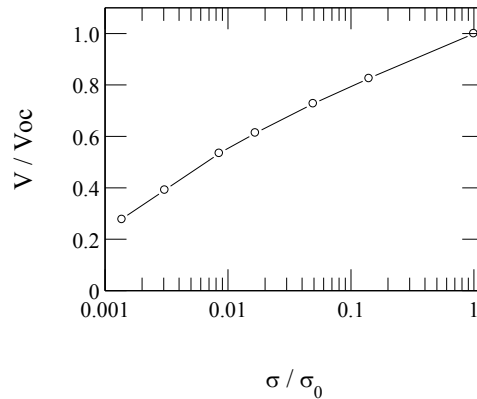


Рис.1. Зависимость напряжения  $V$  на СЭ от освещаемой площади  $\sigma$  (в относительных единицах).

(в комплексной форме) от расстояния  $x$  до р-п перехода. Рассмотрение велось для одномерного случая при концентрации ННЗ много меньшей концентрации основных носителей заряда на основании уравнения

$$-D \frac{d^2 \bar{p}(x)}{dx^2} + \frac{\bar{p}(x)}{\tau} = G_0 \exp(-\alpha x) \quad (1)$$

Здесь  $D$  - коэффициент диффузии дырок,  $G_0$  - скорость генерации ННЗ в базе на р-п переходе при  $x=0$ ,

$$1/\bar{\tau} = 1/\tau_0 + i\omega \quad (2)$$

$\alpha$  - коэффициент поглощения света. Расчёты проводились при различных значениях  $\bar{p}(0)$  и граничном условии  $-Dd\bar{p}/dx = S_b \bar{p}$  на тыльной стороне базы при  $x=d$ ,  $S_b$  - скорость поверхностной рекомбинации. Напряжение  $V$ , возникающее на р-п переходе освещаемой части СЭ, вычислялось из соотношения [5]

$$V = \frac{\kappa T}{e} \ln \left[ \frac{L(j - j_{sc})}{BDp_0} + 1 \right] \quad (3)$$

где  $k$  - постоянная Больцмана,  $T$  - температура,  $e$  - заряд электрона,  $L$  - диффузионная длина ННЗ в базе,  $j$  и  $j_{sc}$  - плотности потоков ННЗ (дырок) при данном напряжении  $V$  и  $V=0$  (в режиме тока короткого замыкания) соответственно,  $p_0$  - равновесная концентрация ННЗ в базе,

$$B = \frac{sh(d/L) + (S_b L/D)ch(d/L)}{(S_b L/D)sh(d/L) + ch(d/L)} \quad (4)$$

Усреднённое по толщине базы время релаксации СВЧ фотопроводимости  $\tau_{av}$  определялось из соотношения

$$\tau_{av} = \int_0^d p(x)\tau(x)dx \Big/ \int_0^d p(x)dx \quad (5)$$

где  $p(x) = |\bar{p}(x)|$ ,  $\tau(x) = -\omega^{-1} \text{Im}[\bar{p}(x)]/\text{Re}[\bar{p}(x)]$ . Расчёты проводились при различных значениях  $\tau_0$ ,  $S_b$  и  $\alpha$ .

На рис.2 приведены зависимости  $\tau_{av}$  от напряжения на p-n переходе,

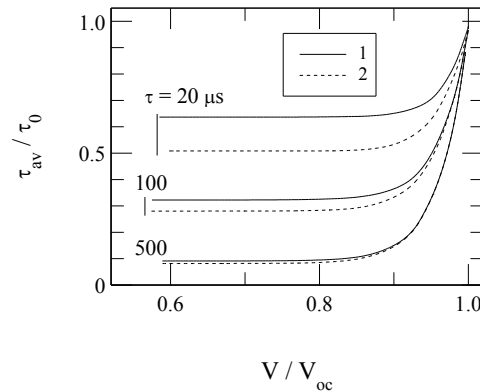


Рис. 2. Зависимости времени релаксации СВЧ фотопроводимости  $\tau_{av}$ , усредненного по толщине базы, от напряжения  $V$  (в относительных единицах) при  $\tau_0 = 20, 100, 500$  мкс,  $\alpha = 100$  (1),  $780$  (2)  $\text{см}^{-1}$ .

вычисленные при  $\alpha = 100 \text{ см}^{-1}$  (сплошные кривые) и  $780 \text{ см}^{-1}$  (штриховые кривые),  $\tau_0 = 20, 100$  и  $500$  мкс для  $d = 0.4$  мм и  $S_b = 0$ . Крайние правые точки всех кривых соответствуют  $V = V_{oc}$  и освещению всей площади СЭ ( $6.1 \text{ см}^2$ ). Как видно из рисунка, с увеличением  $\tau_0$  шунтирующее влияние неосвещённой части СЭ значительно возрастает. Наибольшее снижение наблюдается при уменьшении напряжения на p-n переходе от  $V_{oc}$  до  $0.9 \cdot V_{oc}$ . Значения  $\tau_{av}$  практически не зависят от  $V$  при  $V / V_{oc} < 0.8$ . Согласно рис.1, это соответствует освещаемой площади менее 8% от всей площади p-n перехода. При этом для освещённой части СЭ фактически достигается режим тока короткого замыкания. Из рис.2 видно также, что с ростом  $\tau_0$  зависимость  $\tau_{av}$  от  $\alpha$  также существенно снижается. В этом случае распределение ННЗ по толщине базы становится зависящим от их диффузионной длины, а не от  $\alpha$ .

Расчёты показали, что зависимость  $\tau_{av}$  от  $V$  несколько ослабевает с ростом  $S_b$ . Например, в случае  $S_b = 1000 \text{ см}^2/\text{с}$  при  $\tau_0 = 500$  мкс отношение  $\tau_{av}/\tau_0$  уменьшается примерно в 4 раза (от 0.16 до 0.04) со снижением  $V/V_{oc}$  от 1 до 0.8.

На исследованных в настоящей работе СЭ время релаксации СВЧ фотопроводимости составляло около 150 мкс. Согласно же [4], для СЭ с аналогичными параметрами спад внешней квантовой эффективности наполовину в области длинноволновой границы наблюдался на длине волны около 1.1 мкм, что соответствует значению  $\tau_0$  свыше 1000 мкс. Такое различие согласуется с результатами расчётов, представленных на рис.2.

## ЛИТЕРАТУРА

1. J. Schmidt and A.G. Aberle. // J. Appl. Phys. 1997. V.81 № 9. P. 6186.
2. J.H. Reynolds and A. Meulenbergh Jr. // Jour. Appl. Phys. 1974. V.45. № 6. P.2582.
3. J. Mandelkorn, J.H. Lamneck. // 11th IEEE Photovoltaics. Specialists Conf., Arizona, May 6-8, 1975. NASA-TM-X-71723. (РЖЭ 1976, 9Ф44).
4. G.G. Untila, T.N. Kost, A.B. Chebotareva, et al. Sol.Energy. 2014. V. 106. P. 88.
5. А.М. Васильев, А.П. Ландсман. «Полупроводниковые фотопреобразователи» М.: Советское радио, 1971.

## Проблемы нелинейной акустической томографии третьего порядка на основе кодированных волн

Р.В. Крюков, О.Д. Румянцева, П.А. Иванова

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет, кафедра акустики

[burov@phys.msu.ru](mailto:burov@phys.msu.ru)

Развитие принципов нелинейной акустической томографии третьего порядка является важной задачей, поскольку конечным результатом томографического исследования является пространственное распределение как акустического нелинейного параметра второго порядка  $\varepsilon_2$  (пропорционального второй производной давления по плотности), так и новой для медицинской диагностики величины – акустического нелинейного параметра третьего порядка  $\varepsilon_3$  (пропорционального третьей производной давления по плотности). В то же время, существуют исследования, свидетельствующие, что относительное изменение значений нелинейных параметров в патологически измененной ткани, по сравнению со здоровой, существенно превышает одновременное изменение ее линейных характеристик [1].

Акустическое давление третьего порядка малости  $p^{(III)} = p^{(3)} + p^{(2 \times 2)}$  образуется за счет двух конкурирующих процессов: взаимодействия “чисто” третьего порядка (порождает поле  $p^{(3)}$ ) и двукратного взаимодействия второго порядка (порождает поле  $p^{(2 \times 2)}$ ). При взаимодействии в среде трех волн, эти процессы ответственны за образование третьих гармоник и волн на комбинационных частотах. Тем самым, изучение эффектов третьего порядка предлагалось с помощью коллинеарных томографических схем [2] (на основе измерения третьей гармоники) и схем с неколлинеарным взаимодействием [3] (на основе сигналов на комбинационных частотах). Например, в работе [2] полный сигнал подразделяется на две составляющих, одна из которых изменяется с расстоянием линейно (эта составляющая формируется за счет  $p^{(3)}$  и частично за счет  $p^{(2 \times 2)}$ ), а другая квадратично (формируется только за счет  $p^{(2 \times 2)}$ ). В [2] делаются выводы, что амплитуда составляющей акустического давления, линейно изменяющейся с расстоянием, и, тем самым, амплитуда сигнала  $p^{(3)}$ , зависит только от величины нелинейного параметра третьего порядка  $\varepsilon_3$  и не зависит от нелинейного параметра второго порядка  $\varepsilon_2$ . Разделить вклады от составляющих, линейно и квадратично изменяющихся с расстоянием, и тем самым найти  $\varepsilon_3$  в коллинеарной схеме, согласно [2], считается возможным. Однако в [4] показано, что в томографических схемах, основанных на коллинеарном взаимодействии волн, мешающий сигнал за счет двукратного взаимодействия второго порядка  $p^{(2 \times 2)}$  уже на очень малых волновых расстояниях значительно превосходит полезный (информативный) сигнал  $p^{(3)}$ , несущий информацию о  $\varepsilon_3$ . Тем самым, в [4] проиллюстрировано, что использование нелинейных эффектов третьего порядка в диагностических целях возможно только в схемах томографии, построенных на неколлинеарном взаимодействии волн.

В работе [3] рассматривается прототип томографической системы, предназначенный для восстановления изображения исследуемого объекта в виде пространственных распределений акустических нелинейных параметров  $\varepsilon_2$  и  $\varepsilon_3$  на основе эффекта нелинейного неколлинеарного взаимодействия трех первичных волн.

Показано, что применение двух кодированных и одного монохроматического первичных сигналов с последующей корреляционной обработкой регистрируемого сигнала на комбинационных частотах позволяет восстановить полное изображение объекта в результате всего одного эксперимента. В эксперименте используется малое число преобразователей – три излучателя и один приемник. Для формирования сигнала сравнения  $p_8(t)$ , необходимого для корреляционной обработки, в [3] кодируются только два из трёх первичных сигнала  $p_1(t)$  и  $p_2(t)$ . Они достигают пробный рассеиватель с малыми волновыми размерами и центром в точке  $\mathbf{r}$  с некоторыми временными задержками  $\tau_1$  и  $\tau_2$ , соответственно. Рассеянный сигнал, порождаемый в результате нелинейного взаимодействия первичных плоских волн в точке  $\mathbf{r}$  и достигающий приемника после дополнительной задержки  $\tau_R$ , имеет структуру:

$$p_8(t) \sim p_1(t - \tau_1 - \tau_R) p_2(t - \tau_2 - \tau_R) = p_1(t - \tau_{\text{del}}) p_2(t - \tau_{\text{del}} + \Delta\tau_{12}). \quad (1)$$

Здесь  $\Delta\tau_{12} = \tau_1 - \tau_2$  – взаимный временной сдвиг между сигналами  $p_1$  и  $p_2$ ;  $\tau_{\text{del}} = \tau_1 + \tau_R$  – задержка момента приема сигнала сравнения относительно момента излучения первого сигнала  $p_1(t)$ . Временной параметр  $\Delta\tau_{12}$  будет одинаков для всех рассеивателей, принадлежащих так называемой линии одинакового кода, которая проходит через рассматриваемую точку  $\mathbf{r}$  и параллельна биссектрисе между направлениями излучения кодированных сигналов  $p_1(t)$  и  $p_2(t)$ . В то же время, параметр  $\tau_{\text{del}}$  будет различен для всех точек, принадлежащих фиксированной линии одинакового кода. Таким образом, две пространственные координаты двумерного рассеивателя, находящегося в точке  $\mathbf{r}$ , отображаются в два характерных временных параметра сигнала: код, определяемый  $\Delta\tau_{12}$ , и время прихода на приемник, определяемое  $\tau_{\text{del}}$ . Эти рассуждения справедливы для взаимодействия чисто третьего порядка, при котором три первичных волны взаимодействуют одновременно в одной и той же точке, порождая сигнал  $p^{(3)}$ . Однако в процессе томографирования с помощью двух кодированных и одной монохроматической первичных волн возникает следующая проблема, связанная с комбинационным сигналом  $p^{(2 \times 2)}$ , который формируется в результате двукратного взаимодействия второго порядка. Взаимодействие такого типа является по своей природе нелокальным, т.е. первый и второй акты взаимодействия второго порядка происходят в разных точках области томографирования. При этом сигнал  $p^{(2 \times 2)}$  может иметь такой же код (соответствующий фиксированной задержке  $\Delta\tau_{12}$ ) и такой же момент прихода на приемник (соответствующий  $\tau_{\text{del}}$ ), что и сигнал  $p^{(3)}$ . Численным моделированием было показано, что областью взаимодействия одного из актов второго порядка является некоторая парабола.

Для сравнения амплитуд информативной и мешающей частей принимаемого сигнала в неколлинеарной томографической схеме было проведено численное моделирование нелинейного взаимодействия плоских монохроматических пучков. Учет того, что два из трех пучков должны быть в практических условиях кодированными, осуществлялся за счет рассмотрения указанных выше парабол в качестве областей взаимодействия при двукратном взаимодействии второго порядка. Первичные три монохроматических пучка имели частоты  $f_1^0 = f_2^0 = 1.6$  МГц,  $f_3^0 = 2.2$  МГц; пучки распространялись под углами  $(180^\circ + 33^\circ)$ ,  $(180^\circ - 104^\circ)$ ,  $(180^\circ - 19^\circ)$  к оси  $X$ . Интенсивность первичных полей составляла

$I_0 \cong 0.1 \text{ Вт/см}^2 = 1000 \text{ Вт/м}^2$ . Поле давления  $p_{+-}^{(III)}$  на суммарно-разностной комбинационной частоте  $f_{+-}^0 = f_1^0 + f_2^0 - f_3^0 = 1 \text{ МГц}$  регистрировалось на приемнике, расположенном под углом  $0^\circ$  к оси  $X$ . Амплитуды полей, возникающих в результате нелинейного неколлинеарного взаимодействия трех пучков в модельной биологической ткани, приведены на Рис. 1а; плотность среды  $\rho_0 = 1000 \text{ кг/м}^3$ , скорость звука в среде  $c_0 = 1500 \text{ м/с}$ , аппроксимация нелинейного параметра  $\varepsilon_3 \cong (\varepsilon_2 - 1)^2$ . Из Рис. 1а видно, что амплитуда мешающего сигнала  $|p_{+-}^{(2 \times 2)}|$  заметно превосходит информативную часть сигнала  $|p_{+-}^{(3)}|$ . Следовательно, в общем случае, для томографирования объектов метод восстановления с использованием двух кодированных и одной монохроматической первичных волн неперспективен, так как в данных схемах невозможно разделить сигналы, порождаемые двумя конкурирующими механизмами взаимодействия. Поскольку именно это разделение смогло бы позволить определить количественные значения нелинейных параметров, то от использования в качестве третьей волны монохроматического сигнала приходится отказаться в пользу кодированного.

Пусть все три первичные волны, зондирующие исследуемый объект, являются кодированными. Тогда сигнал сравнения на приемнике имеет структуру:  $p_\delta(t) \sim p_1(t - \tau_1 - \tau_R) p_2(t - \tau_2 - \tau_R) p_3(t - \tau_3 - \tau_R) = p_1(t - \tau_{\text{del}}) p_2(t - \tau_{\text{del}} + \Delta\tau_{12}) p_3(t - \tau_{\text{del}} + \Delta\tau_{13})$ . По сравнению со случаем двух кодированных волн (1), в данном случае каждый из двух временных параметров  $\Delta\tau_{12}$  и  $\Delta\tau_{13} = \tau_1 - \tau_3$  (взаимный временной сдвиг между сигналами  $p_1$  и  $p_3$ ) будет выделять свою линию одинакового кода. Пересечение двух линий одинакового кода однозначно определяет точку  $\mathbf{r}$  области рассеяния, из которой пришел данный сигнал сравнения  $p_\delta(t)$ . Код сигнала  $p_\delta(t)$ , порожденного в точке  $\mathbf{r}$ , зависит от кодов всех трех первичных сигналов. Такой код будет индивидуален для каждой точки  $\mathbf{r}$ . Тогда временной параметр  $\tau_{\text{del}}$  уже не является независимым, так как его значение однозначно диктуется точкой  $\mathbf{r}$ , определяемой из пересечения двух линий одинакового кода. В этом случае каждый пространственный элемент разрешения, характерный для данной томографической системы, будет обладать своим четко определенным значением кода. При этом мешающий сигнал с заданным кодом будет формироваться за счет нелинейного взаимодействия, которое происходит только в пределах данного элемента разрешения, т.е. становится, фактически, квазилокальным. Тем самым, в случае трех кодированных первичных волн, двукратное взаимодействие второго порядка, порождающее сигнал с индивидуальным для точки  $\mathbf{r}$  кодом, становится подобным взаимодействию чисто третьего порядка. Это обстоятельство позволяет рассматривать полный сигнал  $p^{(III)} = p^{(3)} + p^{(2 \times 2)}$  как информативный.

Численное моделирование взаимодействия трех монохроматических пучков в элементе разрешения показало (Рис. 1б), что в общем случае амплитуда сигнала  $|p_{+-}^{(3)}|$  может остаться соизмеримой с амплитудой сигнала  $|p_{+-}^{(2 \times 2)}|$ , как и в случае взаимодействия двух кодированных и одной монохроматической волн (Рис. 1а). Однако за счет того, что в случае трех первичных кодированных волн двукратное взаимодействие второго порядка становится квазилокальным, появляется возможность раздельного восстановления количественных значений нелинейных параметров второго  $\varepsilon_2(\mathbf{r})$  и третьего  $\varepsilon_3(\mathbf{r})$  порядков. В общем случае, оценка нелинейного параметра  $\hat{\varepsilon}^{III}(\mathbf{r})$ , полученная после корреляционной обработки принятого сигнала

$p^{(III)}$  с помощью сигнала сравнения  $p_\delta$ , представляет собой линейную комбинацию оценок параметров  $\hat{\varepsilon}_2(\mathbf{r})$  и  $\hat{\varepsilon}_3(\mathbf{r})$  с некоторыми скалярными  $M_1(\mathbf{r})$ ,  $M_2(\mathbf{r})$ ,  $M_3(\mathbf{r})$  и векторным  $\mathbf{M}_\nabla(\mathbf{r})$  коэффициентами, которые могут быть предварительно вычислены:

$$\hat{\varepsilon}^{III}(\mathbf{r}) = \hat{\varepsilon}'_3(\mathbf{r}) + M_1(\mathbf{r})(\hat{\varepsilon}_2(\mathbf{r}) - 1) + M_2(\mathbf{r})(\hat{\varepsilon}_2(\mathbf{r}) - 1)^2 + \mathbf{M}_\nabla(\mathbf{r})\nabla(\hat{\varepsilon}_2(\mathbf{r}) - 1) + M_3(\mathbf{r}), \quad (2)$$

где  $\varepsilon'_3(\mathbf{r}) \equiv 2(\varepsilon_2(\mathbf{r}) - 1)^2 - \varepsilon_3(\mathbf{r})$ . Если вначале пренебречь векторным неизвестным  $\nabla(\hat{\varepsilon}_2(\mathbf{r}) - 1)$ , то в уравнении (2) в каждой точке  $\mathbf{r}$  нужно оценить три неизвестных  $\hat{\varepsilon}'_3(\mathbf{r})$ ,  $(\hat{\varepsilon}_2(\mathbf{r}) - 1)$  и  $(\hat{\varepsilon}_2(\mathbf{r}) - 1)^2$  за счет трёх независимых соотношений типа (2), получающихся из трёх различных экспериментов. Оценку векторного неизвестного можно затем уточнять итерационно на основе найденных значений  $(\hat{\varepsilon}_2(\mathbf{r}) - 1)$ .

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №14-22-00042).

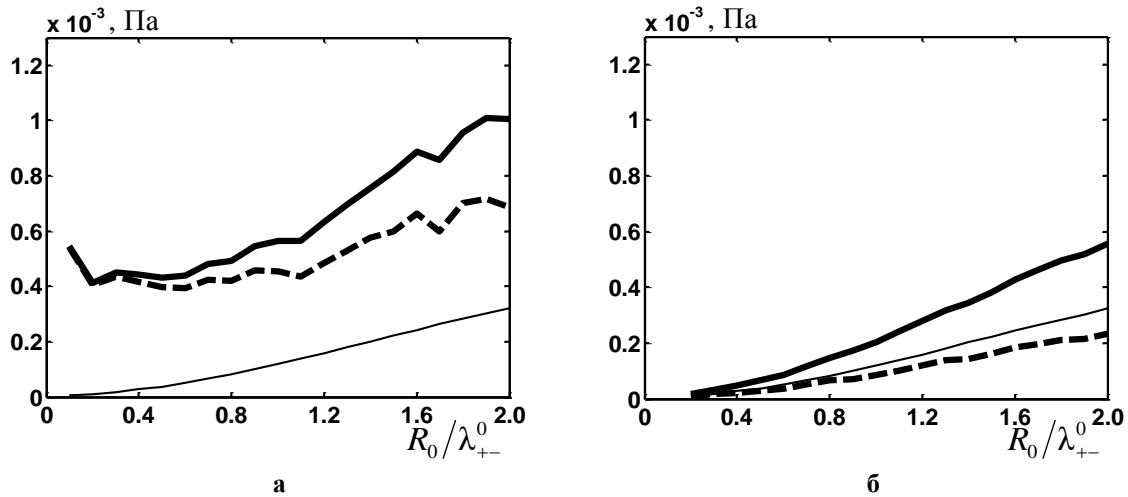


Рис. 1. Амплитуды давления на приемнике, порождаемого различными группами нелинейных вторичных источников в модельной биологической среде ( $\varepsilon_2 = 6$ ,  $\varepsilon_3 = 25$ ) в зависимости от радиуса  $R_0$  элемента разрешения, отнесенного к длине волны регистрируемого комбинационного сигнала  $\lambda_{+-}^0$ : общее поле от источников чисто третьего порядка ( $|p_{+-}^{(3)}|$ , тонкая сплошная линия —); поле от двукратного взаимодействия второго порядка ( $|p_{+-}^{(2 \times 2)}|$ , пунктир — — —); итоговое поле ( $|p_{+-}^{(III)}| \equiv |p_{+-}^{(3)} + p_{+-}^{(2 \times 2)}|$ , толстая сплошная линия —) в случае взаимодействия двух кодированных волн и одной монохроматической (а) и в случае трех кодированных волн (б).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. F.A. Duck «Physical Properties of Tissue» London: Academic Press, 1990.
2. X. Gong, X. Liu, D. Zhang // Proceedings of 18th ISNA, New York: American Institute of Physics, 2008. P. 444.
3. В.А. Буров, А.А. Шмелев, Д.И. Зотов // Акуст. журн. 2013. Т. 59. № 1. С. 31.
4. В.А. Буров и др. // Акуст. журн. 2012. Т. 58. № 1. С. 57.

## Исследование нанокомпозитов с квантовыми точками CdSe методом люминесцентной микроскопии с высоким пространственным разрешением

К.А. Магарян<sup>1</sup>, М.А. Михайлов<sup>1</sup>, К.Р. Каримуллин<sup>1,2,3</sup>, М.В. Князев<sup>2</sup>, И.Ю. Еремчев<sup>2</sup>,  
А.В. Наумов<sup>1,2</sup>, И.А. Васильева<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Московский педагогический государственный университет

<sup>2</sup>Институт спектроскопии Российской академии наук<sup>3</sup>

<sup>3</sup>Казанский физико-технический институт им. Е.К.Завойского

[xmagaros@gmail.com](mailto:xmagaros@gmail.com)

В работе исследованы квантовые точки селенида кадмия (CdSe), синтезированные в термоторопных жидкокристаллических матрицах октаноата кадмия (CdC<sub>8</sub>) до размеров 1,8 нм и 2,3 нм. В процессе синтеза жидкокристаллическая мезофаза была использована в качестве нанореактора квантовых точек. Данный метод позволяет создать наночастицы заданной формы, одинаковые по размеру и стабильные во времени [1].

Самоорганизация нанокристаллов в процессе синтеза достигается благодаря смектической структуре жидкокристаллической матрицы. Рост нанокристаллов осуществляется при высокой температуре (выше 100°C) внутри ионной термоторопной жидкокристаллической матрицы октаноата кадмия. При быстром понижении температуры до комнатной, происходит кристаллизация материала, образуется анизотропный стеклованный нанокомпозит с квантовыми точками. Были приготовлены два вида образцов толщиной несколько мкм различающихся размерами находящихся внутри матриц квантовыми точками CdSe: 1,8 нм и 2,3 нм. Концентрация квантовых точек составляет 4 мол. %. Разброс по размерам составляет 0,2 нм. [2].

В ходе исследования данных образцов при помощи конфокального люминесцентного микроскопа с дополнительной засветкой был обнаружен ряд люминесцентных свойств [3]. Данная техника позволила изучить зависимость спектров люминесценции от структурных особенностей образца благодаря дополнительной схеме визуализации исследуемого участка. Нами было установлено, что в объеме нанокомпозита присутствует ряд трещин и разнородных включений, находящихся как на поверхности, так и в толще стекловидной матрицы. Наличие данных неоднородностей приводит к резкому уменьшению интенсивностей линий соответствующих чисто межзонным переходам, и увеличению интенсивностей полос ответственных за рекомбинацию экситонов на дефектах кристаллической структуры [4].

Используя схему люминесцентного конфокального микроскопа с визуализацией, можно исследовать образцы с непосредственной привязкой к структуре. В нашем случае пучок возбуждающего излучения от твердотельного лазера был сфокусирован в пятно радиусом несколько десятков микрометров. Была возможность изучить участки образца без видимых дефектов, но излучающая область при этом оставалась достаточно большой. В пределах исследуемого участка могут находиться микроскопические образования, влияние которых негативно сказывается на сигнале излучения от нанокристаллов. Для более детального исследования была использована аналогичная конфокальная схема, но без визуализации участка образца. Поиск свободного от дефектов участка был осуществлен, путем сопоставления зарегистрированных спектров флуоресценции со спектрами, полученными ранее. Новая схема конфокального микроскопа характеризуется высоким отношением «сигнал к шуму» и позволяет исследовать образцы с максимальной эффективностью.

Пространственно-разрешенная микроскопия с микрометровым разрешением была реализована благодаря светосильному микрообъективу с коротким передним отрезком, позволяющим собирать излучение участка образца с большего телесного угла [5]. Установка оборудована прецизионной сканирующей платформой, способной смещать образец в плоскости двух координат с точностью 1 мкм.

После выбора исследуемого участка на образце было проведено сканирование области 150x150 мкм с шагом в два микрона по двум поперечным координатам. Таким образом, был зарегистрирован ряд спектров люминесценции от каждой точки просканированной области. Из этих данных были извлечены значения интегральных интенсивностей экситонных пиков и максимумов дефектной люминесценции.

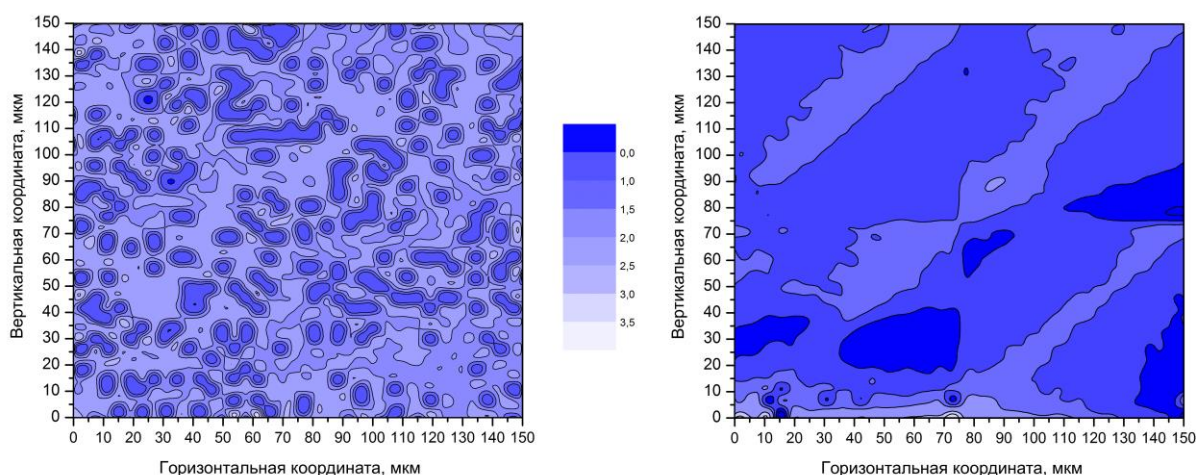


Рис. 1. Пространственно-разрешенные люминесцентные томограммы нанокompозитов с 2,3 нм (слева) и 1,8 нм (справа) CdSe квантовыми точками. На шкале указано значение относительной интенсивности (см. текст).

Полученные пространственно-разрешенные люминесцентные томограммы приведены на рисунке 1. Каждая точка томограммы отображает отношение интенсивности полосы отвечающей за рекомбинацию свободных экситонов к интенсивности полосы ответственной за локализацию экситонов на дефектах кристаллической структуры [6]. Как можно видеть, правая томограмма образца с квантовыми точками 1.8 нм характеризуется большей пространственной однородностью, хотя имеет четкие границы. Вероятнее всего появление этих границ связано с увеличением толщины образца и, как следствие, увеличением количества квантовых точек на единицу поверхности. Образец с квантовыми точками 2,3 нм (слева) проявляет более неоднородную структуру по всей сканируемой площади образца, наличие «островков» с более ярким отношением интенсивностей спектральных полос является свидетельством скопления большего количества квантовых точек по сравнению с остальной площадью образца. Поскольку синтез исследуемых образцов нанокompозитов проводился в жидкокристаллической фазе в одинаковых условиях, но при различных температурах, то можно сделать вывод о связи температуры синтеза, а, следовательно, размера квантовых точек с гомогенностью образца в целом.

Исследование нанокompозитов методом пространственно-разрешенной люминесцентной микроскопии дает возможность судить о распределении квантовых точек в жидкокристаллической матрице на стадии синтеза. Благодаря этому методу появляется возможность характеризовать приготовленные нанокompозиты, давая



оценку степени упорядочения нанокристаллов, и, как следствие, оценивать качество приготовленных образцов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ – проект № 15-32-21100-мол\_а\_вед (пространственно-спектральная томография нанокompозитов методом люминесцентной микроскопии) и грантом Президента РФ № МК-2328.2014.2 (исследование спектральных и фотофизических характеристик нанокompозитов на основе полупроводниковых квантовых точек). К.А. Магарян благодарит за поддержку Министерство образования и науки РФ – проект №14.В25.31.0007.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Т.А. Mirnaya et al. // *Physics and Chemistry of Solid State*. 2012. V. 13. № 1. P. 131.
2. A. Lyashchova et al. // *Liq. Cryst.* 2013. V. 40. No. 10. P. 1377.
3. К.А. Магарян и др. // *Ученые записки физического факультета МГУ*. 2014. Т. 4. С. 144318.
4. К.А. Магарян и др. // *Изв. РАН сер. физ.* 2014. Т. 78. № 12. С. 1629.
5. A.V. Naumov et al. // *Eur. Phys. J. D* 2014. V. 68. P. 348.
6. К.А. Magarian et al. // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2013. V. 478. P. 012007.

## Механизм самоорганизации в поверхностном микрослое воды с использованием термокапиллярной конвекции

М.Е. Мазуров<sup>1</sup>, В.А. Твердислов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Московский Государственный Университет Экономики, Статистики, Информатики

<sup>2</sup>Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова

[mazurov37@mail.ru](mailto:mazurov37@mail.ru), [tverdislov@mail.ru](mailto:tverdislov@mail.ru)

Приведены описания процесса образования спиральных макроструктур в поверхностном слое воды, основанные на результатах работ [1,4]. Впервые экспериментально установлено, что в тонком приповерхностном слое остывающей со свободной поверхности воды существует термокапиллярная конвекция Марангони, приводящая к самоорганизации в виде спиральных и диссипативных структур. Найдены наиболее вероятные кандидаты, осуществляющие движение в базовых экспериментах работ [1,4]. Такими кандидатами являются возникающие термокапиллярные ячейки. Приведен математический аппарат для моделирования динамики термокапиллярной диффузии в виде нелинейных уравнений типа Навье – Стокса и тепловой диффузии. В вычислительном эксперименте получены результаты, подтверждающие механизмы самоорганизации в поверхностном слое воды.

Процесс образования спиральных макроструктур в воде при ее конвекции является хорошей иллюстрацией механизма самоорганизации при переходах хаос - порядок, происходящих при появлении температурных градиентов. При этом молекулы воды под действием тепловых градиентов вместо случайного движения начинают демонстрировать коллективное направленное движение. Генерация спиральных структур на поверхности жидкости – воды экспериментально с помощью тепловизора обнаружена и исследована в работе [1]. С помощью тепловидения в ИК-диапазоне (8-12 мкм) наблюдались спиральные структуры при исследовании остывания воды в прямоугольном пластмассовом сосуде. Если в такой неподвижный сосуд налить воду, нагретую до 36,6° - 40°С, то в ней появляются спиральные структуры, показанные на рис. 1.

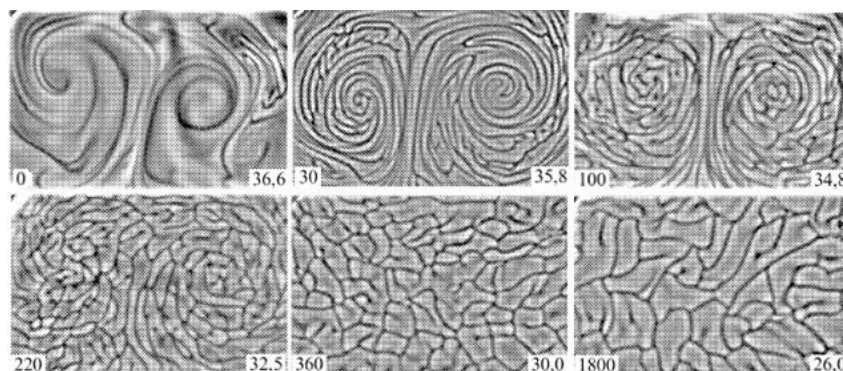


Рис. 1. Фильмограмма структур в ИК – диапазоне по данным работы [4].

По мере остывания воды спиральные структуры постепенно распадаются на отдельные ячейки, затем температура воды понижается до 29°С, структура воды становится ячеистой без спиральных образований. Известно, что вид структур зависит не только от физических свойств жидкости и места нагрева, но и от формы резервуара [1]. На рис. 2 приведена фильмограмма структур, возникающих в воде при ее остывании, но в отличие от случая, соответствующего рис. 1, вода наливается в круглый неподвижный сосуд диаметром 17 см. В круглом пластмассовом сосуде

спиральных макровихрей не наблюдается, но при тех же температурах имеют место многочисленные круговые микровихри-воронки — темные точки на рис. 2. По мере остывания воды микровихри-воронки постепенно исчезают, а вся структура распадается на отдельные ячейки неправильной формы. В остывшей воде и в прямоугольном, и в круглом резервуарах ячеистые структуры практически не отличаются друг от друга.

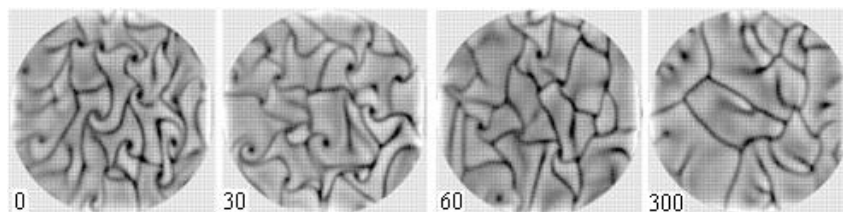


Рис 2. Ячеистые структуры при остывании воды [1].

Точную картину всех образующихся в жидкостях структур построить невозможно. Их разнообразие зависит не только от переходов между различными видами конвекции, но и от формы и глубины резервуара, материала его стенок (смачиваемые или не смачиваемые жидкостью), начальных условий возникновения конвекции и т.д. В реальных жидкостях встречаются не только ячейки и валы, но могут возникать протуберанцы и спиральные структуры [1-4].

Анализ данных тепловизионных исследований свидетельствует, что в приповерхностном слое воды практически с первой секунды с момента его охлаждения возникает упорядоченная система термокапиллярных ячеек в виде неправильных многоугольников с числом сторон от 4 до 8, как показано на рис. 3. [4].

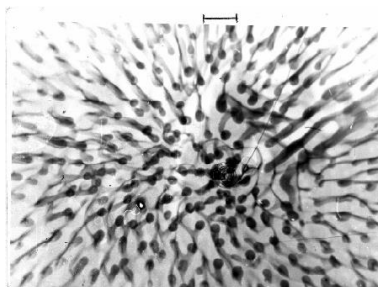


Рис. 3. Изображение термокапиллярных ячеек с помощью рН-индикатора [4].

Экспериментальные данные позволили установить, что конвекция в миллиметровом приповерхностном слое остывающей с открытой поверхности воды, является термокапиллярной конвекцией Марангони. Анализ приведенных экспериментальных методик позволил получить следующую картину возникновения термокапиллярных конвективных ячеек. С начала охлаждения водной поверхности на ней возникают пульсации температуры, наведенные из приводного слоя воздуха. Эти наведенные из приводного слоя воздуха пульсации температуры, интенсифицированные процессом испарения с водной поверхности, приводят к образованию на поверхности первоначально однородной по температуре воды участков с градиентом температуры. В результате за счет действия сил поверхностного натяжения возникает движение участков воды от более нагретых областей к менее нагретым. В результате области водной поверхности с относительно низкой температурой сжимаются, превращаясь в линии конвергенции, которые образуют периметр термокапиллярных ячеек. Следовательно, размеры термокапиллярных ячеек

задаются характерным линейным масштабом температурных неоднородностей на поверхности жидкости.

В этих опытах впервые экспериментально установлено, что в тонком (~1 мм) приповерхностном слое остывающей со свободной поверхности воды существует термокапиллярная конвекция Марангони.

#### Математические модели самоорганизации в поверхностном слое воды

Уравнение теплопроводности, учитывающее зависимость свойств среды от температуры и нелинейную зависимость от температуры мощности распределенных в объеме тепловых источников, является квазилинейным параболическим уравнением

$$\rho(u)c(u)\frac{\partial u}{\partial t} = \text{div}(k(u)\text{grad } u) + F(u, x, y, z, t)$$

Для математического исследования автоволновых процессов в активных средах в настоящее время принято рассматривать системы нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных параболического типа. Основное состояние такой системы в безразмерном виде удовлетворяют следующим уравнениям [2]

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_i}{\partial t} &= F_i(E_1, \dots, E_n) + D_i \Delta E_i \quad (i = 1, \dots, n) \\ \frac{\partial T}{\partial t} + v_i \frac{\partial T}{\partial x_i} &= \Delta T, \quad \frac{\partial E_i}{\partial x_j} = 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $E_i$  - переменные,  $F_i$  - нелинейные функции,  $D_i$  - коэффициенты диффузии,  $\Delta E_i = \frac{\partial^2 E_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_i}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_i}{\partial z^2}$ . Во многих исследованиях используется система из двух уравнений (1), где  $v$  - возмущение скорости,  $\theta$  - возмущение температуры,  $w$  - горизонтальная составляющая скорости возмущения температуры,  $\Delta$  - лапласиан. Вертикальным возмущением температуры, приводящим к конвекции Релея – Бенара, пренебрегаем. Полагаем в первом приближении, что имеет место только горизонтальная конвекция Марангони. В образовании самоорганизующихся структур на поверхности жидкости определенную роль играет поверхностное натяжение.

Для исследования нелинейных волн вихревого типа используется система из двух уравнений. В данной работе были использованы уравнения Фитцхью – Нагумо

$$\frac{\partial u}{\partial t} = C\varepsilon^{-1}\left(u - \frac{u^3}{3} - v\right) + \Delta u, \quad \frac{\partial v}{\partial t} = \varepsilon(u + \beta - \gamma v),$$

с параметрами  $\varepsilon = 0.03$ ,  $\beta = 0.7$ ,  $\gamma = 0.8$ . Эти уравнения, как известно, являются наиболее подходящими для концептуального исследования волн вихревого типа.

Можно использовать систему уравнений, основанную на уравнении Ван дер Поля:

$$\frac{\partial E_1}{\partial t} = E_2, \quad \frac{\partial E_2}{\partial t} = E_2(1 + \alpha_2 E_1 - \alpha_3 E_1^2) + b E_1,$$

где  $\alpha_2$ ,  $\alpha_3$ ,  $b$  - константы.

У воды от 0°C до +37 °C теплоемкость падает, а начиная с + 37° до +100°C возрастает. Таким образом, легче всего вода нагревается и быстрее всего охлаждается в своеобразной температурной "яме", дно которой соответствует интервалу 35-40°C, показанной на рис. 4.

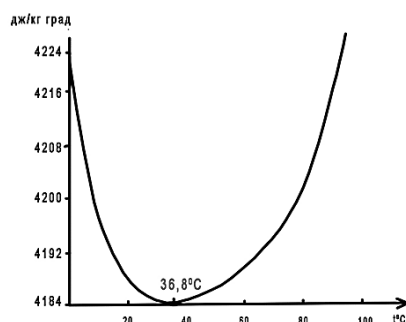


Рис 4. Изменение величины удельной теплоемкости воды в зависимости от температуры

Следует добавить и еще одно обстоятельство - наиболее интенсивно химические реакции обмена веществ идут также в интервале 35-40 °С. Получается будто природа, создавая человека, мудро снабдила его оптимальным, т. е. экономически наиболее выгодным режимом работы всего организма в целом.

Для исследования нелинейных волн вихревого типа используется система из двух уравнений. В данной работе были использованы уравнения Фитцхью – Нагумо. Результаты одного из вычислительных экспериментов показаны на рис. 5.

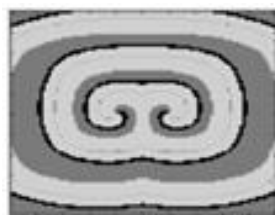


Рис. 5. Результаты вычислительного эксперимента по моделированию спиральных автоволн в поверхностном микрослое воды

Впервые экспериментально установлено, что в тонком приповерхностном слое остывающей со свободной поверхности воды существует термокапиллярная конвекция Марангони [1,4]. Найдены наиболее вероятные кандидаты на движение в базовых экспериментах, описанных в работах [1,4]. Такими кандидатами являются термокапиллярные ячейки, возникающие в результате конвекции Марангони. Дано обоснование математического аппарата для моделирования динамики термокапиллярной диффузии Марангони в виде нелинейных дифференциальных уравнений типа Навье – Стокса и тепловой диффузии. В вычислительном эксперименте получены результаты самоорганизации в поверхностном микрослое воды.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Г.Р. Иваницкий, А.А. Деев, Е.П. Хижняк // УФН. 2005. № 175 . С.1207–1216
2. А.В. Гетлинг // УФН, 1991, Т. 161, №9, С. 1-80
3. В.С. Дегтярев и др. // Наука – практика: Науч.-метод. сб. Донецк: ДонГТУ. 2001. № 6. С. 36-43
4. В.Б. Лапшин, Е.В. Караваяева, А.А. Будников //Вестник Московского университета. Сер. 3. Физика. Астрономия. 2000. № 6. С. 56-59

Работа поддержана грантом РФФИ 13-05-01174.

## Нелинейная динамика вогнутых спиральных автоволн, переносящих энергию и их приложения

М.Е. Мазуров, И.М. Калюжный

Московский Государственный Университет Экономики, Статистики Информатики  
[mazurov37@mail.ru](mailto:mazurov37@mail.ru)

В 2001 году в автоколебательных активных средах был открыт принципиально новый тип спиральных автоволн – антиспиральные волны [1-3]. Если обычные спиральные волны всегда распространяются от ядра спирали наружу, то в антиспиральных волнах движутся к центру. Установлено, что антиспираль-антиволны это фазовые волны, в то время как обычные спиральные волны это импульсные - триггерные волны [1,2]. Внешне антиспираль мало чем отличается от обычных спиралей. Но если взглянуть на их динамику, то отличие становится очевидным.

С другой стороны экспериментально было установлено, что существуют вогнутые спиральные автоволны триггерного типа, переносящие энергию. Было установлено также, что эти автоволны находят широкое применение в биологии, гидродинамике, физике, метеорологии, космологии. Они являются одним из существенных механизмов самоорганизации.

Экспериментально вогнутые фазовые автоволны, не переносящие энергию, впервые были обнаружены В.К. Ванагом в осциллирующих химических реакциях с диспергированными и обращенными микроэмульсиями в аэрозолях (АОТ) [1-3]. Первые работы по теоретическому исследованию вогнутых волн и их реализация в вычислительном эксперименте принадлежат О.А. Морневу, М.И. Цыганову, О.В. Асланиди, М.А. Цыганову [4,5]. О.А. Морневым и др. в численных экспериментах с системой уравнений Фитцхью – Нагумо, описывающей двумерные возбудимые среды, найдены решения, соответствующие вогнутой спиральной волне, стационарно вращающейся вокруг кругового препятствия. В вычислениях использовалась модифицированная система уравнений типа Фитцхью – Нагумо в двумерной возбудимой среде.

$$\frac{1}{R} \left( \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} \right) = C \frac{\partial V}{\partial t} + I_F(V) + I; \quad \frac{\partial I}{\partial t} = \frac{I_S(V) - I}{\tau(V)},$$

где  $V$ ,  $I$  - эволюционные переменные. При определенном задании параметров, входящих в уравнения, в двумерной возбудимой среде реализуется режим образования вогнутой спиральной автоволны. Автоволна показана в виде дублетной структуры слева на рис. 1, в центре – пространственный профиль дублета вдоль оси  $x$ .

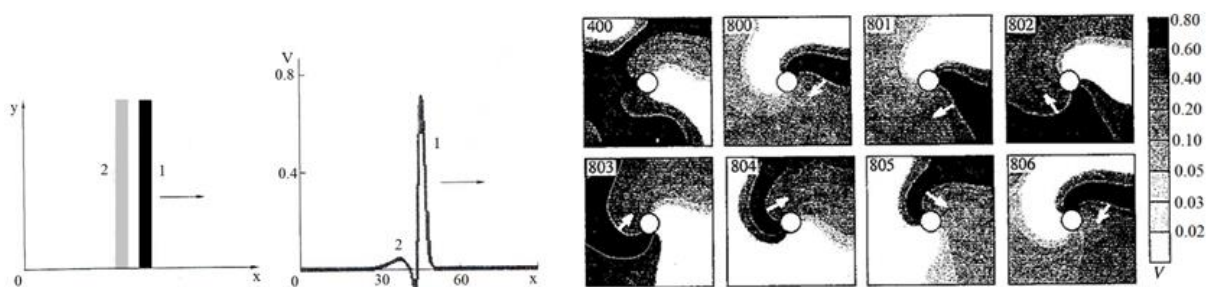


Рис. 1. Слева – дублетная структура плоской автоволны (1 – лидер, 2 – сателлит, автоволна движется слева направо); в центре – пространственный профиль дублета вдоль оси  $x$ ; Полученные в результате вычислительного эксперимента вогнутые волны – справа. Белыми стрелками на каждом слайде показано направление движение вогнутого фронта волны.

Наряду с однорукавной вогнутой спиральной волной получены решения, описывающие многорукавные волны этого типа, например вогнутые трехрукавные спиральные автоволны; поэтому вогнутость их фронтов является грубым свойством [4,5].

Для выяснения возможности переноса энергии фазовыми автоволнами в осциллирующих активных средах рассмотрим одномерные фазовые автоволны

$$u = A \cdot \sin(\omega(x + kt)) ; u = A \cdot \sin(\omega(x - kt)).$$

Согласно расчётам поток энергии  $W$  через любое сечение площадью  $S$  равен

$$W = \int_0^{2\pi/\omega} A^2 S \sin^2(\omega(t \pm kx)) dt = \frac{\pi}{\omega} A^2 S$$

Из полученных соотношений следует, что фазовые волны в осциллирующих средах не переносят энергии. Поэтому была поставлена задача моделирования вогнутых автоволн триггерного типа, переносящих энергию.

### Вогнутые автоволны триггерного типа, переносящие энергию

Для исследования вогнутых спиральных волн, переносящих энергию, была использована система из двух нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных. В данной работе были использованы уравнения Фитцхью – Нагумо

$$\frac{\partial u}{\partial t} = C\varepsilon^{-1} \left( u - \frac{u^3}{3} - v \right) + \Delta u, \quad \frac{\partial v}{\partial t} = \varepsilon(u + \beta - \gamma v),$$

где:  $\Delta u$  - оператор Лапласа; параметры  $\varepsilon = 0.03$ ,  $\beta = 0.7$ ,  $\gamma = 0.8$ . Эти уравнения, как известно, являются наиболее подходящими для концептуального исследования спиральных волн. Исходные данные для образования вогнутой автоволны в модели Фитцхью – Нагумо и сама вогнутая волна показаны на рис. 2 слева и в центре.



Рис.2. Исходные данные для образования вогнутой автоволны. На рисунке справа показаны начальные условия для образования выпуклой спиральной автоволны.

Скорость распространения автоволны в выделенных полосах убывает от периферии к центру, активная среда для генерации вогнутой спиральной волны должна быть неоднородной. Результаты вычислительного эксперимента по созданию вогнутой волны в кольцеобразной неоднородной активной среде иллюстрируется рис. 3.

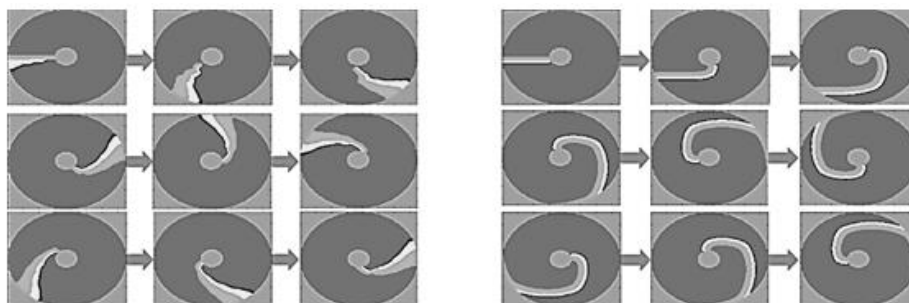


Рис. 3. Образование вогнутой автоволны в круговой области с помощью уравнения Фитцхью-Нагумо. На рис. слева показана вогнутая спиральная автоволна, справа – обычная выпуклая автоволна.

Существенным моментом для образования вогнутой автоволны в рассматриваемой среде является пространственная синхронизация автоволн, движущихся в отдельных кольцах. При отсутствии синхронизации вогнутая волна не образуется. В отличие от фазовых вогнутых волн в автоколебательной активной среде триггерные вогнутые спиральные волны являются переносчиками энергии от периферии к центру. Это позволяет реализовать значительное количество приложений вогнутых волн.

#### Вогнутые автоволны в биологии.

Рассмотрим примеры реализации вогнутых автоволн в биологии. У многих растений и животных имеются различные органы, служащие для хватания (усики растений, хобот слона, цепкие хвосты лазающих животных).

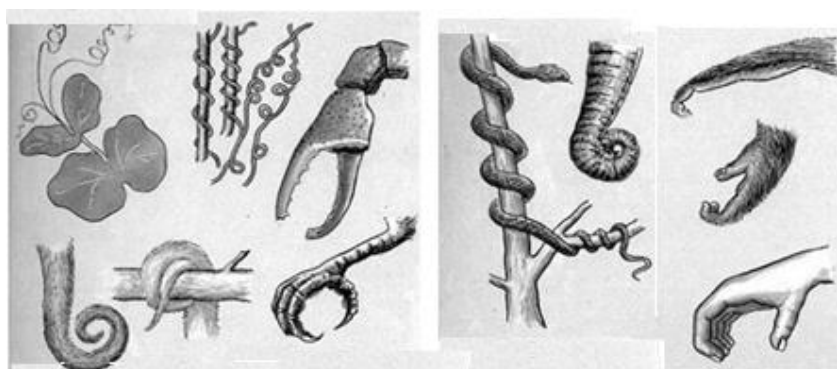


Рис. 4. Использование вогнутых автоволн в биологии

На рис. 4 показаны вогнутые автоволны, служащие вьющимся растениям – вьюнам, лианам для закрепления и движения вверх, клешня ракообразных, имеющая вогнутость к центру; показаны вогнутые автоволны в виде цепких хвостов лазающих животных – обезьян, лазающих сумчатых, хвосты используются для закрепления на ветвях, подъема и спуска; показана вогнутая автоволна в виде когтистой птичьей лапы; вогнутая автоволна, реализуемая в теле удава и других змей, в виде хобота слона; верхние конечности человека и примата в виде вогнутой автоволны.

#### Роль вогнутых волн в образовании морских волн и цунами

В водоёмах наиболее распространены ветровые волны. Они образуются и развиваются благодаря энергии ветра, передаваемой воде за счёт трения и путём давления воздушного потока на склоны гребней волн. Схема образования вогнутых ветровых волн иллюстрируется рис. 5.

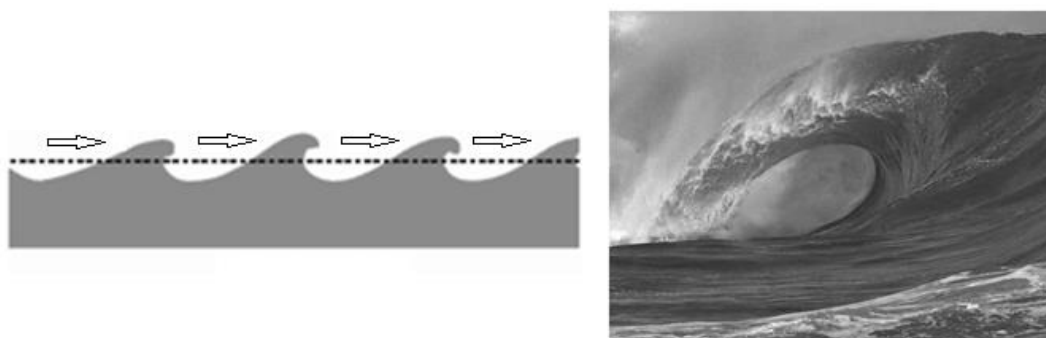




Рис. 5. Схема образования вогнутых ветровых волн – слева. Фотография морской прибойной волны – пример вогнутой ветрово-прибойной волны - справа

Вогнутой волной является цунами. Причины образования цунами: землетрясения, извержения вулканов и другие подводные взрывы (в том числе взрывы подводных ядерных устройств), оползни, ледники, метеориты и другие разрушения выше или ниже уровня воды — всё это обладает достаточным потенциалом, чтобы вызвать цунами.

В образовании цунами существенную роль принимает уменьшение глубины моря по мере приближения к берегу. Нижняя часть возникшей волны тормозится, её скорость уменьшается. При этом верхняя часть волны имеет большую скорость, что и приводит к образованию вогнутой волны. Схема образования цунами и разрушительная сила цунами, иллюстрируемая картиной японского художника Кацусика Хокусай, приведены на рис. 6 слева и справа

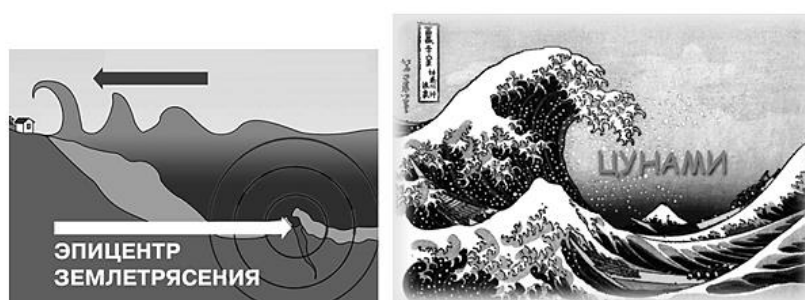


Рис. 6. Схема образования цунами – слева. Картина японского художника Кацусика Хокусай с иллюстрацией цунами – справа.

### **Вогнутые волны при образовании циклонов, тайфунов и ураганов**

Вогнутые волны играют существенную роль в образовании циклонов, тайфунов и ураганов. Фотография циклона, представляющего грандиозную вогнутую волну, показана из космоса на рис. 7.



Рис. 7. Фотография циклона из космоса. Обращаем внимание на сходство формы циклона с формой свернутого хобота слона (рис. 4)

### **ЛИТЕРАТУРА**

1. В.К. Ванаг //УФН, 2004. 174:9. С. 991–1010
2. В.К. Ванаг «Диссипативные структуры в реакционно-диффузионных системах». Москва. Ижевск 2008. 300 с.
3. V.K. Vanag Epstein I.R. // Science. 2001. 294, 835
4. О.А. Морнев и др. // Письма в ЖЭТФ. 2003. Т. 77. № 6. С. 319-325
5. О.А. Морнев и др. //ДАН, 1996, Т. 347, № 1, С. 123-125

## Диэлектрическая спектроскопия и микроволновое воздействие на материалы

А.К. Малышкин<sup>1</sup>, И.А. Малышкина<sup>2</sup>, Ю.А. Пирогов<sup>1</sup>

Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова,

<sup>1</sup>кафедра фотоники и физики микроволн,

<sup>2</sup>кафедра физики полимеров и кристаллов

[mak64msu@yandex.ru](mailto:mak64msu@yandex.ru)

Метод широкополосной диэлектрической спектроскопии позволяет регистрировать изменение свойств вещества в различных частотных диапазонах после воздействия внешних полей.

Так, например, в результате длительного воздействия слабого микроволнового излучения миллиметрового диапазона на сегнетоэлектрик триглицинсульфат вблизи фазового перехода диэлектрическая проницаемость образца, измеряемая на низких частотах, уменьшилась на три порядка, при этом почти не изменившись в диапазоне СВЧ [1].

В настоящей работе исследовано влияние длительного микроволнового воздействия излучения малой мощности на диэлектрические свойства образца костяного фрагмента. Толщина образца составляла 1,48 мм. Влияние температурного фактора на исследуемый материал в ходе эксперимента было исключено.

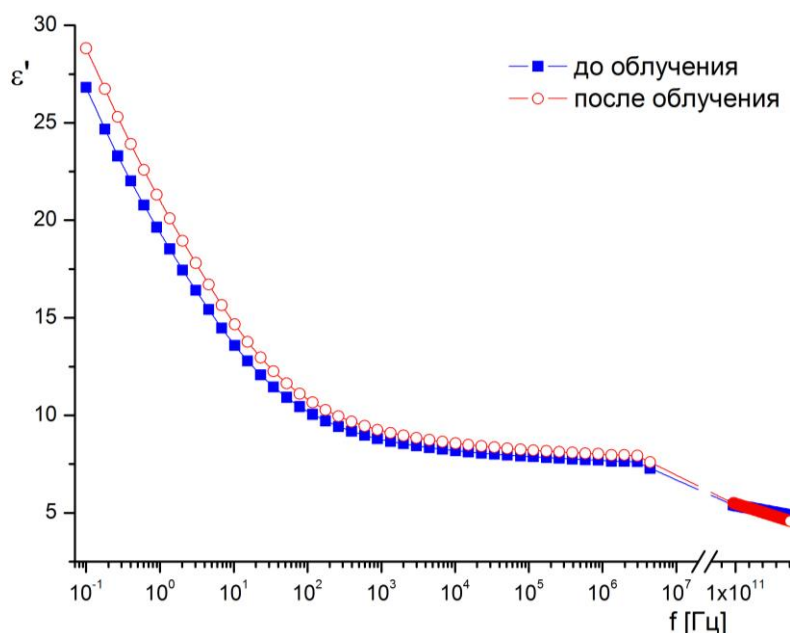


Рис. 1. Зависимости  $\epsilon'$  от частоты костяного фрагмента при комнатной температуре (26°C).

Источником излучения являлась лампа обратной волны (ЛОВ). Излучение мощностью около 100 мкВт и частотой 113 ГГц воздействовало на образец размером  $1 \times 1,5 \text{ см}^2$  перпендикулярно его поверхности при комнатной температуре (26°C). Время воздействия составляло 6 часов.

Измерения диэлектрических характеристик образца до и после облучения были проведены на установке Novocontrol Concept 40 в диапазоне частот  $10^{-1}$ - $10^7$  Гц и спектрометре миллиметрового диапазона СМД-Т в области частот 98-140 ГГц [2]. На рис. 1 и 2 показаны экспериментальные зависимости диэлектрической проницаемости  $\epsilon'$  (рис. 1) и диэлектрических потерь  $\epsilon''$  (рис. 2) от частоты.

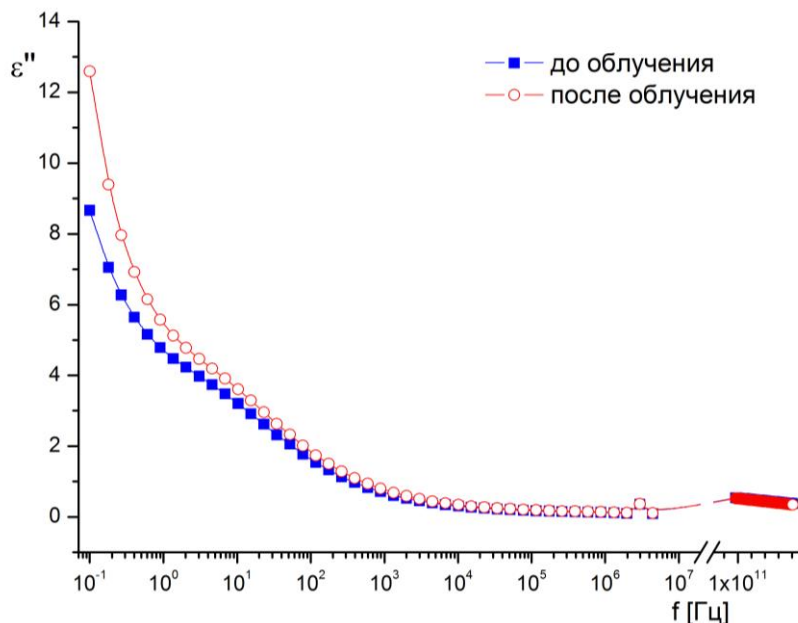


Рис. 2. Зависимости  $\epsilon''$  от частоты костяного фрагмента при комнатной температуре ( $26^{\circ}\text{C}$ ).

Из графиков видно, что в миллиметровой области длин волн диэлектрические свойства образца не меняются. При этом ошибка измерений  $\epsilon'$  в миллиметровом диапазоне не превышает 5%. На низких и ультранизких частотах происходит увеличение  $\epsilon'$  на 5-8% и  $\epsilon''$  до 45% при ошибке измерений, не превышающей 2%. Анализ кривых диэлектрических потерь до и после облучения показал наличие процесса релаксации (при  $\sim 2$  Гц) и вклада проводимости. Обнаружено значительное увеличение интенсивности процесса релаксации после облучения.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. V.K. Novik et al. // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2000. V. 64. No12. P. 1948.
2. A.K. Malyshkin, Yu.A. Pirogov // Physics of Wave Phenomena. 2012. V. 20. No2. P. 134.

## Измерение распределения толщины оптически прозрачных объектов на основе акустооптической фильтрации интерференционных изображений

А.С. Мачихин, Л.И. Бурмак, В.Э. Пожар

Научно-технологический центр уникального приборостроения РАН  
[burmakliu@yandex.ru](mailto:burmakliu@yandex.ru)

Измерение распределения толщины тонких (от единиц мкм до 1 мм) оптически прозрачных объектов является актуальной задачей современной биомедицины, микроэлектроники, неразрушающего контроля. При этом особенно важно обеспечить бесконтактность измерений, отсутствие подвижных элементов в схеме и значительное линейное поле. В настоящей работе представлен подход, удовлетворяющий данным требованиям, который позволяет вычислять распределения толщины тонких объектов методами оптической когерентной томографии (ОКТ) [1].

На рис. 1 представлена схема экспериментальной установки, реализующей данный подход. В ее основе лежит схема ОКТ в спектральной области, показавшая свою эффективность при исследовании поверхностной [2] и внутренней структуры [3] микрообъектов. Излучение широкополосного источника света 1, представляющего собой галогенную лампу, с помощью коллимирующей оптической системы 2 подается на светоделитель 3, который делит световой поток на две части и направляет его в опорный и объектный каналы интерферометра Майкельсона, содержащие идентичные микрообъективы 4 и плоские зеркала 5. Исследуемый объект 6 помещен в объектном канале в параллельном ходе лучей, перекрывая световой пучок так, чтобы излучение проходило через него только один раз. Интерферирующие пучки из обоих каналов сводятся вместе светоделителем 3, а далее фильтруются акустооптическим (АО) монохроматором 7 и фокусируются объективом 8 на матричном приемнике излучения 9.

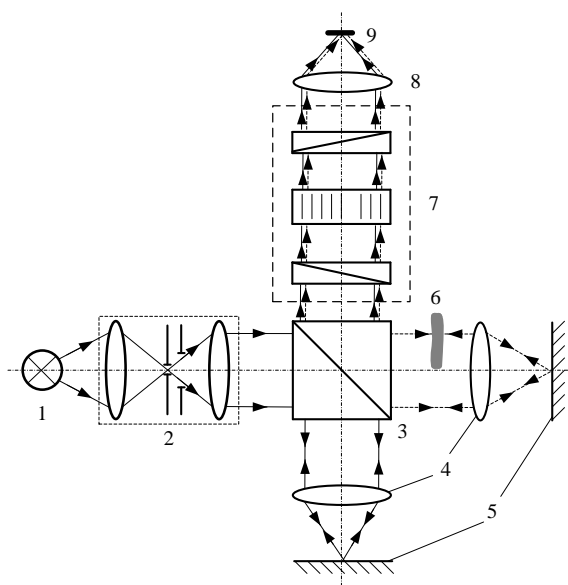


Рис. 1. Оптическая схема установки для измерения толщины оптически прозрачных объектов  
1 – широкополосный источник света, 2 – коллимирующая система, 3 – светоделитель,  
4 – микрообъективы, 5 – зеркала, 6 – исследуемый объект, 7 – АО монохроматор, 8 – объектив,  
9 – матричный приемник излучения.

АО монохроматор 6 содержит АО ячейку из кристалла  $\text{TeO}_2$ , работающую по неколлинеарной широкоугольной схеме АО взаимодействия, и пару скрещенных поляризаторов, пропускающих лишь одну, дифрагированную линейную поляризованную компоненту. Выделяемая длина волны излучения  $\lambda$  определяется задаваемой частотой  $f$  управляющего сигнала, вырабатываемого высокочастотным блоком АО монохроматора 7. Для определения положения плоскости нулевой разности хода (НРХ) производится сканирование по спектру с помощью АО монохроматора и синхронная запись спектральных интерференционных изображений с помощью видеокамеры 9. Цифровая обработка всей совокупности этих изображений методами ОКТ позволяет восстановить зависимость величины отраженного сигнала  $I$  от глубины  $z$  в каждом пикселе  $(x,y)$ . Положение  $z_{ref}$  максимума кривой  $I(z)$  соответствует положению НРХ. После введения в схему исследуемого объекта, как показано на рис. 1, аналогичным образом определяется положение  $z_{ob}$  максимума отраженного сигнала  $I(z)$  в каждом пикселе  $(x,y)$ . Величина  $z_{ob} - z_{ref}$  определяется фазовой задержкой  $(n-1)d$ , которую вносит объект. Поэтому толщину объекта в каждом пикселе можно определить как  $d = (z_{ob} - z_{ref})/(n-1)$ .

На рис. 2 представлен пример исследования пленки из полипропилена ( $n \approx 1,5$ ) номинальной толщиной  $d = 20$  мкм. Спектральные интерференционные изображения, полученные в отсутствие (рис. 2а) и при наличии (рис. 2б) пленки, и соответствующие рефлектограммы  $I(l,z)$ , вычисленные вдоль линии  $l$  (рис. 2в), иллюстрируют фазовую задержку, вызванную введением объекта. Вычисленное распределение толщины  $d(x,y)$  пленки в выделенной области (рис. 2б) показано на рис. 2д.

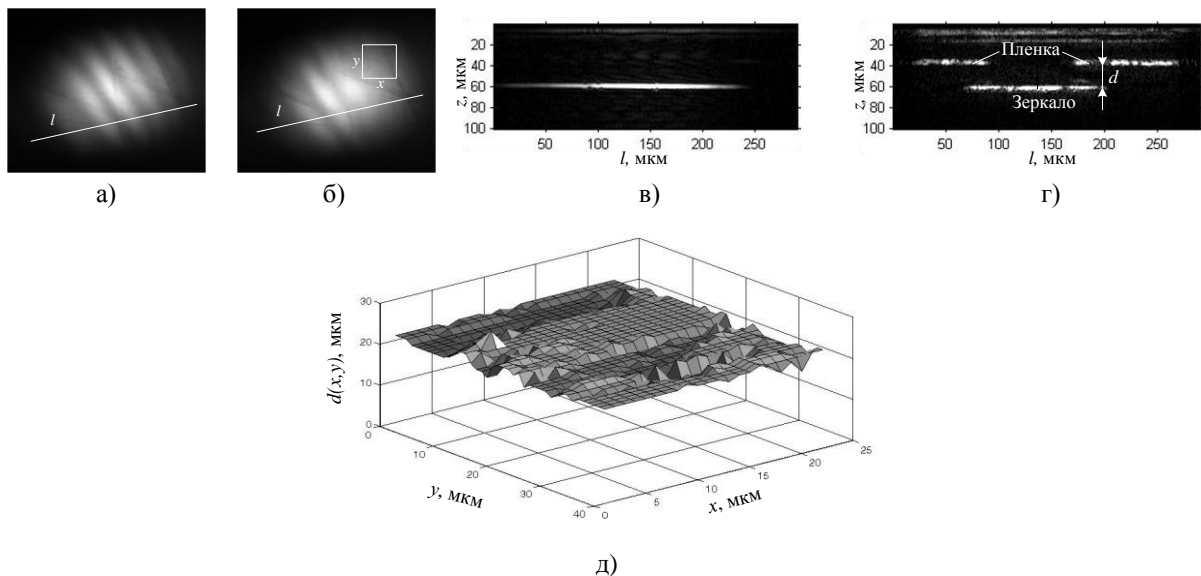


Рис. 2. Одно из зарегистрированных спектральных (800 нм) интерференционных изображений в отсутствие объекта (а) и при наличии объекта в виде пленки (б), соответствующие рефлектограммы  $I(l,z)$  (в и г) и распределение толщины  $d(x,y)$  объекта в выделенной области.

Работа выполнена при поддержке грантов Президента МК-4296.2015.8 и РФФИ (13-02-12210, 15-08-08696, 14-00-10420\_Ир).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Handbook of optical coherent tomography. Edited by Bouma B., Tearney G. New York: Marcel Dekker, Inc., 2002.
2. Висковатых А.В. и др. // ПТЭ 2015. №1. С. 117.

3. A.S. Machikhin et al. // *Physics of Wave Phenomena* 2015. V. 23(1). P. 63.

## Обнаружение новых магнитных фазовых переходов в $\text{CuV}_2\text{O}_4$ методом ЛМД спектроскопии высокого разрешения

К.Н. Болдырев<sup>1</sup>, А.Д. Молчанова<sup>1</sup>, Р.В. Писарев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт спектроскопии РАН, 142190 Троицк, Москва

<sup>2</sup>Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, 194021 С. Петербург

[kn.boldyrev@gmail.com](mailto:kn.boldyrev@gmail.com)

В последнее время большое внимание уделяется изучению магнетиков со сложной кристаллической и магнитной структурой. Метаборат меди кристаллизуется в пространственной группе  $I42d$  ( $Z = 12$ ), где ион  $\text{Cu}^{2+}$  ( $S = 1/2$ ) занимает две неэквивалентные позиции  $4b(S_4)$  и  $8d(C_2)$ . Две подсистемы меди,  $4b$  и  $8d$ , упорядочиваются отдельно, при  $T_N = 21$  К и  $T^* = 8.5$  К, соответственно. Конкуренция внутри- и межподсистемных обменных взаимодействий и геометрическая фрустрация обменов приводят к сложной фазовой диаграмме  $\text{CuV}_2\text{O}_4$  с различными магнитными структурами и несколькими спонтанными и индуцированными полем фазовыми переходами, природа которых остается предметом дискуссий. Метаборат меди демонстрирует необычные оптические спектры поглощения, в которых наблюдаются узкие бесфононные линии (БФЛ) вместе с богатой вибронной структурой, состоящей из более чем 40 фононных повторений для каждой БФЛ для всех  $d-d$  переходов в обеих позициях меди [1] (см. рис. 1). Недавно сообщалось об управлении оптической киральностью  $\text{CuV}_2\text{O}_4$  с помощью магнитного поля [2]. Это утверждение было оспорено теоретиками на основе симметричных соображений [3].

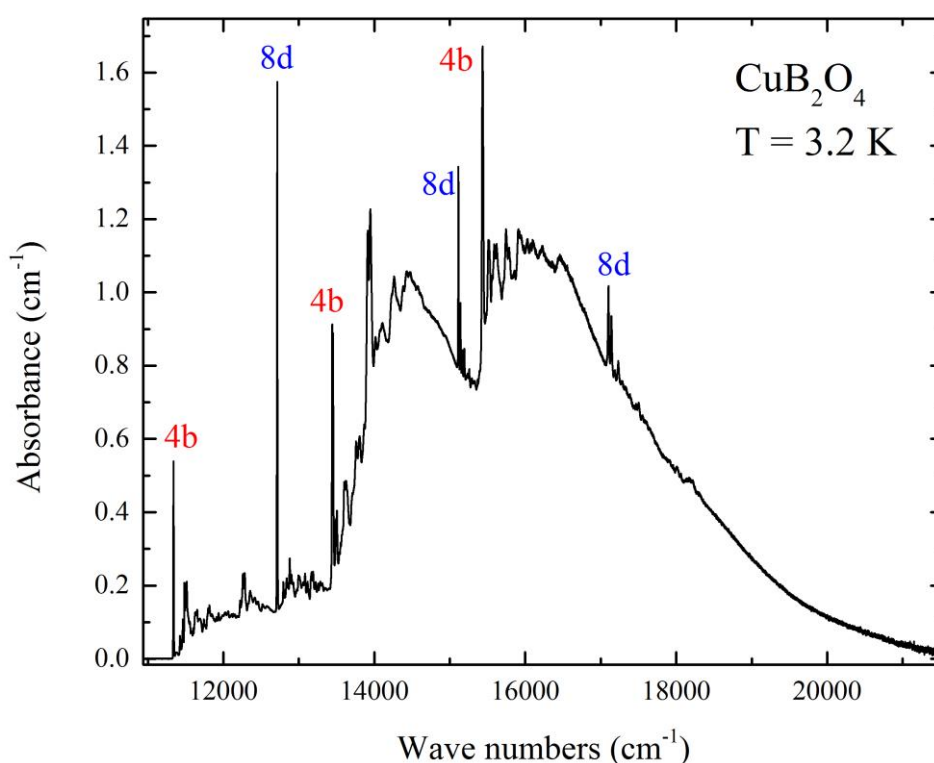


Рис. 1. Спектр поглощения  $\text{CuV}_2\text{O}_4$  в видимой области спектра.

Ранее нами была выявлена дублетная структура БФЛ  $\text{Cu}(4b)$ , обусловленная магнитным Давыдовским расщеплением, и, как следствие, наблюдался сильный антиферромагнитный подрешеточно-зависимый линейный дихроизм (ЛД) в кристаллографически изотропной плоскости  $ab$ . Было обнаружено расщепление низкотемпературного ( $T^*$ ) перехода на два перехода – второго рода при  $T_1^* = 8.5$  К и первого рода при  $T_2^* = 8.0$  К. В данной работе было проведено исследование спектров пропускания образца в оптическом криостате с откачкой гелиевых паров, что позволило охладить кристалл до температуры вплоть до 1.3 К. Данное исследование позволило установить новые фазовые переходы в метаборате меди, происходящие при температурах  $T_3 = 2.0$  К и  $T_4 = 1.9$  К. Так же, как и при температурах  $T_1^*$  и  $T_2^*$ , линейный дихроизм меняет свой знак при  $T_3 = 2.0$  К и полностью исчезает при  $T_4 = 1.9$  К. Рисунок 2 отображает температурную зависимость ЛД во всей исследуемой области температур.

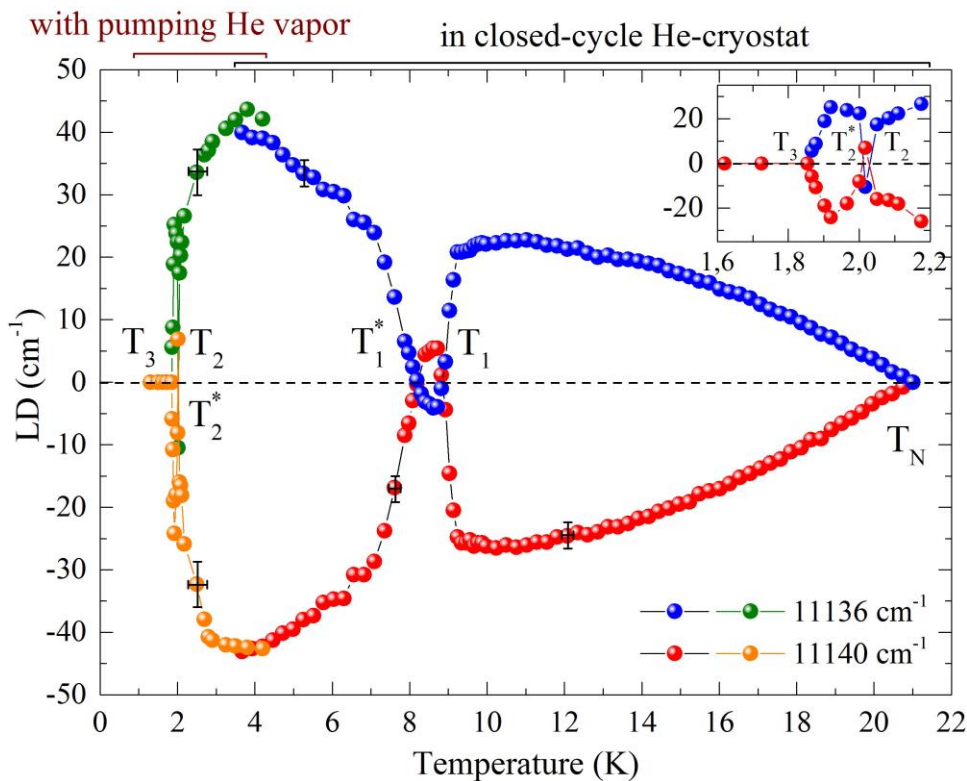


Рис. 2. Температурная зависимость линейного дихроизма.

На основе полученных данных удалось установить характер магнитных структур в разных температурных областях. Таким образом, исследование спектров линейного магнитного дихроизма высокого разрешения продемонстрировало возможность выявления магнитных фазовых переходов и магнитных структур в сложных магнетиках, таких как  $\text{CuB}_2\text{O}_4$ .

Работа выполнена при поддержке гранта Российского Фонда Фундаментальных Исследований (№15-32-20613) и гранта Президента РФ для поддержки молодых ученых (МК-3521-2015.2).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. R.V. Pisarev, A.M. Kalashnikova et. al. // Phys. Rev. B. 2011. V. P. 075160.
2. M. Saito, K. Ishikawa et. al. // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 101, P. 117402.
3. S.W. Lovesey and U. Staub // J. Phys.: Condens. Matter 2009. V. 21, P. 142201.



4. R.V. Pisarev, K.N. Boldyrev et. al. // Phys. Rev. B. 2013. V. 88. P. 024301.

## Метод интеграла Рэлея для исследования импульсных ультразвуковых источников

Д.А. Николаев, С.А. Цысарь

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет

[d.nikolaew@yandex.ru](mailto:d.nikolaew@yandex.ru)

### Введение

При исследовании ультразвуковых пучков и их использовании чрезвычайно важно уметь точно предсказывать акустическое поле, создаваемое излучателем. Самым распространённым способом излучения ультразвуковых пучков является использование колеблющихся поверхностей (мембраны, пьезоэлектрические излучатели) [1]. Распределение колебательной скорости вдоль этой поверхности на практике неравномерно. Причинами этого могут служить дефекты излучателя, его структура, волны Лэмба, возникающие в пьезопластине [2]. Поэтому для того, чтобы узнать, как волна распространяется в пространстве, необходимо определить реальную структуру колебаний поверхности ультразвукового источника. Для ультразвуковых излучателей, работающих в жидкостях, наиболее удобным и точным методом измерения скорости колеблющейся поверхности является акустическая голография [2-4]. В акустике, в отличие от оптики, благодаря относительно низкой частоте колебаний, удаётся производить прямое измерение амплитуды и фазы в каждой точке поверхности, называемой голограммой. И это не единственное преимущество акустической голографии. Одно из них связано с возможностью в ряде случаев проводить измерения на небольших, по сравнению с длиной волны, расстояниях от источника. В этом случае удаётся зарегистрировать неоднородные волны, экспоненциально затухающие при удалении от излучающей поверхности. Данная техника называется акустическая голография «ближнего поля». Она позволяет получить пространственное разрешение, не ограниченное дифракционным пределом. Ещё одним достоинством акустической голографии является возможность её обобщения на случай импульсных источников, широко применяемых в неинвазивной УЗ хирургии [5].

Основная цель работы состоит в определении количественных параметров импульсных акустических полей путём разработки численного алгоритма решения обратной задачи излучения с применением метода нестационарной акустической голографии на основе интеграла Рэлея. В работе осуществляется экспериментальная верификация разработанного алгоритма на примере реального терапевтического фокусированного ультразвукового излучателя, работающего в импульсном режиме. На поверхности источника имеются искусственно созданные неоднородности распределения поля, которые восстанавливаются с разрешающей способностью, ограниченной лишь дифракционным пределом.

### Численное моделирование

Для определения оптимальных параметров системы сканирования предварительно была создана численная модель и проведены расчёты. При этом численно определяется акустическое давление  $P(\mathbf{r})$  в различных точках контрольной плоскости  $\Sigma_H$ . Исходное распределение нормальной скорости монохроматического излучателя в используемой модели выбирается равной  $V_n(\Sigma_S) = 1$  на излучателе и нулю вне его. Полагая, что данные расчёты являются некоторым «виртуальным» экспериментом по формуле:

$$P(\Sigma_H) = -\frac{i\omega\rho_0}{2\pi} \iint V(\Sigma_S) \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} dS \quad (1)$$

вычислим значение амплитуды давления на поверхности  $\Sigma_H$ .

После получения значений амплитуды и фазы волны на их основе проводится решение обратной задачи излучения и восстановление значений амплитуды и фазы на исходной поверхности  $\Sigma_S$ , содержащей излучатель по формуле Рэлея с обращённым временем:

$$V_n(\mathbf{r}) = \iint P(\mathbf{r}') K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') dS' \quad (2)$$

$$\text{где } K(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^{-ikR}}{2\pi i \omega \rho_0} \left[ (\mathbf{n}, \mathbf{n}') \left( \frac{1}{R^3} + \frac{i\omega}{cR^2} \right) - (\mathbf{n}, \mathbf{e}_R)(\mathbf{n}', \mathbf{e}_R) \left( \frac{3}{R^3} + \frac{3i\omega}{cR^2} - \frac{\omega^2}{c^2 R} \right) \right]$$

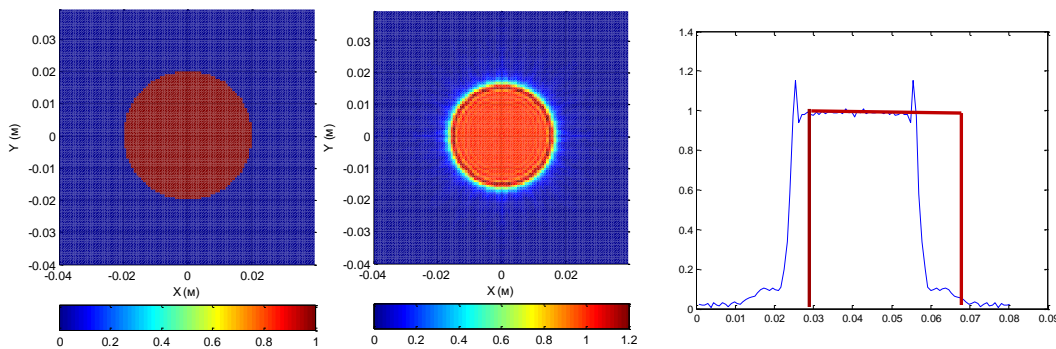


Рис. 1. Исходное распределение нормальной составляющей скорости на сферической излучающей поверхности (слева). Восстановленные значения амплитуды скорости из голограммы с дальности 1 см и с шагом сетки 0,75 мм (в центре). Зависимость амплитуды на диаметре излучателя (справа).

На рис. 1 представлены характерные результаты численного моделирования. Исходя из численного расчета, можно выбрать оптимальные параметры для снятия голограммы. Большое влияние на качество восстановления оказывает шаг сетки. Восстановление происходит достаточно хорошо при шаге сетки  $h = 1\text{ мм}$  (длина волны 1,5 мм). Расстояние до поверхности голограммы имеет меньшее влияние на качество восстановления. Восстановление одинаково удовлетворительно при расстояниях между плоскостями  $\Sigma_S$  и  $\Sigma_H$  порядка линейного размера излучателя. Размер поверхности измерений при этом составляет две апертуры излучателя.

### Эксперимент

В работе исследуется пьезокерамический вогнутый излучатель с нанесенным на его поверхность дефектом рис. 2. Фокус излучателя  $F = 10\text{ см}$ . На преобразователь подается прямоугольный радиоимпульс с несущей частотой равной резонансной частоте излучателя  $f = 1,092\text{ МГц}$  и длительностью  $\tau = 35,6\text{ мкс}$ .



Рис. 2. Пьезокерамический излучатель.

Схема установки представлена на рис. 3. Сигнал через усилитель подается на излучающую поверхность. С помощью гидрофона собирается информация о волне в плоскости голограммы. Далее с помощью интеграла Рэля рассчитывается поле на излучателе.

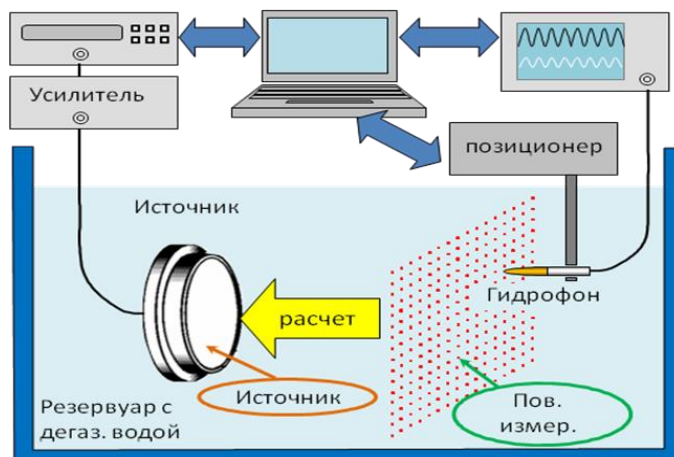


Рис. 3. Схема экспериментальной установки

В результате работы была разработана численная модель решения обратной задачи излучения в случае нестационарных (импульсных) сигналов методом интеграла Рэля. Работоспособность метода была проверена как на численной модели, так и на реальном УЗ преобразователе.

Работа поддержана грантом РФФИ №14-15-00665.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Е.Л. Шендеров «Излучение и рассеяние звука». Л.: Судостроение, 1989.
2. О.А. Сапожников «Восстановление распределения нормальной скорости на поверхности ультразвукового излучателя на основе распределения акустического давления вдоль контрольной плоскости». Акуст. журн. 2003. Т. 49, №3. С. 416–424.
3. С.А. Цысарь «Применение метода акустической голографии для исследования ультразвуковых источников цилиндрической формы». Акуст. ж., 2011, Т.57, №1, с. 104–116.
4. Зельдович Б.Я. Обращение волнового фронта. М.: Наука, 1985. 240 с.
5. «Ультразвук в медицине. Физические основы применения» / Под ред. К. Хилла, Дж. Бэмбера, Г. Тер Хаар. Пер. с англ. Под ред. Л.Р. Гаврилова, В.А. Хохловой, О.А. Сапожникова. – М.: Физматлит, 2008. – 544 с.

## Температурная трансформация микроволновых диэлектрических спектров сегнетовой соли в модели динамической проводимости

Г.И. Овчинникова, И.Ю. Полякова, А.П. Еремеев

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, физический факультет

[ap.ermeev@physics.msu.ru](mailto:ap.ermeev@physics.msu.ru)

Большинство водородсодержащих сегнетоэлектриков обнаруживают наличие характерной диэлектрической дисперсии в миллиметровом и субмиллиметровом диапазонах длин волн. При низких температурах дисперсия лежит в субмиллиметровом диапазоне и имеет вид резонансного отклика. С повышением температуры резонанс размывается и исчезает, а дисперсия переходит в миллиметровый и сантиметровой диапазоны. Впервые наиболее полно температурно-частотная трансформация диэлектрических спектров сегнетовой соли в субмиллиметровом диапазоне длин волн была представлена в работе [1]. Анализ экспериментальных спектров в этой работе проводился на основе представлений о мягкой моде.

В данной работе температурная трансформация диэлектрических спектров сегнетовой соли, представленных в [1], проанализирована в рамках модели динамической проводимости, разработанной для описания движения ионов разупорядочивающейся проводящей подрешетки. Находясь при низкой температуре в локализованных колебательных состояниях, ионы с ростом температуры увеличивают амплитуду колебаний, вплоть до перехода в состояние диффузионного движения. [2]. В водородсодержащем сегнетоэлектрике сегнетовой соли существует разветвленная сетка водородных связей и молекул кристаллизационной воды, удерживаемых с остальной решеткой силами связи, энергия которых на порядок - два меньше энергии взаимодействия основных элементов структуры. Образованная этой сеткой водородных связей протонная подрешетка может создавать в спектре кристалла квазилокализованную колебательную моду, представляющую почти независимое от остальной решетки колебание. Предполагается, что именно это колебание наблюдается в экспериментальном спектре при температуре 5 К на частоте 680 ГГц [1]. В работе представлены результаты расчета температурной трансформации частотных зависимостей действительной  $\epsilon'$  и мнимой  $\epsilon''$  частей диэлектрической проницаемости сегнетовой соли при разных температурах в модели динамической проводимости.

В этой модели проводимость разупорядочивающейся подрешетки описывается выражением, в котором присутствует не только затухание  $\gamma$ , но и время локализации частицы  $\tau_R$  [2]. Изменяя время локализации от больших значений, соответствующих осцилляторному отклику, до очень малых ( $\tau_R=0$ ), соответствующих отклику Друде, можно проследить за температурным разупорядочением системы. Формула для проводимости была преобразована в диэлектрическую проницаемость:

$$\epsilon'(\omega) = -4\pi \frac{ne^2}{m} \frac{\gamma^2(1 + \omega^2\tau_R^2) + \omega_0^2\gamma\tau_R(1 - \gamma\tau_R)}{\epsilon_0((\gamma\tau_R(\omega_0^2 - \omega^2) + (\gamma^2 - \omega_0^2))^2 + (\omega\gamma(1 + \gamma\tau_R))^2)}$$
$$\epsilon''(\omega) = 4\pi \frac{ne^2}{m} \frac{\gamma(\gamma^2(1 + \omega^2\tau_R^2) - \omega_0^2(1 - \gamma\tau_R))}{\epsilon_0\omega((\gamma\tau_R(\omega_0^2 - \omega^2) + (\gamma^2 - \omega_0^2))^2 + (\omega\gamma(1 + \gamma\tau_R))^2)}$$

На рис.1 представлены рассчитанные по этим формулам частотные зависимости  $\epsilon'$  и  $\epsilon''$  с изменяющимися значениями затухания  $\gamma$  и времени локализации  $\tau_R$ , соответствующими росту температуры и разупорядочению протонной подрешетки.

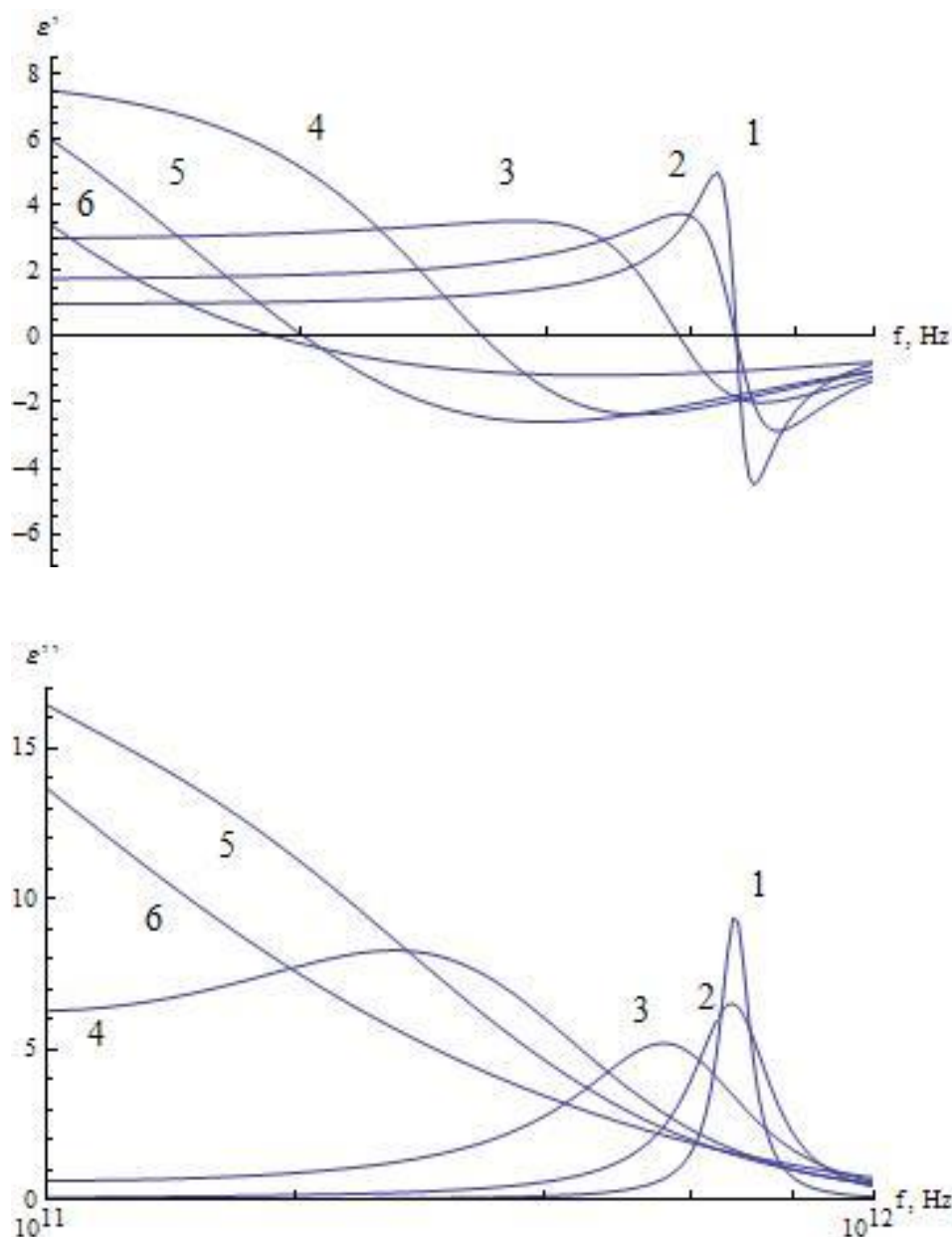


Рис.1. Рассчитанные частотные зависимости  $\epsilon'$ (вверху) и  $\epsilon''$ (внизу) сегнетовой соли для температур  $T$ , К: 80 (1), 113 (2), 150 (3), 187 (4), 218 (5), 280 (6).

При повышении температуры резонанс при гелиевых температурах (не показан на рисунке) затухает, но все еще имеет место до температуры 150 К (кривые 1, 2, 3). Дальнейший рост температуры приводит к увеличению амплитуд колебаний не только протонов, но и основных элементов структуры, что отражается в росте  $\gamma$  и структурной перестройке протонной подрешетки в сторону разупорядочения с увеличением диффузионной составляющей в диэлектрическом отклике. Таким образом, резонансный отклик при низких температурах размывается и исчезает, давая рост отклику проводящей подсистемы, а дисперсия приобретает релаксационный характер. Именно такой характер изменения экспериментальных спектров представлен в работе [1]. В

своих расчетах мы подбирали основные параметры таким образом, чтобы наиболее близко аппроксимировать экспериментальные кривые, что и было достигнуто. Подтверждением правильности выбранной модели для описания температурной трансформации диэлектрических спектров сегнетовой соли можно считать подчинение температурных зависимостей аппроксимирующих параметров закону Аррениуса, что и было проверено.

Таким образом, в работе показано, что температурная трансформация диэлектрических спектров сегнетовой соли может быть описана в рамках модели динамической проводимости разупорядочивающейся протонной подрешетки. С ростом температуры и, особенно, при приближении ее к температуре фазового перехода, возрастает вклад в диэлектрические спектры диффузионной составляющей, и в миллиметровом диапазоне наблюдается значительный рост диэлектрической проницаемости, который согласуется с диэлектрическим откликом на субмиллиметрах [3].

#### ЛИТЕРАТУРА

1. А.А. Волков, Ю.Г. Гончаров, Г.В. Козлов, С.П. Лебедев «Динамические свойства сегнетоэлектриков. Субмиллиметровая диэлектрическая спектроскопия твердого тела». М.: Наука, 1990. Т.25. С.52—111.

2. А.А. Волков, Г.В. Козлов, С.П. Лебедев, А.С. Ракитин «Феноменологическая модель динамической проводимости суперионных проводников» // ФТТ. 1990. Т.32. № 2. С.1—9.

3. Г.И. Овчинникова, Н.Д. Гаврилова, А.Н. Лотонов, Ю.Ф. Коростелева, А.В. Сапронова «Ионный транспорт в кристаллах сегнетовой соли в микроволновых спектрах и статической проводимости» // Изв. РАН, сер. физическая. 1997. Т.61. № 12. С.2431 – 2438.

## Метод оптической регистрации акустических полей в жидкостях

С.А. Петросян<sup>1</sup>, С.А. Цысарь<sup>1</sup>, В.Д. Свет<sup>2</sup>, Д.А. Дементьев<sup>2</sup>, А.В. Чуренков<sup>3</sup>

<sup>1</sup> МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет

<sup>2</sup> Акустический институт имени академика Н.Н. Андреева

<sup>3</sup> МФТИ

[Petrosyan-suren1@mail.ru](mailto:Petrosyan-suren1@mail.ru)

Акустическое поле представляет собой области разрежения и сжатия, распространяющиеся в веществе в виде волны. Для регистрации таких полей можно применять оптические методы. В основе лежит акустооптический эффект, заключающийся в том, что при сжатии показатель преломления вещества увеличивается, и свет при прохождении через эти участки преломляется. Если же среду осветить пучком света и за средой поставить экран, то можно увидеть изображение проекции звукового поля (Рис. 1). Недостаток этого метода заключается в том, что по картине нельзя восстановить количественные значения интенсивности акустического поля.

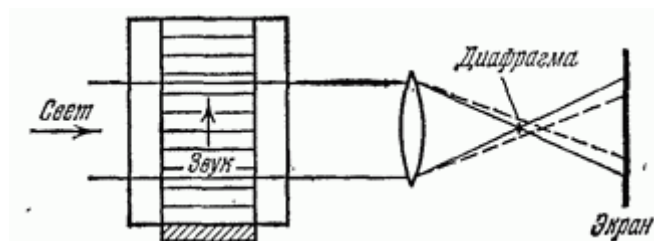


Рис. 1. Метод визуализации звука.

Существует альтернативный способ – лазерная виброметрия поверхности. Принцип работы лазерного виброметра основан на доплеровском сдвиге частоты лазерного излучения, отраженного от колеблющегося объекта. Также виброметр может определять смещение поверхности, измеряя разность фаз между опорным лазерным лучом и лучом, отраженным от исследуемой поверхности [1]. Лазерный виброметр тяжело использовать в жидкостях, так как они обладают сильным акустооптическим взаимодействием [2,3]. Задача состоит в том, чтобы избежать этого взаимодействия путём передачи акустического поля на жесткую поверхность. Данный метод позволит зарегистрировать амплитуду и фазу акустического поля на плоской поверхности и решить обратную волновую задачу.

Конкретная задача состоит в том, чтобы создать численную модель распространения акустической волны из жидкости через жесткий стержень, колебания которого будут регистрироваться оптическим методом, и с помощью неё найти оптимальные параметры системы для эффективной передачи акустического сигнала.

Рассмотрим систему, состоящую из 3 сред: 1 среда – вода. 2 среда – тонкий стержень длины  $l$  постоянного сечения с диаметром  $d$ . 3 среда – воздух. Стержень считается тонким в том случае, когда радиус стержня мал по сравнению с длиной волны. Запишем уравнение движения волны в стержне с учетом вязких сил.

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial t^2} = \frac{E}{\rho} \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \frac{E l}{\rho} \frac{\partial^3 \xi}{\partial t \partial x^2} \quad (1)$$

Для решения задачи о колебаниях стержня конечной длины необходимо учесть граничные условия на его обоих концах. Направим ось  $Ox$  вдоль стержня и будем



считать, что на одном конце стержня при  $x = 0$  в направлении его оси действует вынуждающая периодическая сила. Давление этой силы будет описываться следующей формулой:

$$P_0 = P e^{i\omega t}. \quad (2)$$

В сечении при  $x = 0$ , где приложено внешнее давление, возникающее в стержне напряжение, равно напряжению, создаваемому этим давлением  $P$ :

$$(E + i\omega E') \frac{\partial \xi(x)}{\partial x} = P. \quad (3)$$

Второй конец стержня при  $x = l$  свободен и поэтому напряжение равно нулю:

$$(E + i\omega E') \frac{\partial \xi(x)}{\partial x} = 0. \quad (4)$$

Решение уравнения с учетом граничных условий имеет вид

$$\xi(x, t) = -P \frac{\operatorname{ch}[ik'(l-x)]}{ik'(E+i\omega E')\operatorname{sh}(ik'l)} e^{i\omega t}, \quad (5)$$

где  $E$  и  $k$  с учётом вязкости формально являются комплексными величинами и связаны друг с другом соотношением

$$k' = k + ik = \frac{2\pi}{\lambda} + i\alpha f = \omega \sqrt{\frac{\rho}{E+i\omega E'}}. \quad (5)$$

В случае, когда затухание мало, резонанс возникает на близких частотах, что и для стержня без затухания. Отличие реального стержня от стержня с затуханием в том, что амплитуды волн при резонансе не достигают бесконечных пределов, а имеют большую конечную амплитуду, в отличие от случая без затухания.

Были проведены расчеты распространения акустической волны через рассматриваемую систему с различным набором входных параметров.

Для иллюстрации характерных результатов приведём расчёт для следующего набора параметров (рис. 2): амплитуда давления в среде 1:  $P = 1$  Па, частота воздействия  $f = 1$  МГц. Волновое число в среде 2:  $k = 2\pi/\lambda + ik = (1142.4 + 0.5i)$  1/м (для частоты 1 МГц, в расчётах  $k$  меняется в зависимости от частоты), диаметр стержня  $d = 0.5$  мм.

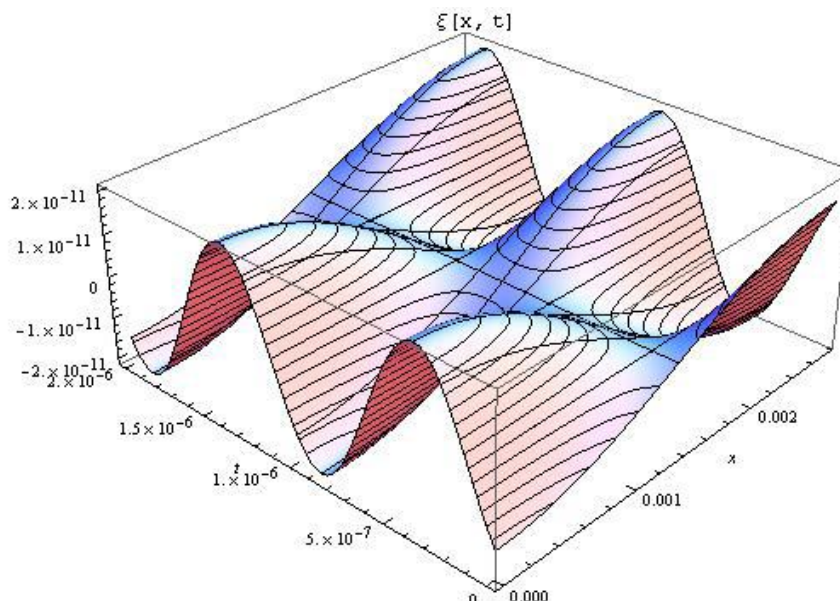


Рис. 2. Зависимость смещения  $\xi(x)$  от длины стержня  $X$ (м) и времени  $t$ (с) на частоте 1 МГц.

Также был проведен эксперимент, основная цель которого заключалась в исследовании возможности регистрации малых колебательных смещений акустического волновода, выполненного в виде стального стержня, методом оптической интерферометрии. Схема установки показана на рис. 3а. Волновод {2} изготовлен из стали, длина которого равна 289 мм, диаметр — 5.9 мм. Масштабы проведенного эксперимента существенно превосходят целевые и были выбраны таковыми для проверки принципиальной возможности оптической регистрации акустических возмущений при прохождении через стержневой волновод. Характерные результаты представлены на рис. 3б. Видно, что регистрируемый сигнал хорошо различим, с высокой точностью можно выделить амплитудные и фазовые значения. Резонанс на частоте 897.6 кГц оказался высокодобротным ( $Q = 1730$ ), а зарегистрированная амплитуда колебательного смещения составила 25 нм в воздухе. При погружении стержня в воду на основной моде (частота 30 кГц) амплитуда смещения составляет 12 нм, а на частоте 263 кГц — 9 нм.

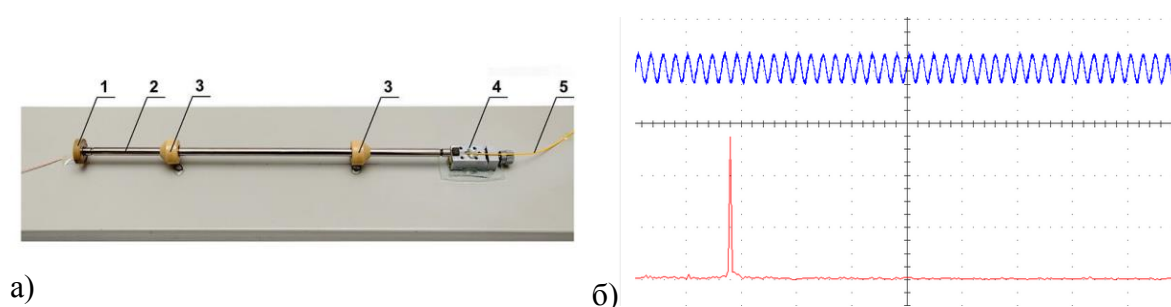


Рис. 3. а) Схема измерений. 1. Возбуждающий пьезопреобразователь. 2. Акустический волновод. 3. Держатели. 4. Микроподвижный юстировочный узел. 5. Оптическое волокно (сигнальное плечо интерферометра Фабри—Перо). б) Результат эксперимента: детектированная модуляция оптического сигнала в интерферометре (синяя линия) и спектральный пик (красная линия).

В результате работы был проведен численный анализ упругих деформаций стержня при возбуждении акустической волной и проведено сопоставление численных и экспериментальных результатов. Полученные данные свидетельствуют о возможности регистрации малых колебательных смещений на конце волноводных

стержней, вызванных акустическими сигналами, распространяющимися в жидкостях, оптическими методами, например, интерферометром типа Фабри-Перо.

Работа поддержана грантами РФФИ №14-02-00331 и №14-02-00426.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. A.B. Stanbridge, D.J. Ewins «Modal testing of rotating discs using a scanning LDV» Trans. ASME—Design Eng. Tech. Conf., 1995, Vol. 3, pp 1207-1213.

2. Halliwell N.A. «Laser vibrometry optical methods in engineering metrology». London: Chapman and Hall, edited by Williams D.C., 1993, Chapter 6, pp. 179-211

3. G. Clement, R. Liu, S. Letcher, et al. «Forward projection of transient signals obtained from a fiber-optic pressure sensor» J.Acoust.Soc.Amer., 1998, Vol. 104, No. 3, pp 1266-1273.

4. А.И. Коробов, В.А. Буров, К.В. Дмитриев, О.Д. Румянцева «Резонансная акустическая спектроскопия твердых тел» Методическая разработка спецпрактикума кафедры акустики. М.: Физический факультет МГУ, 2012. 30 с.

5. С.Н Ржевкин. «Курс лекций по теории звука» М.: МГУ, 1960. 337 с.

## Магнитно-резонансная томография и локальная ЯМР спектроскопия на ядрах фтора-19

Ю.А. Пирогов

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

[yupi937@gmail.com](mailto:yupi937@gmail.com)

Все медицинские магнитно-резонансные томографы, предназначенные для диагностики морфологических отклонений структуры тканей внутренних органов человека и животных, действуют при настройке на частоту прецессии магнитных моментов ядер водорода (протонов) в магнитном поле томографа. Определяется это тем, что основные ткани живых организмов формируются из молекул, содержащих атомы водорода, и создают мощный сигнал отклика на резонансное радиочастотное воздействие. Атомы фтора-19 отсутствуют в организме и фторсодержащие молекулы не могут быть определены даже при настройке томографа на частоту фторной прецессии. Однако сейчас появился целый класс задач, связанных с фторной томографией [1]. Во-первых, разработан в качестве эффективного кровезаменителя так называемый Перфторан®, способный доставлять по кровеносным сосудам кислород к органам жизнедеятельности. Очевидно, что применение Перфторана® требует точного знания адреса доставки его к местам назначения в организме. До сих пор при отсутствии фторных томографов сделать это было нельзя. Кроме того, рассматривается возможность применить специально модифицированные парамагнетиками фторуглероды типа Перфторан® для контрастирования слабых патологических образований в организме. Достоинством контрастных веществ на основе фтора-19 по сравнению с известными широко используемыми в МРТ гадолиниевыми контрастерами является нетоксичность фторуглеродов и большее время выведения из организма. Последнее важно для проведения длительных динамических наблюдений за состоянием диагностируемых органов, особенно в процессе выполнения экспериментальных исследований.

В настоящей лекции дается представление о молекулярной структуре перфторуглеродных соединений и их биомедицинских свойствах. Обсуждаются также приемы формирования МРТ изображений на частотах прецессии фтора-19 в медицинском 0.5-Тл томографе Bruker Tomikon S50 и 7-Тл биоспектротомографе Bruker BioSpec 70/30 USR, предназначенном для исследования малых лабораторных животных [2]. Показаны способы перестройки частоты приема-передающих трактов томографов на частоту F19 и приведены примеры соответствующих МРТ экспериментов по обнаружению мест локализации фторуглеродов, введенных в организм малых животных – крыс и мышей. При совместном использовании опций МРТ и ЯМР спектроскопии (так называемой локальной ЯМР спектроскопии) реализуется метод неинвазивной биопсии *in vivo*, позволяющий без хирургического вмешательства определять характер патологии и степень ее развития.

Лекция основана на материалах, полученных при поддержке гранта Минобрнауки РФ № 14.604.21.0060 (RFMEFI60414X0060).

### ЛИТЕРАТУРА

1. Paria Tirota et al. // Chem. Rev. 2015. V. 115. P.1109.
2. М.В. Гуляев и др. // Журнал радиоэлектроники: электронный журнал. 2013. №8. URL: <http://jre.cplire.ru/jre/aug8/text.pdf>

## **Получение спектральных голографических изображений прозрачных объектов на основе акустооптической фильтрации излучения в интерферометре Маха-Цендера**

А.С. Мачихин, В.Э. Пожар, О.В. Польшикова, А.Г. Рамазанова

*Научно-технологический центр уникального приборостроения РАН*

[aaalexanderr@mail.ru](mailto:aaalexanderr@mail.ru)

В настоящее время в биомедицине, научных исследованиях и неразрушающем контроле находит широкое применение цифровая голография (ЦГ) [1]. Ее используют для восстановления микрорельфа, анализа фазовой структуры, выявления внутренних напряжений и решения многих других задач. Цифровая голограмма содержит полную информацию о трехмерном распределении оптического поля объектной волны в виде интерференционных полос, образующихся при ее суперпозиции с известной опорной волной. Поэтому из зарегистрированного цифрового изображения численными методами возможно восстановить информацию об амплитуде и фазе объектной волны.

Многоволновая ЦГ, позволяющая получать набор цифровых голограмм на нескольких длинах волн, дает возможность получать дополнительную информацию об исследуемом объекте за счет спектрального контраста его элементов, обладающих различными физико-химическими свойствами. При этом наибольший интерес представляют методы регистрации спектральных голографических изображений, где перестройка по спектру могла бы осуществляться почти непрерывно в некотором диапазоне длин волн. В настоящей работе представлена схема для получения спектральных цифровых голограмм «на пропускание», которая может быть использована для анализа оптически прозрачных объектов в произвольных узких спектральных интервалах.

В основе реализованной схемы лежит схема интерферометра Маха-Цендера (ИМЦ) (рис. 1). В осветительном канале расположены широкополосный источник света 1, оптическая система для формирования коллимированного светового пучка нужного диаметра 2 и акустооптический (АО) монохроматор изображений, состоящий из двух скрещенных поляризаторов 3, 5 и установленной между ними неколлинеарной АО ячейки 4. В АО ячейке одна спектральная компонента входящего линейно поляризованного светового пучка, длина волны которой определяется частотой ультразвука, дифрагирует с изменением направления поляризации на ортогональную и отклонением направления распространения, а остальное, недифрагированное излучение задерживается выходным поляризатором 5 монохроматора. После АО монохроматора узкополосное излучение подается на вход ИМЦ, где делится светоделителем 6 на два пучка и направляется в объектное и опорное плечи. В объектном плече ИМЦ, кроме исследуемого объекта 10, располагается система четырех зеркал 7-9, 11, позволяющая менять длину оптического пути излучения в значительных пределах. В опорном плече помимо двух зеркал 12, 13 установлен микрообъектив 14 с точечной диафрагмой (пинхол) 15 в фокальной плоскости, формирующие опорную волну со сферическим волновым фронтом. Волновые фронты двух каналов пространственно совмещаются светоделителем 16, создавая интерференционную картину, регистрируемую матричным приемником излучения 17. Длины оптического пути излучения в объектном и опорном плечах выравниваются посредством прецизионного перемещения двух пар зеркал 8, 9 и 12, 13. Регистрация цифровых голограмм проводится на произвольных длинах волн в диапазоне перестройки АО фильтра, составляющем в собранном макете 740-900 нм. Пространственное разделение информативных 1-го и -1-го и фонового 0-го порядков дифракции осуществляется за счет изменения наклона полупрозрачного зеркала 16.

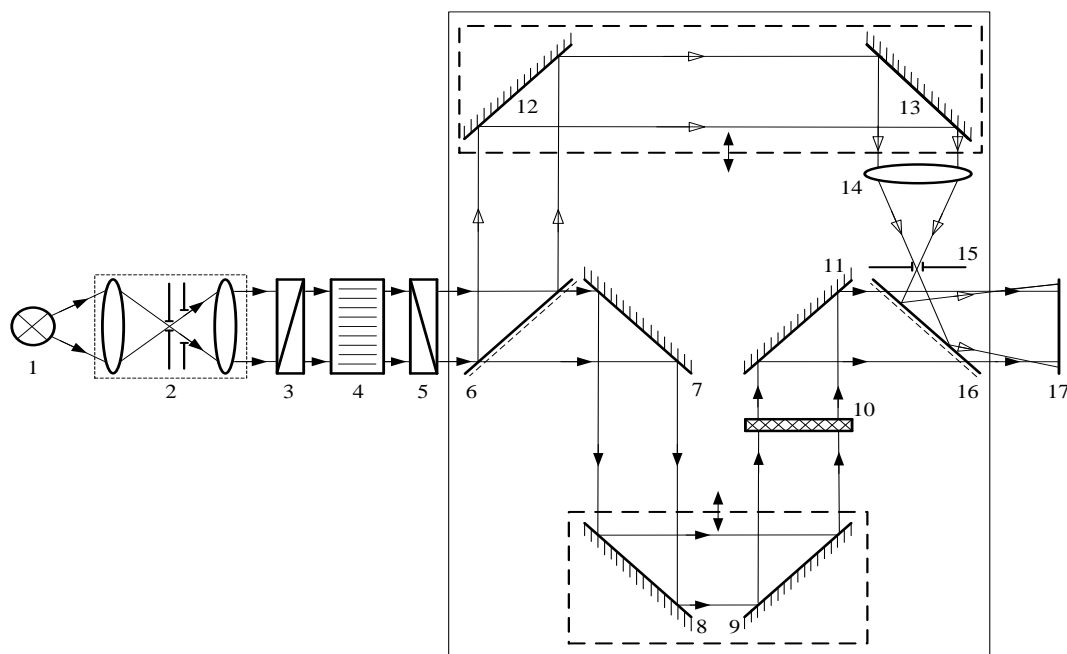


Рис. 1. Оптическая схема макета установки для многоволновой ЦГ  
 1 – широкополосный источник света, 2 – коллимирующая система, 3, 5 – скрещенные поляризаторы, 4 – АО ячейка, 6, 16 – полупрозрачные зеркала, 7-9, 11-13 – зеркала, 10 – исследуемый объект, 14 – микрообъектив, 15 – точечная диафрагма, 17 – матричный приемник излучения.

При вычислении поля объекта в этой схеме обработка зарегистрированного спектрального голографического изображения сводится к обратному преобразованию Фурье зарегистрированной голограммы [2]. На рис. 2 показаны зарегистрированная на длине волны 750 нм цифровая голограмма штриховой миры (рис. 2а) и амплитуда ее преобразования Фурье (рис. 2б). Полученное изображение достаточно точно отображает амплитудную структуру объекта.

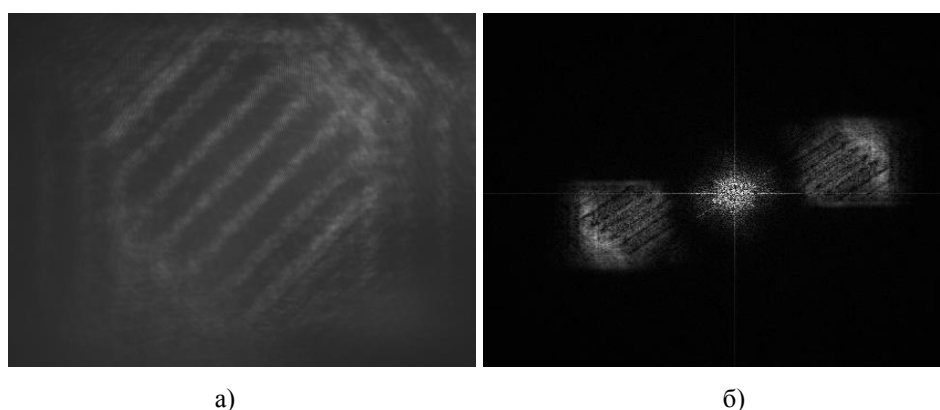


Рис. 2. Зарегистрированное спектральное (750 нм) голографическое изображение штриховой миры (а) и амплитуда восстановленного изображения объекта (б)

Работа выполнена при поддержке грантов Президента МК-4296.2015.8 и РФФИ (13-02-12210, 15-08-08696, 14-00-10420\_Ир).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. М.К Kim. «Digital holographic microscopy. Principles, techniques and applications» Springer, 2011.
2. P. Picart, J. Li. // «Digital holography» Wiley, 2012.

## **Модель геоакустической томографии на волнах поверхностного типа.**

Д.А. Преснов<sup>1</sup>, А.Л. Собисевич<sup>1</sup>, А.С. Шуруп<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики Земли им. О.Ю. Шмидта РАН*

<sup>2</sup>*МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет, кафедра акустики*

[presnov@physics.msu.ru](mailto:presnov@physics.msu.ru)

Поверхностные волны представляют особый интерес, как для практических, так и для теоретических исследований, так как могут использоваться для создания неинвазивных технологий оценки параметров среды на различных масштабах от ультразвукового исследования мелких дефектов материалов до сейсмологического анализа, позволяющего оценить структуру коры и верхней мантии Земли [1]. Целью настоящей работы является исследование возможности применения поверхностных волн рэлеевского типа для задач геоакустического мониторинга глубинных структур. Как правило, практическая реализация тех или иных методов глубинного зондирования требует использования мощных источников сейсмоакустического сигнала, что, в общем случае заметно увеличивает стоимость и усложняет техническую реализацию этих методов. Заметное упрощение эксперимента и снижение его стоимости возможно, если в качестве источника в среде использовать не активное излучение, а микросейсмический шум, являющийся естественным источником информации о геофизической среде. Было показано [2], что функция взаимной корреляции микросейсмического шума, зарегистрированного разнесенными в пространстве сейсмоприемниками, при достаточном времени накопления, имеет два максимума, симметричных относительно нулевой временной задержки. Один из этих максимумов соответствует времени распространения поверхностных волн между точками наблюдения, как если бы в одной точке находился источник, возбуждающий эти волны, а в другой – приемник; второй максимум функции взаимной корреляции соответствует противоположному направлению распространению сигнала между приемниками. В итоге, осуществляя корреляционную обработку микросейсмического шума, представляется возможным реализовать методы сейсмоакустического мониторинга глубинных структур, например, на основе оценок дисперсионных характеристик поверхностных волн. Среди последних экспериментальных результатов, полученных в данном направлении исследований следует выделить работу [2], где приведена обработка сигналов с более чем 2000 датчиков (три компоненты скорости и давление), расположенных на дне Северного моря и покрывающих территорию размером 45 квадратных километров. В результате корреляционной обработки зарегистрированных шумовых полей было восстановлено глубинное распределение скоростей поперечных волн и околонулена область нефтяного пласта.

В настоящей работе обсуждается алгоритм томографического восстановления скоростного разреза геологической среды на основе данных о временах распространений поверхностных волн, полученных для относительно узких частотных диапазонов. Известно [3], что основная часть энергии сейсмического события, как эндогенного, так и искусственного характера, регистрируемого на поверхности Земли, сосредоточена именно в волне рэлеевского типа. На основе ряда экспериментальных работ [4] было показано, что волны рэлеевского типа, распространяющиеся вдоль дневной поверхности, наиболее чувствительны к неоднородностям среды, расположенным на глубине, соответствующей примерно половине длины волны рассматриваемого частотного диапазона. В итоге, изменяя частоту регистрируемого сигнала, сформированного поверхностными волнами рэлеевского типа, представляется

возможным послойное томографическое восстановлении глубинной структуры исследуемой области.

Первым этапом проводимой работы было моделирование решения прямой задачи распространения поверхностных волн в сложной геологической среде. Решение полного волнового уравнения в аналитическом виде для неоднородной упругой среды представляет значительные трудности, поэтому его анализ производится, как правило, на упрощенных моделях [5], либо при помощи высокопроизводительных вычислительных систем [6]. В качестве модели рассматриваемой вертикально неоднородной среды была выбрана система, состоящая из плоскопараллельных изотропных слоев, а расчет зависимости фазовой скорости от частоты для такой среды проводился на основе алгоритма [7]. Ясно, что вид дисперсионных кривых сильно зависит от параметров, которые характеризуют слои – скоростей продольных и поперечных волн, плотностей и собственно количества и толщины слоев. Скорости продольных и поперечных волн однозначно связаны с упругими параметрами Ламе. Изначально были заданы параметры трехслойной модели среды, представленные в Таблице 1, которые в дальнейшем будут характеризовать невозмущенную, фоновую среду.

	Скорость продольных волн, м/с	Скорость поперечных волн, м/с	Плотность, гр/м <sup>3</sup>	Толщина, м
1	1810	1000	1000	1500
2	1620	1080	1000	300
3	2440	1370	1110	∞

Таблица 1. Параметры фоновой, невозмущенной среды.

Характерные кривые дисперсии фазовых и групповых скоростей, полученные при этих параметрах, представлены на (рис. 1а). Групповая скорость рассчитана с использованием значений для фазовой скорости по известной формуле Рэлея. Интерес представляет исследование фундаментальной моды, обладающей наибольшей энергией и, следовательно, проще выделяемой на сейсмической записи.

Для учета неоднородностей среды в горизонтальной плоскости рассчитывались дисперсионные кривые в узлах заранее заданной прямоугольной сетки (см. рис. 1б, где введены обозначения  $c_{ii}$  - скорость продольных волн в  $i$ -ом слое,  $c_{ii}$  - скорость поперечных волн в  $i$ -ом слое,  $\rho_i$  - плотность  $i$ -го слоя,  $h_i$  - толщина  $i$ -го слоя). В каждом узле сетки  $(x, y)$  по вертикальной координате среда является плоскостройной, но при этом параметры слоев в различных узлах сетки различны, что и позволяет приближенно описать неоднородности параметров среды в горизонтальной плоскости.

Расчет карты дисперсионных кривых производился в предположении, что упругая среда представляет собой два слоя на полупространстве, а характеристики (скорости продольных и поперечных волн, плотности) среднего слоя изменяются в горизонтальных координатах по закону двумерного гауссова распределения от значений указанных в Таблице 1 до максимального значения, превышающего фоновое на 100 м/с. В итоге, были получены данные о групповых скоростях  $v(x, y, f)$  поверхностных волн для большого количества точек горизонтальной сетки  $(x, y)$  на различных частотах  $f$ . Выбор заданной частоты  $f = f'$  позволяет получить двумерные карты распределения групповых скоростей в горизонтальной плоскости  $v(x, y, f = f')$ . Далее, на основе  $v(x, y, f = f')$  рассчитывались времена распространений  $t_{kn}$  поверхностных волн между  $k$ -ым и  $n$ -ым датчиками, расположенными на поверхности исследуемой области. Предполагалось, что полученные оценки  $t_{kn}$  соответствуют



временным задержкам, на которых наблюдаются максимумы функции взаимной корреляции микросейсмического шума, полученной для достаточно узкополосного шумового сигнала с центральной частотой  $f'$ . Аналогичным образом рассчитывались времена  $t_{kn}^0$ , соответствующие фоновой, невозмущенной среде. Полученные в итоге возмущения времен  $\Delta t_{kn} = t_{kn} - t_{kn}^0$ , являются исходными для решения томографической задачи восстановления неоднородностей групповых скоростей  $\Delta v(x, y, f = f')$  на заданной частоте  $f'$ , то есть на заданной глубине, примерно равной половине длины волны на выбранной частоте  $f'$ .

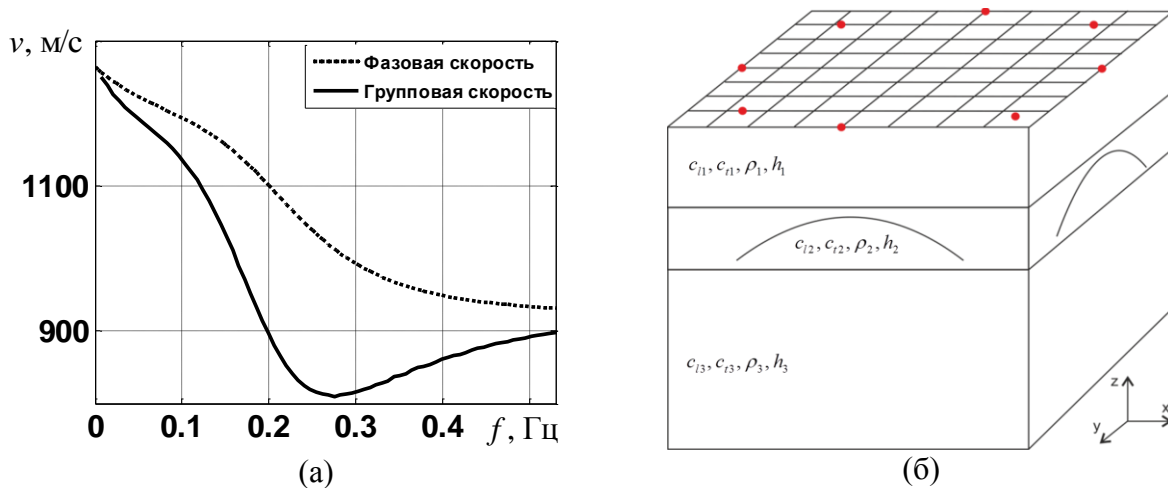


Рис. 1. Характерный вид дисперсионных кривых (а) и модель неоднородной среды (б), где точками на поверхности условно изображены сейсмоприемники, регистрирующие поверхностные волны.

При восстановлении  $\Delta v(x, y)$  (в дальнейшем, для сокращения записей зависимость  $f'$  опущена) по данным  $\Delta t_{kn}$  используется наличие близкой к линейной зависимости между возмущениями времен  $\Delta t_{kn}$  и величиной неоднородности  $\Delta v(x, y)$ , присутствие которой в исследуемой области и вызывает временные задержки  $\Delta t_{kn}$ . В случае существенного отклонения от линейной зависимости, что ожидается в условиях реального эксперимента, возможно привлечение итерационных процедур для уточнения получаемых оценок  $\Delta v(x, y)$ . Сама обратная задача решается при использовании так называемого полосчатого базиса [8], изначально разработанного для решения задач томографии океана [9]. Пример результатов восстановления представлен на рис. 2, где в подписях указаны параметры решаемой задачи. Для оценки точности полученных оценок рассчитывались невязки по решению ( $\eta_v$ ) и по правой части ( $\eta_r$ ), используя стандартные соотношения [10]. Как видно, на рис. 2 удалось восстановить с приемлемой точностью пиковое значение неоднородности  $\Delta v(x, y)$ , ее характерный масштаб и положение в исследуемой области. Аналогичные результаты получаются и для других значений частот  $f'$ . В итоге перебор различных частот позволяет оценить значения двумерных карт групповых скоростей в неоднородной среде на основе временных задержек  $\Delta t_{kn}$ , получив тем самым значения дисперсионных зависимостей  $\hat{v}(f)$  для каждого узла рассматриваемой прямоугольной сетки  $(x, y)$ . Последний шаг обсуждаемого подхода, заключающийся в оценке

характеристик среды  $c_{ii}$ ,  $c_{ij}$ ,  $\rho_i$ ,  $h_i$  по восстановленным значениям  $\hat{v}(f)$ , может быть реализован, например, на основе известных процедур геоинверсии [11].

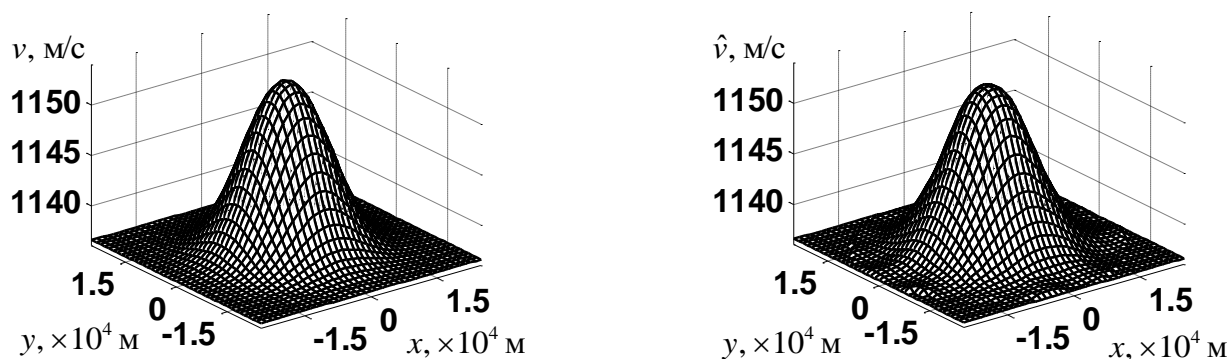


Рис. 2. Исходное распределение групповой скорости поверхностной волны  $v(x, y)$  (а) в исследуемой области на частоте 0.2 Гц и результат восстановления этого распределения  $\hat{v}(x, y)$  (б) при использовании полосчатого базиса, образованного  $P = 8$  полосами, поворачиваемыми под  $U = 15$  углами (возмущение групповой скорости в базисной полосе полагалось равным 8 м/с, количество источников-приемников 11); величина невязки по решению составила  $\eta_v = 0.034$ , невязки по правой части –  $\eta_T = 0.003$ .

Итак, в работе предложена схема геоакустической томографии на основе времен распространения поверхностных волн рэлеевского типа, полученных для различных достаточно узких частотных диапазонов. Предполагается, что в условиях реального эксперимента подобные данные могут быть получены на основе анализа функции взаимной корреляции микросейсмического шума. В отличие от известных авторам схем томографического мониторинга глубинных структур, в настоящей работе используются лишь приемники, расположенные на границе исследуемой области. Перебор различных достаточно узких частотных диапазонов позволяет свести полную трехмерную задачу геоакустической томографии к набору двумерных задач по восстановлению возмущений групповых скоростей поверхностных волн на различных глубинах, соответствующих рассматриваемым частотам. На синтетически смоделированных данных для простейшей модели показаны принципиальные возможности обсуждаемого метода. В дальнейшем основное внимание предполагается уделить апробации предложенного подхода на экспериментальных данных.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ №14-05-00762, № 14-05-90421.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Т.Б. Яновская и др. // Физика Земли. 2014. № 5. С.44-50.
2. A. Mordret et al. // Geophys. J. Int. 2014. № 198. P.1514–1525.
3. К. Аки и др. «Количественная сейсмология. Теория и методы» М.: МИР, 1983.
4. А.В. Горбатилов и др. // Нефтяное хозяйство. 2010. №6. С.15-17.
5. А.Л. Собисевич и др. «Геоакустика слоистых сред» М.: ИФЗ РАН. 2012.
6. И.Е. Квасов и др. // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2012. Т.52. №2. С.330–341.
7. N.A. Haskell // Bull. Seism. Soc. Am. 1953. № 43. P. 17-34.
8. В.А. Буров и др. // Акустич. журнал. 2005. Т.51. №5. С 602-613.
9. В.А. Буров и др. // Акустич. журнал. 2008. Т.54. №2. С.291–306.
10. В.А. Буров и др. // Акустич. журнал. 2007. Т.53. №6. С.791–808.
11. В.Ю. Роганов // Технологии сейсморазведки. 2013. №4. С.49–55.

## **Автоволновая самоорганизация в природно-антропогенных экосистемах**

А.Э. Сидорова, Н.Т. Левашова, А.А. Мельникова,  
Н.Н. Дерюгина, Н.А. Поспелов, А.Е. Семина.  
*Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,  
физический факультет, кафедра биофизики, кафедра математики*  
[sky314bone@mail.ru](mailto:sky314bone@mail.ru)

Рассмотрена пространственно-временная модель природно-антропогенных экосистем как иерархий активных сред с автоволновой самоорганизацией, учитывающая неоднородности антропогенных и природных взаимодействий. Модель направлена на выявление пороговых значений управляющих параметров [1 - 3].

В качестве функции интенсивности активатора рассмотрены антропогенные процессы, а в качестве функция интенсивности ингибитора - природные процессы. Параметр активации системы определяется в зависимости от численности и плотности населения. Для нелинейных систем характерно наличие резких внутренних переходных слоев в пространстве, то есть таких пространственных областей, в которых происходит резкое изменение функций интенсивности активатора и ингибитора. На практике эти области можно интерпретировать как окраины «спальных районов» в городе или граничные области между мегаполисами и соседними «городами-спутниками».

В перспективе предложенная модель, объясняющая основные закономерности развития природно-антропогенных экосистем, может быть усовершенствована путем учета различных факторов, влияющих на систему. Такой подход позволит изучать как влияние каждого фактора по отдельности, так и совокупности факторов. Данная модель напрямую применима к описанию биоценозов в латеральной и шельфовой зонах в представлениях активных сред.

### **ЛИТЕРАТУРА**

1. А.Э. Сидорова, Ю.В. Мухартова «Пространственно-временная модель урбоэкосистем как сопряженных активных сред» / ВМУ. Серия 3. Физика. Астрономия. 2013, №5. – С. 65-70
2. А.Э. Сидорова, Ю.В. Мухартова, Л.В. Яковенко «Урбоэкосистемы как суперпозиция сопряженных активных сред»/ ВМУ. Серия 3. Физика. Астрономия. 2014, № 5 - С.29-35
3. А.Э. Сидорова, Н.Т. Левашова, А.А. Мельникова, Л.В. Яковенко «Популяционная модель урбоэкосистем в представлениях активных сред» / Биофизика, 2015, том 60, вып. 3, С. 574-582

## Математические принципы настройки аппаратных функций измерительно-вычислительных систем

Е.Н. Терентьев<sup>1</sup>, Н.Е. Терентьев<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Физический факультет МГУ,

<sup>2</sup>HiQo Solutions, Moscow

[en.teren@physics.msu.ru](mailto:en.teren@physics.msu.ru),

В методе регуляризации Аппаратная Функция (АФ) неизменна. Для обращения искажений АФ используют "априорную гладкость решений"[1]. Математические Принципы Настройки (МПН) изменяемых регулярных АФ  $O$  производится по сетке параметров  $PAR=N \times DIAP$ :  $N$  - длина области определения,  $DIAP$  – ограничение в частотной области или деформацией формы АФ  $O$  путем изменения параметров формы. Разрешающую функцию  $pR$ , компенсирующую искажения АФ  $O$  в операции свертка -  $pR * O = d$  - символ Кронекера, выбираем путем решением основной МПН задачи (2). Выбранная  $pR$  с максимальной точностью реализует обращение искажений АФ  $O$ . Фурье гармоники  $H = \{e_i, i=1:N\}$ , в представлении чисел компьютером, ортогональны с точностью  $10^{-14}$ - $10^{-15}$ . Инструментальную ошибку связываем с интервалом  $Iz = abs(.) = 10^{-13}$ .

В основе инструментов МПН - задача на спектр  $O * H = M * H$ , где  $M = M(O)$  есть Модуляционная Передаточная Функция (МПФ) АФ  $O$  [2]. Если для некоторых компонент  $M(O) \in Iz$ , то считаем, что эти спектральные компоненты в  $M(O)$  отсутствуют и не учитываются в ряде Фурье по косинусам для  $zR * O(0) = \Pi(zR * O) < 1$ . Так образом мы вводим  $\Pi(zR * O)$  - индикатор  $Iz$  обратимости. В инструменты МПН входят индикаторы обратимости и точности относительно  $Iz$ , параметров  $PAR$  [4,5].

**Инструменты МПН.** Инструменты МПН получим из функции ToolsMPS:

$$\begin{aligned} \{ \Pi, MM, Fun, Nor, Err \} &= ToolsMPS(O, Iz, PAR) & (1) \\ \Pi &= [ \Pi(zR * O), \Pi(pR * pO), \Pi(pR * O), \Pi(R * O) ], \\ MM &= [ M(zR)M(O), M(pR)M(pO), M(pR)M(O), M(R)M(O) ], \\ Fun &= [ O, zR * O, \dots, M(zO) ], \quad Nor = [ Nor(O), \dots, Nor(M(zO)) ], \\ Err &= [ Err(zO), Err(M(zO)), Err(pO), Err(M(pO)) ]. \end{aligned}$$

На входе функции ToolsMPS (1): АФ  $O$ , инструментальная ошибка  $Iz$  и сетка  $PAR$ , а на выходе - пять блоков инструментов:  $\Pi$  – индикаторов обратимости,  $MM$  – индикаторов точности,  $FUN$  – функций и их норм  $Nor$  и блок ошибок  $Err$ . Первый блок индикаторов  $\Pi$  содержит: индикатор обратимости  $\Pi(zR * O)$ , индикатор регулярности  $\Pi(pR * pO)$ , индикатор рассогласования  $\Pi(pR * O)$  и короткий индикатор точности вычислений  $\Pi(R * O)$ . Второй блок индикаторов  $MM$  содержит:  $M(zR)M(O)$  - индикатор использования полосы пропускания ИВС,  $M(pR)M(pO)$  – индикатор полной полосы пропускания ИВС,  $M(pR)M(O)$  – индикатор эффективности использования полосы пропускания ИВС и длинный индикатор точности вычислений  $M(R)M(O)$ . Третий блок  $Fun$  представляет функции МПН. В четвертом блоке  $Nor$  - нормы функций. Последний пятый блок  $Err$  представляет ошибки.

**Теорема о регуляризации:** на сетке PAR нерегулярное множество АФ О отображается в регулярные множества с  $pO = pR^{-1}$ ,  $\Pi(pR * pO) = 1$ .

**Теорема о монотонности:** Реакция на шум  $\text{Nor}(pR)$  и рассогласование  $\Pi(pR * O)$  монотонно возрастают, а ошибки  $\text{Err}(pO)$  и  $\text{Err}(pM)$  монотонно убывают при возрастании DIAP и фиксированном N на сетке PAR.

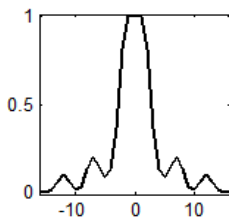
Имеет место МПН эффект  $effect = \frac{\|zR\|}{\|pR\|} \geq 1$  падения реакции на шум.

**Основная задача МПН.** Регулярная функция  $pR = pO^{-1}$  выбирается путем решения основной МПН задачи:

$$\min_{PAR} \{ \|pR\| : \|pO - O\| \leq \text{lim err} \}, \quad \text{lim err} \leq \text{err}. \quad \dots(2)$$

Задача (2) реализует максимальную точность результата [3,5] на сетке PAR путем применения инструментов ToolsMPS (1).

Конечно, можно деформировать форму АФ О, изменяя параметры PAR лепестков диаграммы направленности. Мы много лет используем четырех лепестковую расширенную Гауссовскую модель формы АФ О [4-5]. Основным лепестком приближаем двумя расширенными на величину *rect* Гауссоидами. Вторая Гауссоида в основном лепестке учитывается с весом  $w_2$ . Четыре параметра *rect*,  $\sigma_1$ ,  $w_2$ ,  $\sigma_2$  задают расширенную форму основного лепестка. В Гауссовской АФ  $pO$  (3) учитываем еще два боковых лепестка. Всего 10 параметров, C - нормировочный коэффициент для  $\text{sum}(pO(x_i, y_i) | PAR) = 1$  и  $M(pO)(0) = 1$ . Если мы настраиваем PAR, то C=1.



PAR=[2.5, 1.5, 0.3, 3, 0.2, 7, 1.5, 0.1, 12, 1.5]

$$pO((y, x) | \text{rect}, \sigma_1, w_2, \sigma_2, w_3, a_3, \sigma_3, w_4, a_4, \sigma_4) =$$

$$= C (r = \sqrt{y^2 + x^2},$$

$$pO = \begin{cases} 1, & r \leq \text{rect} / 2 \\ \exp(-(r - \text{rect} / 2)^2 / \sigma_1^2), & r \geq \text{rect} / 2 \end{cases} + \quad (3)$$

$$+ w_2 \begin{cases} 1, & r \leq \text{rect} / 2 \\ \exp(-(r - \text{rect} / 2)^2 / \sigma_2^2), & r \geq \text{rect} / 2 \end{cases} +$$

$$+ w_3 \exp(-(r - a_3)^2 / \sigma_3^2) + w_4 \exp(-(r - a_4)^2 / \sigma_4^2) )$$

**Эффективность использования полосы пропускания ИВС.** Будем оценивать эффективность использования полосы пропускания ИВС величиной:  $\underline{M(R)M(O)} = \text{sum}(M(R) * M(O)) / N$ . На картинках с заголовками типа “M(R)M(O)” с префиксами это нижний второй параметр. Первый верхний параметр есть дробь: в числителе число точек M(O), попавших в Iz, а в знаменателе величина N.

На картинках с заголовками "R\*O" с префиксами рядом стоит величина индикатора  $\Pi(R * O)$ .

**Теоремы об обратимости в полосе пропускания ИВС:** Если вычисления реализуются с инструментальной ошибкой Iz, то с этой инструментальной ошибкой сохраняются равенство и неравенство:  $\Pi(R * O) = \underline{M(R)M(O)} \leq 1$ . Неравенства имеют место в случаях с ошибкой рассогласования  $\Pi(pR * O) < 1$ . Это означает, что обратимость имеет место в только в части  $\underline{M(R)M(O)}$  полосы пропускания ИВС.

**Теорема об обратимости:** Из  $I_z$  обратимости  $\Pi(zR^*O)=1$  следует прямая обратимость  $\Pi(R^*O)=1$ ,  $zR=R=O^{-1}$  с использованием всей полосы пропускания  $M(zR)M(O)=1$ , тождеством  $M(zR)M(O)=1$ .

**Контроль вычислительных ошибок:** если длинный индикатор точности вычислений  $M(R)M(O) \neq 1$  и  $M(R)M(O)$  не равно тождественно единице, то имеет место накопление вычислительных ошибок. При этом может быть все не так плохо по короткому индикатору точности  $\Pi(R^*O)=1$ . Все плохо по ошибкам, если и короткий индикатор точности  $\Pi(R^*O) \neq 1$ .

### МПН формы АФ О по изображению звезды

В этом примере дано астрономическое изображение  $I_Y=O^*I_X$  (с двухбайтовым представлением) яркости. Требуется МПН оценить АФ О и поднять разрешение.

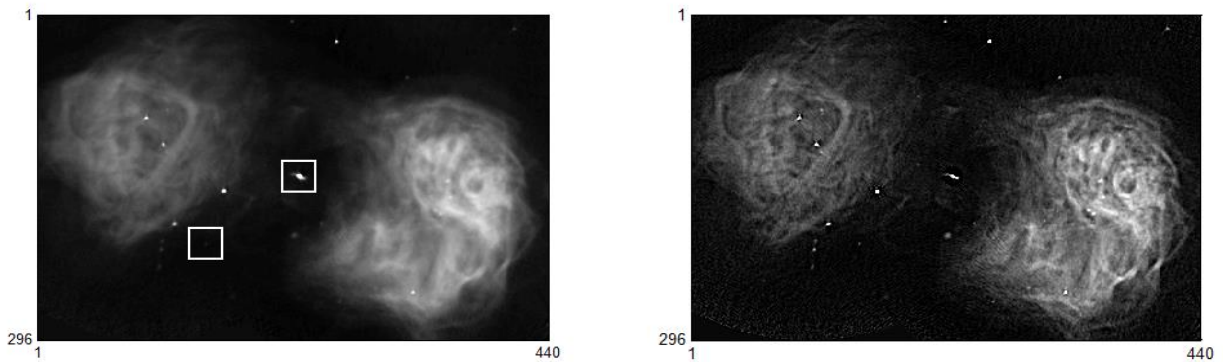


Рис. 1. В исходном изображении  $I_Y$  рамками выделены самая тонкая звезда S и центральный (в 10 раз более) яркий объект B.

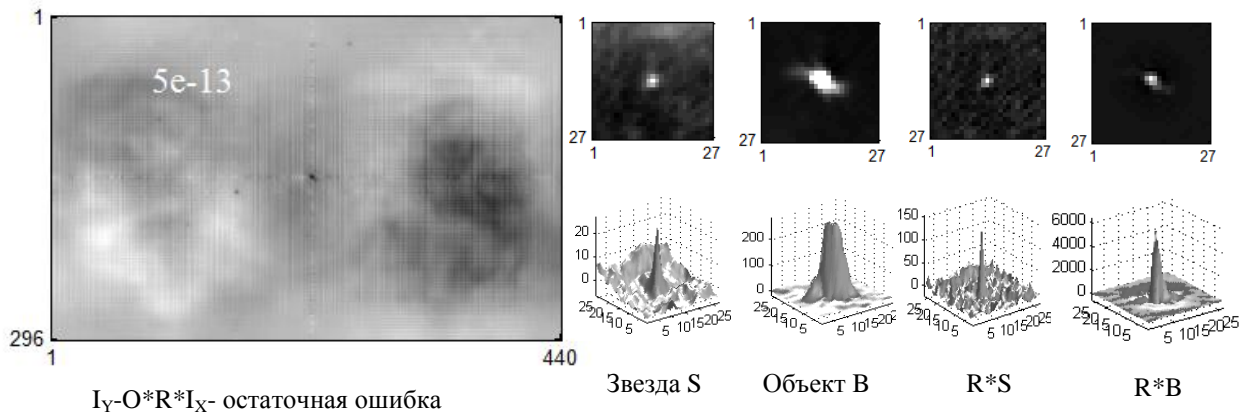


Рис.2. Оценивание формы АФ О и контроль МПН разрешения

Гауссовская форма основного лепестка АФ О МПН оценивалась по самой “тонкой” звезде S. Форма двух боковых лепестков АФ О оценивалась по яркому объекту B. Результат обратим  $R=O^{-1}$ , с нормой  $\text{Nor}(R)=14$  и  $pR=pO^{-1}$  с нормой  $\text{Nor}(pR)=12$  т.е. имеем высокоточное разрешение путем применения обычного обращения.

### Обсуждение

В реализации МПН намного сложнее метода регуляризации А.Н. Тихонова [1]. Для метода регуляризации были аналогичны разработаны инструменты ToolsREG [4,5]. Мы исходили из того, что разработка нового метода должна сопровождаться разработкой новых инструментов для сравнения, распространения и внедрения метода.

Если  $M(zR)M(O) < 1$ , то это означает потерю (при измерениях прибором с АФ О) информации по полосе частот. Считаем неуместным возмещать такие потери из за АФ О совсем другим объектом - "априорной гладкостью решений". Математика самодостаточна и должна все объяснять. Что мы и делаем в методе МПН.

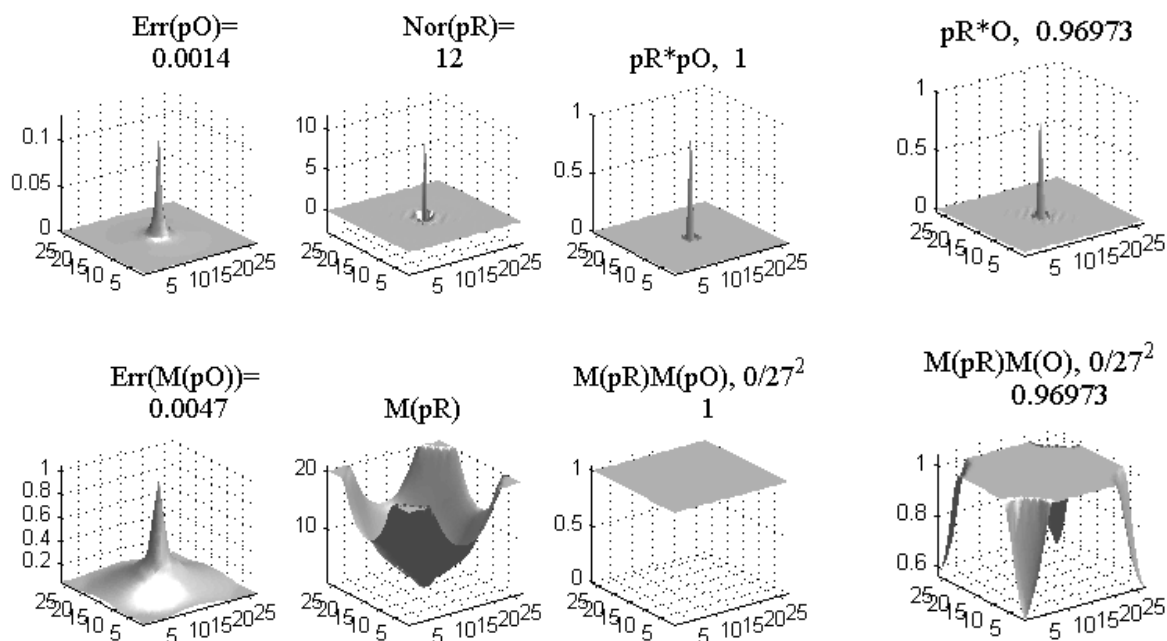


Рис.3. МПН параметров АФ О, R и pO, pR. Ошибки Err(), рассогласование и полоса пропускания  $\Pi(pR*O)=M(pR)M(O)=0.96973$  обусловлены ограничением  $DIAP=20, L=27$ .

В ответ на вопрос по сути проблемы “Как понимать решения обратных задач?” мы предлагаем обратные задачи рассматривать на регулярном множестве моделей АФ О, R и pO, pR. В МПН нет “априорной гладкости решений” поэтому нет остаточной ошибки.

По сути, измерительный прибор с МПН возможностями должен так настраиваться по АФ так, чтобы потом без потерь, в определенной стабильной ситуации предсказуемо компенсировать искажения регулярных АФ обычным обращением и с максимальной точностью. В этом и есть основной прикладной смысл понимания проблемы.

Метод МПН найдет практические применения и в значительно более сложных случаях, например, с настраиваемыми многолучевыми радарами [4-5].

## ЛИТЕРАТУРА

1. А.Н. Тихонов, М.В. Уфимцев «Статистическая обработка результатов эксперимента» изд. Московского университета, 1988.
2. E.N. Terentiev, N.E. Terentiev // Proc. SPIE, Vol. 6246(2006)
3. Ю.П. Пытьев «Методы математического моделирования измерительно-вычислительных систем», ФИЗМАТЛИТ, 2012 г.
4. Е.Н. Терентьев, Н.Е. Терентьев // 7-я межд. конф. АКУСТООПТИЧЕСКИЕ И РАДИОЛОКАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ ИЗМЕРЕНИЙ И ОБРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ, 15-17 сен. 2014, Суздаль, Россия, Программа, с. 49-53

5. Е.Н. Терентьев, Н.Е. Терентьев // там же, с. 53-57



## **Использование открытой акустической системы Verasonics для измерения скорости сдвиговых волн в полимерных фантомах CIRS**

Р.Ш. Халитов, С.Н. Гурбатов, И.Ю. Демир

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского*

[khalitovrsh@gmail.com](mailto:khalitovrsh@gmail.com)

Модуль Юнга, а соответственно и модуль сдвига мягкой биологической ткани являются важными диагностическими параметрами для медицинских приложений, связанных с обнаружением опухолей и других патологий (например, фиброза печени) на ранней стадии заболевания. Это связано с тем, что объемная сжимаемость мягких тканей меняется при развитии патологий очень слабо (она близка к сжимаемости воды), в то время как изменения модуля Юнга и сдвига могут достигать нескольких порядков и поэтому обладают диагностической информативностью. В соответствии с этим, представляется разумным строить диагностическую систему не на основе продольных ультразвуковых волновых волн, а на основе сдвиговых волн, у которых скорость распространения определяется модулем сдвига, жестко связанным с модулем Юнга [1].

В настоящее время перспективным способом экспериментального определения сдвиговых характеристик мягких тканей является метод Shear Wave Elasticity Imaging (SWEI), предложенный О. В. Руденко, А. П. Сарвезяном и соавторами в 1998 году [2]. Суть метода: интенсивная ультразвуковая волна фокусируется в точке, рядом с которой необходимо определить сдвиговой модуль среды, поглощение энергии компрессионной волны в точке фокусировки приводит к излучению сдвиговой волны в среде. Прохождение сдвиговой волны регистрируется с помощью обычного ультразвукового зондирования, затем происходит расчет скорости ее распространения. Данный метод был реализован на открытой акустической системе Verasonics, находящейся в лаборатории Биомедицинских технологий «МедЛаб» на кафедре акустики Нижегородского университета. Достоинством данной системы является возможность программным образом в среде MatLAB формировать излучаемые импульсы и иметь доступ к принимаемым высокочастотным сигналам. Также важно отметить, что ультразвуковая диагностическая система Verasonics имеет дополнительный блок питания, позволяющий генерировать импульсы произвольной длительности и повышенной мощности, что также отличает ее от стандартной системы ультразвуковой диагностики. При проведении исследований на системе Verasonics использовался стандартный многоэлементный датчик L7 – 4 с параметрами: число элементов 128, размер элемента 7x0.283 мм, расстояние между соседними элементами 0.025 мм. Рабочая частота была выбрана равной 5 МГц (как для изображающих импульсов, так и для толкающего импульса) и использовалась стандартная амплитуда диагностических импульсов 50 В.

Измерения скорости сдвиговой волны в фантоме проводились следующим образом [3]:

- на поверхность полимерного фантома CIRS устанавливался многоэлементный датчик L7-4;

- строилось ультразвуковое изображение (В-скан) на частоте 5 МГц интересующей нас области фантома с использованием оригинального алгоритма построения, разработанного в лаборатории «МедЛаб» [4]

- определялись координаты объекта в плоскости изображения, и в эту точку фокусировался ультразвуковой пучок. Рассеяние ультразвуковой волны приводит к появлению радиационной силы, которая смещает выбранную область среды от исходного положения

- по набору зависимостей смещений среды от времени (для разных расстояний от точки фокуса) определяют скорость сдвиговой волны.

На рис. 1 приведен внешний вид открытой акустической системе Verasonics.



Рис. 1. Открытая акустическая система Verasonics

Для проведения экспериментальных исследований и определения скорости сдвиговой волны был использован калиброванный полимерный фантом CIRS - Model 049 Elasticity QA - Phantom Spherical (рис. 2), содержащий в себе сферы двух диаметров (10 мм и 20 мм) и расположенные на разной глубине внутри фантома. Сферы были четырех типов с определенным значением модуля Юнга (Type I - IV), которые были приведены в сопровождающих фантомы документах. Данные сферы помещались в полимерную среду (Background), упругие характеристики которой также были известны. Достоинством данных фантомов является то, что они изготовлены из полимерного материала Zerdine, характеристики которого не зависят от изменения внешней температуры и прикладываемого давления. Данные фантомы многократного использования в исследованиях без ущерба для материала полимера.

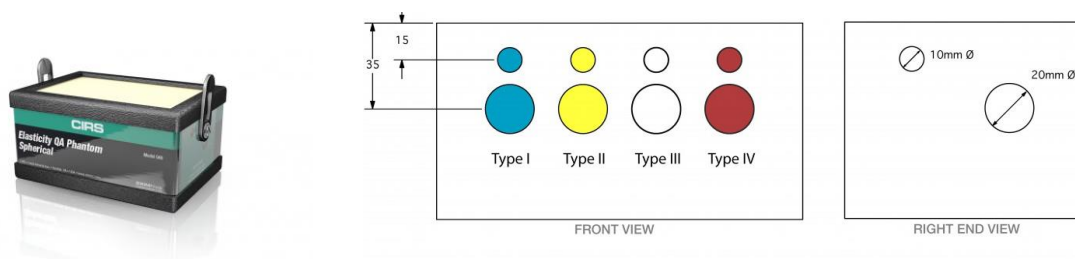


Рис. 2. Внешний вид (слева) фантома CIRS - Model 049 Elasticity QA - Phantom Spherical и распределение сфер (справа) внутри фантома

В таблице ниже приведены результаты измерений скорости сдвиговой волны в полимерных фантомах CIRS - Model 049, выполненных на открытой акустической системе Verasonics, находящейся в лаборатории Биомедицинских технологий «МедЛаб».

	Background	Type I	Type II	Type III
Сдвиговая Скорость (м/с)	<b>3.17</b>	<b>1.67</b>	<b>2.14</b>	<b>4.29</b>

Для резиноподобных сред, к которым относятся и исследуемые нами полимерные и желатиновые фантомы, связь между модулем сдвига ( $\mu$ ) и модулем Юнга ( $E$ ) определяется соотношением  $E=3\mu$ . Скорость сдвиговой волны определяется по формуле

$$v_{sh} = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}},$$

где  $\rho$  - плотность среды. Тогда при помощи выражения  $E = 3\rho v_{sh}^2$  можно выполнить пересчет скоростей сдвиговых волн в значения модуля Юнга и провести сравнение их со значениями для фантомов, которые указаны в сопровождающих документах (приведено на рис. 3).

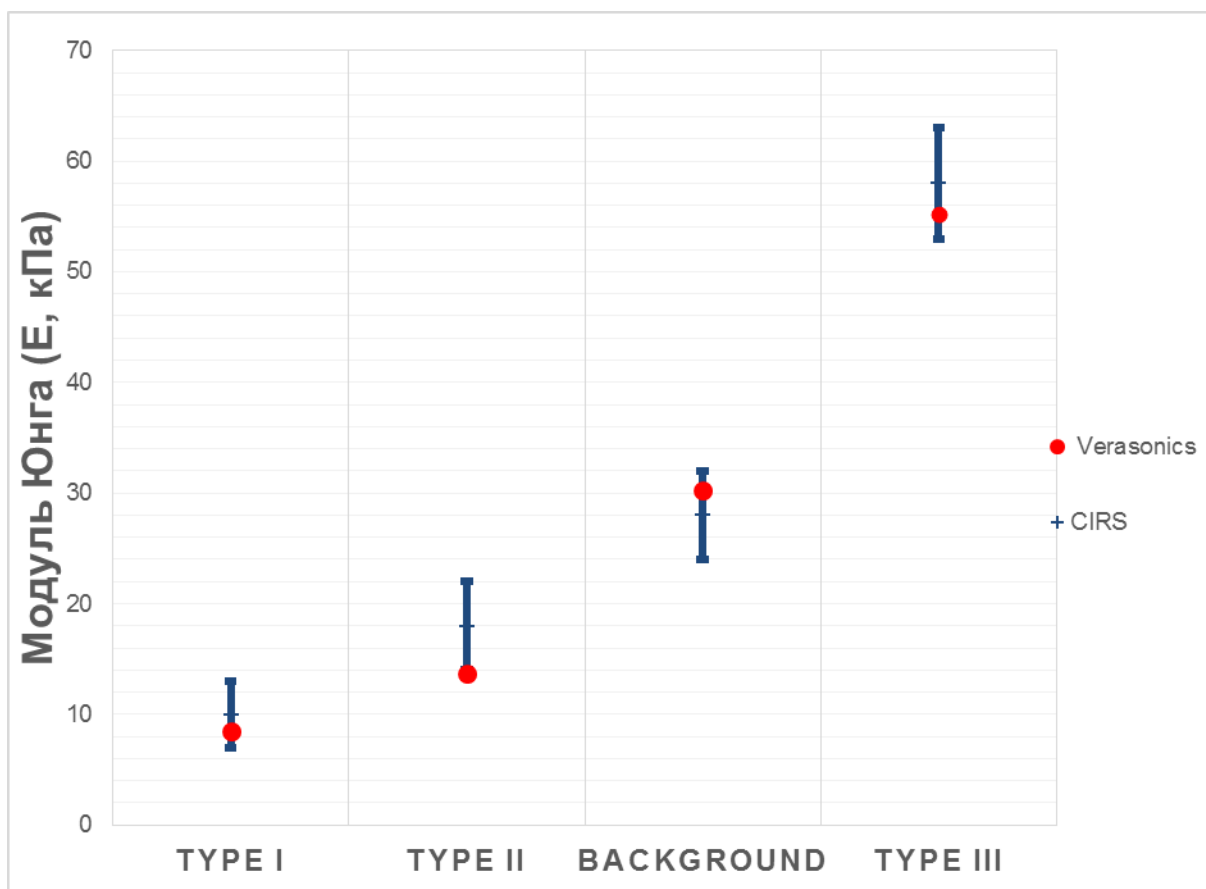


Рис. 3. Сравнение значений модуля Юнга, измеренных на Verasonics (красный маркер), и значений, указанных в фантомах CIRS с учетом допустимой погрешности (синие линии).

Работа выполнена при поддержке грантов РФФ (№ 14-12-00882) и РФФИ (15-42-02586).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. «Ультразвук в медицине». Под ред. К. Хилла, Дж. Бэмбера, Г. тер Хаар // ФИЗМАТЛИТ. 2008. 544 С.
2. A.P. Sarvazyan, O.V. Rudenko, S.D. Swanson, J.B. Fowlkes, S.Y. Emelianov // Ultrasound in Med. & Biol.. 1998. V. 24. N 9. P. 1419.

3. В.Г. Андреев, А.В. Шанин, И.Ю. Демин // Акуст.Журнал. 2014. Т. 60. № 6. С. 673.

4. А.И. Крайнов, С.Н. Гурбатов, И.Ю. Демин // Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2014. Вып. 4(1). С. 85.

## Методы профилирования шлама в нефтяных хранилищах

С.А. Цысарь<sup>1</sup>, В.Д. Свет<sup>2</sup>

<sup>1</sup> МГУ имени М.В. Ломоносова, физический факультет

<sup>2</sup> Акустический институт имени академика Н.Н. Андреева

[sergey@acs366.phys.msu.ru](mailto:sergey@acs366.phys.msu.ru)

Выбор методов для измерения профиля распределения осадка и его объема значительно зависит от ряда факторов, таких как тип осадка, планируемый метод очистки, технические ограничения и многих других. Технические факторы - это конструкция нефтяного резервуара, его размер и расположение. Также важными являются дополнительные факторы, определяемые особенностями эксплуатации хранилища: допустимо ли выведение хранилища из эксплуатации для профилирования, возможно ли нахождение на крыше резервуара операторов, вес оборудования и прочие. Очень часто акустическое профилирование не может быть применено для исследования некоторых хранилищ, хотя этот метод может измерять пространственное распределение донного шлама с очень высокой точностью [1]. В настоящей работе представлены основные методы профилирования шлама нефти и нефтепродуктов, и проведено сравнение по ряду факторов как на основе результатов численного моделирования, так и полученных экспериментальных данных.

Тип конструкции резервуара для конкретной жидкости выбирается в соответствии с температурой вспышки этого вещества. Как правило, в НПЗ, особенно для жидкого топлива, используются резервуары со стационарной крышей и резервуары с плавающей крышей. Ёмкости с фиксированной жёсткой крышей предназначены для жидкостей с очень высокой температурой вспышки (например, мазута, битума, воды и т.д.). Резервуары с плавающей крышей можно разделить на резервуары с внешней плавающей крышей (обычно называемых просто резервуарами с плавающей крышей) и внутренней плавающей крышей под основным жёстким куполом (Рис.1а, б). Танки с закрытой плавающей крышей используются для жидкостей с низкой температурой вспышки (нефтепродукты, в т.ч. бензины, этанол). Эти танки не что иное, как хранилища с жесткой внешней крышей, под которой внутренняя плавающая крыша перемещается вверх и вниз вместе с уровнем жидкости. Эта плавающая крыша захватывает пар с низкой температурой вспышки, не выпуская его в атмосферу. Танки с внешней плавающей крышей не имеют фиксированной крыши. Хранимые жидкости имеют среднюю температуру вспышки, в их числе керосин, дизельное топливо, нефть и др.

Нефтешламы являются стабильным многокомпонентным веществом, состоящим из компонентов нефти, минеральных добавок и воды. Причиной образования шлама является физико-химическое взаимодействие нефти или нефтепродуктов с кислородом, водой и механическими примесями в определенной среде.



Рис.1. Принципиальная конструкция хранилищ с плавающей крышей (а), с закрытой плавающей крышей (б) и с фиксированной крышей (в).

В природе не существует шламов с одинаковыми составами и свойствами, диапазон значений параметров очень широк. Тем не менее, для общей классификации можно выделить три основные группы. Первые два – земельный и демерсальный – образуются в месторождениях нефти. Третий тип – осадок в хранилищах, который образуется в результате транспортировки нефти и ее хранения в резервуарах различных конструкций. Этот тип осадка рассматривается в настоящей работе. Шлам в хранилищах затрудняет их эксплуатацию, поэтому требуются удобные и надежные методы профилирования. В настоящее время существует 4 технологии, чтобы обеспечить контроль и профилирование осадка:

- 1) ручное зондирование
- 2) измерения глубинной зависимости плотности и вязкости
- 3) акустическое профилирование
- 4) инфракрасная термография [2]

Первые три способа являются контактными технологиями, поскольку они требуют погружения устройства в нефтепродукт. Инфракрасная технология является бесконтактной технологией, так как при этом измеряется распределение температуры снаружи на стенках резервуара. Таким образом, первые три технологии требуют наличия точек входа на крышу танка, что создает определенные ограничения в их применении. Практически они могут быть использованы только для резервуаров с плавающей крышей и, в очень редких случаях, в танках с закрытой плавающей крышей. В то же время, термография не имеет никаких ограничений в отношении типа конструкции резервуара. Таковы основные различия этих технологий, и это они определяют целесообразность их использования.

Метод акустического профилирования шлама использует принцип многолучевой батиметрии морского дна с использованием фазированных антенных решёток с адаптацией для использования в нефтепродуктах. На рис. 2а представлена характерная эхо-импульсная яркостная картина. Отчётливо видны сильные отражения от опор плавающей крыши и стенок танка, являющиеся помехами. Следует ещё раз отметить, что акустическое профилирование позволяет оценить распределение поверхности шлама с очень высокой точностью, но только для резервуаров с открытой плавающей крышей. Для получения достоверной формы поверхности и ее объема требуется большое количество дополнительной информации и довольно сложная процедура пост-обработки (см. рис. 2б,в). Эта ситуация полностью аналогична акустической батиметрии дна океана, где получение грубых данных происходит достаточно быстро, но дальше строительство истинного профиля дна требует довольно длительной обработки первичных данных. Существенным недостатком методов акустического профилирования является невозможность использовать их в жидкостях с высокой вязкостью, то есть в тяжелой и особо тяжелой нефти, а также при наличии нескольких импедансных слоёв.

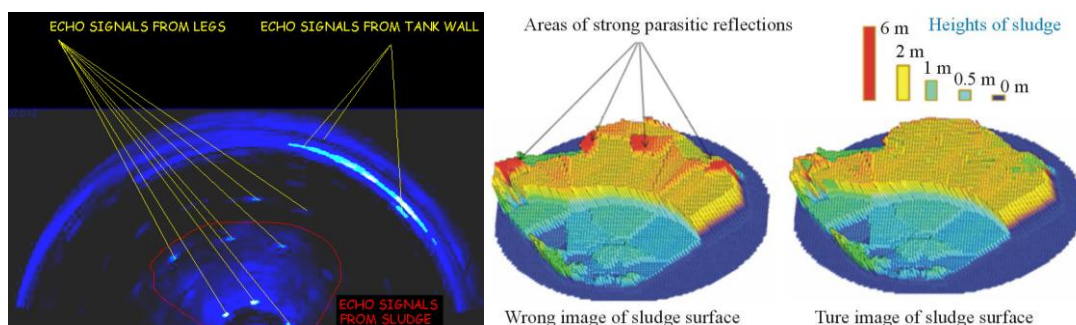


Рис.2. Эхо-импульсная яркостная картина в наклонной плоскости (а), 3D распределение без подавления помех (б) с подавлением помех (в).

На рис. 3 представлены экспериментальные результаты профилирования шлама в хранилище диаметром 65.8 м. Для измерений применялся вискозиметр ViscoDens VDM-250.2 (LEMIS USA Inc.). Использование контактных погружных устройств, которые измеряют плотность и вязкость продукта в резервуаре, является наиболее информативным. С их помощью можно обнаружить все слои в резервуаре, в том числе воду, но их использование возможно только в цистернах с плавающими крышами с достаточным количеством точек входа, причем гораздо большим, чем для акустического профилирования. Точность детектирования профиля шлама определяется не столько точностью прибора, сколько алгоритмом интер/экстраполяции и количеством точек входа. Оптимальные параметры в работе были определены с помощью численного моделирования, подробное рассмотрение которого ввиду ограничения объема статьи здесь не приводится.

Инфракрасная термография является наиболее удобным и быстрым методом обследования нефтяных резервуаров, и, самое главное, наименее затратным. Хотя его точность меньше точности контактных методов, он может быть использован для всех типов танков и для всех типов нефти или ее продуктов. И с этой точки зрения, этот метод является наиболее простым и эффективным. Кроме того, такие методы могут постоянно осуществляться на нефтеперерабатывающих заводах с заданной периодичностью, контролируя накопление шлама. Для иллюстрации действия метода на рис. 4 представлены результаты реконструкции профилей трёхслойной структуры нефти, водной эмульсии и осадка по данным эксперимента для двух танков. Измерения проводились с использованием ИК камеры Fluke VT04A Visual IR Thermometer (Fluke Corporation, USA).

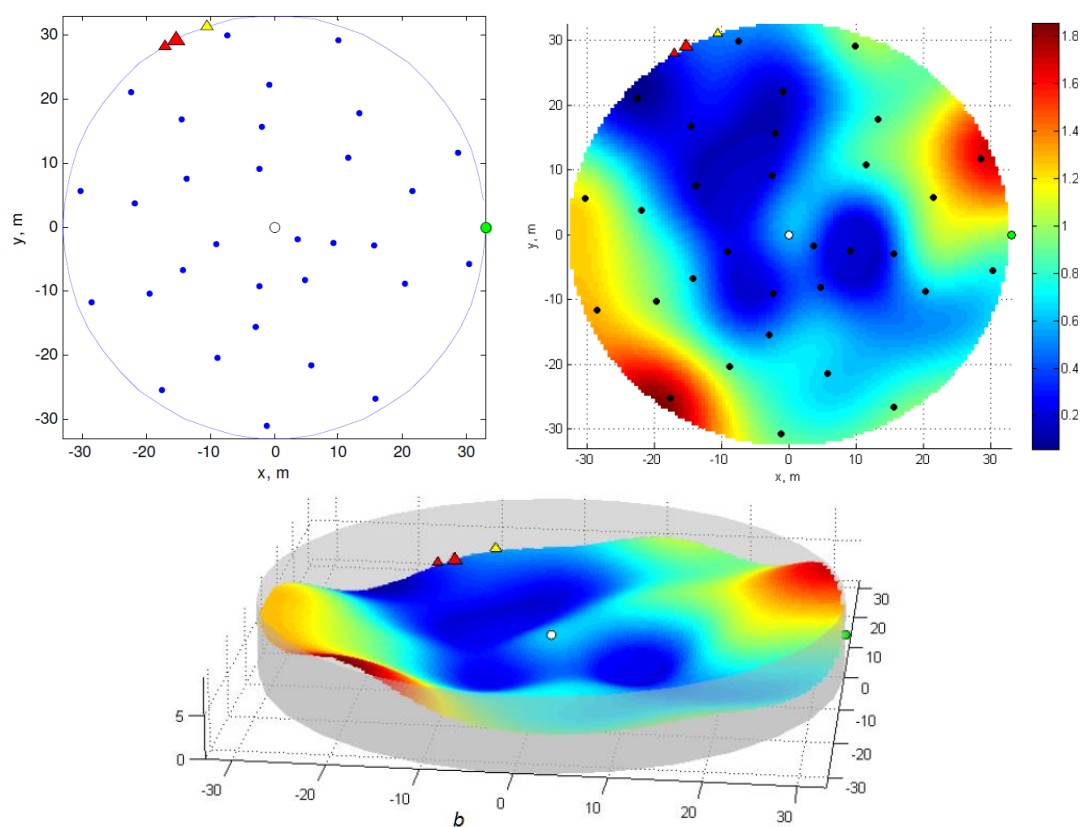


Рис 3. Расположение входных точек для измерений с помощью вискозиметра (а), полученное 2D распределение шлама (б), 3D распределение осадка, вертикальная ось с пятикратным увеличением.

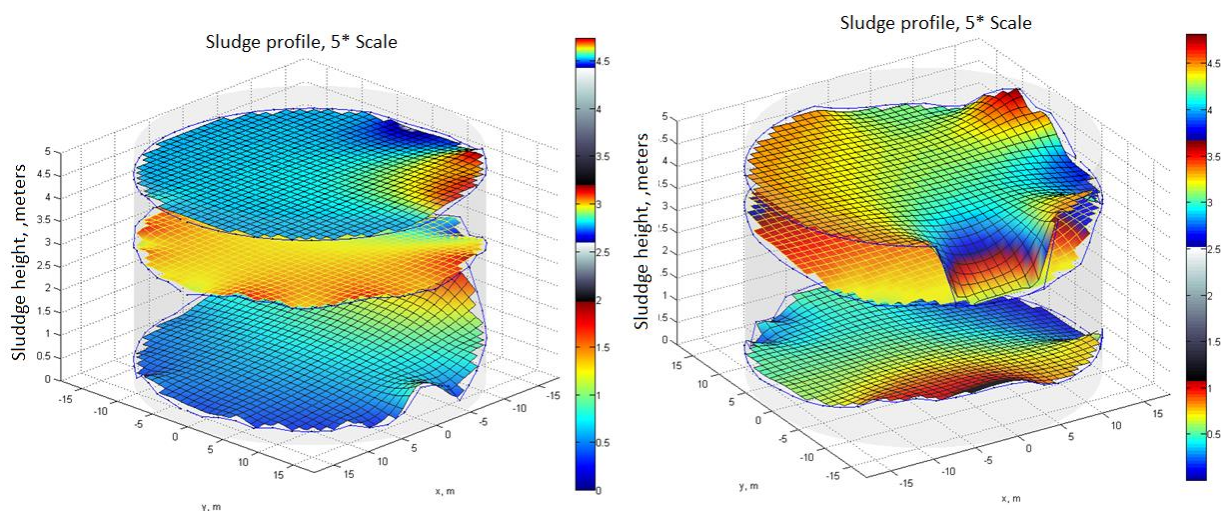


Рис.4. Реконструкция границ многослойной структуры нефти, водной эмульсии и шлама для двух танков.

Как следует из результатов исследования, в настоящее время нет единого универсального метода оценки объема шлама и его пространственного распределения, который, с одной стороны, смог бы обеспечить высокую точность, а с другой стороны, выполнять профилирование осадка в резервуарах любого типа. Выбор метода должен осуществляться исходя из требуемой точности и технологических ограничений. Также может применяться комбинирование существующих методов.

Авторы выражают благодарность персоналу ITS Asia Pacific Pte Ltd за их большую помощь и тяжелую работу в подготовке исходных данных, которые лежат в основе данной работы.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. M. Monteiro, V. Svet, D. Sandilands, “The Features of Acoustic Bathymetry of Sludge in Oil Storage Tanks” Open Journal of Acoustics 2014, 4, 39-54
2. Hellier et al. “Handbook of Nondestructive evaluation” McGraw Hill, 2001, 9.37-9.38



## Метод импедансной спектроскопии на электродах двухфазных систем Pb-Sn, Ag-Bi

М.А. Чоба, В.А. Сафонов, Ю.К. Алешин.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
[machoba@mail.ru](mailto:machoba@mail.ru), [aljoshin@physics.msu.ru](mailto:aljoshin@physics.msu.ru)

Поверхностный состав сплавов обычно существенно отличается от их объемного состава. «Движущие силы» и механизм процесса самопроизвольного избирательного концентрирования отдельных компонентов сплавов в поверхностном слое (поверхностная сегрегация) представляют очевидный интерес для теории и практики. С появлением современных методов исследования поверхности сплавов на границе с вакуумом, прежде всего, таких как РФЭС и Оже-электронной спектроскопии, это явление подробно исследуется во многих лабораториях мира. Существенно более сложными для экспериментальных и теоретических исследований механизма процесса поверхностной сегрегации являются границы раздела сплавов с растворами электролитов. При этом следует отметить, что именно эффекты поверхностной сегрегации на границе сплавов с электролитами определяют особенности их электрокаталитического и коррозионного поведения, а также являются ответственными за протекающие во времени процессы модификации структуры, электрических, оптических и других свойств поверхности металлов.

В представленном докладе дан краткий обзор результатов, демонстрирующих возможности методов импедансной спектроскопии и циклической вольтамперометрии при исследовании механизма и кинетики процессов поверхностной сегрегации, реализующихся на границе *in situ* обновляемой поверхности электродов из бинарных сплавов с растворами электролитов. В качестве объектов исследования выбраны двухфазные сплавы эвтектического типа (Sn-Pb, Ag-Bi). В данных системах после механического среза тонкого (~10 мкм) слоя металла, контактирующего с электролитом, имеют место "аномально" быстрые для твердых металлов процессы (с временами релаксации порядка десятков минут) обогащения поверхности электродов атомами поверхностно-активных компонентов сплавов (свинца и висмута соответственно). Показано, что скорость процессов сегрегации существенно зависит от электрохимических параметров исследуемых систем.

Один из наиболее существенных выводов проведенного исследования состоит в том, что, по сравнению с границей металл/вакуум, в условиях электрохимического эксперимента, изменяя потенциал электрода, можно изменять скорость, а в некоторых случаях, даже механизм и направление процесса поверхностной сегрегации.

Авторы благодарят Российский фонд фундаментальных исследований за финансовую поддержку работы (грант № 15-03-05243а).

## **Возможность восстановления параметров мелкого моря методами пассивной томографии по данным с донных гидрофонов**

В.А. Буров, С.Н. Сергеев, А.С. Шуруп, А.В. Щербина  
*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
физический факультет, кафедра акустики*  
[shurup@physics.msu.ru](mailto:shurup@physics.msu.ru)

Методы акустической томографии изначально были разработаны для мониторинга глубоководных океанических акваторий [1]. Однако в последнее время в связи с освоением акваторий шельфовых зон интерес представляет решение задачи мониторинга различных параметров мелкого моря. В отличие от глубокого океана, в шельфовой зоне дно сильно влияет на характеристики акустического поля, что делает необходимым знание параметров дна даже в тех случаях, когда эти параметры не представляют самостоятельного интереса, например, при мониторинге температурных неоднородностей водного слоя и течений. Таким образом, восстановление параметров дна мелкого моря в таких задачах может представлять как самостоятельный интерес, так и использоваться для последующего определения динамических характеристик водной среды. Использование томографических методов при этом обладает тем преимуществом по сравнению с широко используемыми автономными измерительными комплексами, что позволяет вести непрерывный мониторинг всего пространства акватории с характерными размерами порядка десятков и сотен километров в реальном времени. Причем томографическое восстановление параметров позволяет оценить не усредненные значения для данной трассы, а пространственное распределение неоднородностей по всей акватории. Вместе с тем, томографические методы имеют ряд недостатков. Эти недостатки связаны, с одной стороны, с необходимостью использования большого числа приемных элементов и необходимостью учета погрешностей, вносимых искривлением вертикальных антенн, а с другой стороны, они связаны с высокими затратами на размещение и обслуживание низкочастотных излучателей, необходимых для активной томографии.

Уменьшение числа приемных элементов и отказ от развертывания вертикальных приемных антенн могут быть реализованы путем использования одиночных гидрофонов. Так, в работе [2] описывается сравнительно дешевый и простой в реализации натурный эксперимент по акустической томографии, который был проведен на шельфе Черного моря. Возможности реализации аналогичного подхода, но на больших расстояниях, исследовались в работе [3]. В [3] была предложена схема мониторинга полей течений и температуры при использовании сложных сигналов, излучаемых и принимаемых одиночными донными системами, расположенными на расстояниях до 15 км в шельфовой зоне Японского моря. Упомянутые две экспериментальные работы свидетельствуют о практической возможности реализации сравнительно дешевой акустической томографии мелкого моря с помощью донных или донно-поверхностных станций.

Важным этапом развития методов акустической томографии мелкого моря, основанных на использовании одиночных донных станций, может стать переход от использования активного излучения к пассивным методам. Известно [4], что взаимная функция корреляции шумовых сигналов, зарегистрированных в двух точках акватории, связана с соответствующей двухточечной функцией Грина. Максимумы взаимной функции корреляции шумов позволяют получить оценку времен распространения сигналов между точками наблюдения, как если бы в одной точке этот сигнал был излучен, а в другой принят, что может быть использовано в различных акустических

приложениях. Важным параметром, определяющим возможность успешной реализации такого пассивного метода, является выбор частотного диапазона, в котором осуществляется корреляционная обработка шумовых сигналов.

Работа [5] показала на натурном эксперименте принципиальную возможность использования метода пассивной томографии для восстановления параметров мелкого моря. Однако скудность экспериментальных данных не позволила дать однозначное толкование некоторым полученным в работе [5] результатам, поскольку проведенный эксперимент не был оптимизирован под задачу пассивной томографии. По этой причине становится актуальным численный эксперимент, которому и посвящена представляемая работа. Данные численного эксперимента обрабатывались по той же схеме, что и данные реального эксперимента [5].

При постановке задачи предполагается, что на дне исследуемой акватории на расстоянии  $R$  друг от друга расположены два гидрофона, принимающие шумовые сигналы (рис. 1). В качестве модели мелкого моря была выбрана модель волновода Пекериса с глубиной водного слоя  $H = 200$  м и дном в виде полупространства. Скорость звука и плотность дна составляли соответственно  $c_1^{\text{bottom}} = 2400$  м · с<sup>-1</sup> и  $\rho_1^{\text{bottom}} = 1300$  кг · м<sup>-3</sup>. Жидкий слой считался изоскоростным:  $c_0 = 1450$  м · с<sup>-1</sup>,  $\rho_0 = 1000$  кг · м<sup>-3</sup>. Приведенные величины выбирались из диапазона характерных параметров для акватории, в которой проводились экспериментальные исследования в работе [5]. Значения параметров  $H$ ,  $c_1^{\text{bottom}}$ ,  $\rho_1^{\text{bottom}}$ ,  $c_0$ ,  $\rho_0$  в данном исследовании предполагались постоянными по всей акватории, т.е. для всех значений координаты  $\vec{r}$ . Для простоты полагалось, что поглощение в дне отсутствует.

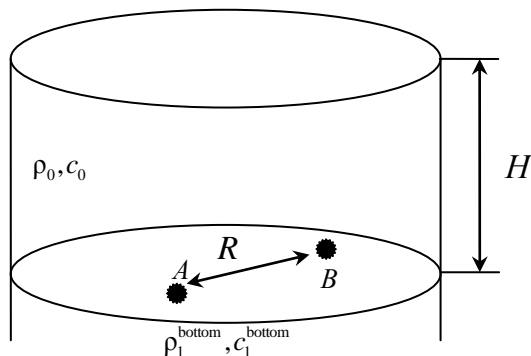


Рис. 1. Модель исследуемой акватории. В точках, обозначенных буквами  $A$  и  $B$ , расположены одиночные донные гидрофоны.

Рассматривалось разложение естественного шумового поля акватории  $\Psi(\vec{r}, z, t)$  по сумме мод с профилями  $\psi_m(z)$ , где  $m$  – номер моды. Основной вклад во взаимной функции корреляции шумовых полей дают моды, прошедшие через оба гидрофона и порожденные, например, дальним судоходством или ветровым волнением. Поэтому при моделировании будет полагаться, что поле, принятое на гидрофоне  $A$ , представляет собой сумму мод  $\Psi(\vec{r}_A, z = H, t) = \sum_m a_m(\vec{r}_A, t) \psi_m(z = H)$ , где  $\vec{r}_A$  – радиус-вектор точки, в которой находится гидрофон  $A$ . Величина  $a_m(\vec{r}, t)$  будет называться сигналом отдельной моды, или модовым сигналом. Выбор глубины  $z = H$  определяется тем, что поле принимается одиночными донными гидрофонами. Аналогично записывается выражение для поля, принятого гидрофоном  $B$ . Распространение шумового сигнала моделировалось в частотном диапазоне от 5 до

15 Гц. В этом диапазоне частот в акватории с рассматриваемыми характеристиками распространяются первые 4 моды. Учет распространения модового сигнала  $a_m(\vec{r}, t)$  в акватории сводился к введению дополнительного фазового набега, определяющегося фазовой скоростью моды в заданной акватории, для каждой частотной компоненты исходного спектра  $a_m(\vec{r}_A, f)$ .

Ставилась задача определения характера зависимости возмущения корреляционных характеристик шумового сигнала от возмущений параметров мелкого моря. В качестве входных данных задачи рассматривалась взаимная функция корреляции шумовых сигналов для этой пары гидрофонов.

Спектр исходного сигнала  $\Psi(\vec{r}_A, H, f)$  рассчитывался как сумма сигналов различных мод после фильтрации  $a_m(\vec{r}_A, f)$  с весами, соответствующими значению моды на дне:  $\Psi(\vec{r}_A, H, f) = C \sum_m a_m(\vec{r}_A, f) \sin(H \sqrt{k_0^2 - \xi_m^2(f)})$ . Спектр итогового сигнала  $\Psi(\vec{r}_B, H, f)$  складывался из спектров сигналов различных мод после распространения из начальной точки в конечную  $a_m(\vec{r}_B, f)$  с аналогично введенными весами:  $\Psi(\vec{r}_B, H, f) = C \sum_m a_m(\vec{r}_B, f) \sin(H \sqrt{k_0^2 - \xi_m^2(f)})$ . Алгоритм моделирования повторялся для набора из  $I = 300$  случайных реализаций, что соответствовало накоплению сигнала в натурном эксперименте [5]. С помощью спектров  $\Psi(\vec{r}_A, H, f)$  и  $\Psi(\vec{r}_B, H, f)$ , полученных для каждой из реализаций, рассчитывалась корреляционная функция, нормированная на количество реализаций:

$$K(\tau) = \int e^{-i2\pi f \tau} \sum_i^I \Psi(\vec{r}_A, H, f) \Psi^*(\vec{r}_B, H, f) df / I.$$

Здесь звездочкой обозначено комплексное сопряжение. Для полученной корреляционной функции строилась спектрограмма  $K_{sp}(\tau', f)$ :

$$K_{sp}(\tau', f) = \int K(\tau) h(\tau - \tau') \exp(i 2\pi f \tau) d\tau,$$

где функция  $h(\tau - \tau')$  представляет собой окно Хэмминга длительностью 0.8 с (с центром в точке  $\tau = \tau'$ ); сдвиг по временной задержке  $\tau'$  осуществлялся с шагом 0.15 с.

Для реализации пассивной томографической схемы представляют интерес области изменений параметров среды, в которых возмущение величин, выступающих в качестве входных данных при решении томографической задачи, линейно зависит от возмущений этих параметров. Это связано с тем, что, построив предварительно такую зависимость для заданного “единичного” возмущения, можно установить взаимнооднозначную связь между возмущением обрабатываемых данных и силой реального неизвестного возмущения. Такая взаимнооднозначная связь позволяет, в итоге, восстановить искомое возмущение характеристик волновода. На рис. 2 представлена зависимость значения частоты  $f_{max}$ , при которой имеет место максимум модуля спектрограммы  $\max_{\tau', f} |K_{sp}(\tau', f)| \equiv K_{sp}(\tau'_{max}, f_{max})$ , от толщины водного слоя  $H$ .

Для получения этой зависимости рассматривался волновод с параметрами, приведенными при постановке задачи. Распространение шумовых сигналов моделировалось при вариациях глубины  $H$  от 195 м до 200 м. Для полученных шумовых сигналов проводилась корреляционная обработка, в результате которой

определялись значения  $f_{\max}$ . Таким образом, из рис. 2 можно сделать вывод о наличии взаимнооднозначной зависимости, близкой к линейной, между значениями глубины волновода  $H$  и частотой  $f_{\max}$ , что говорит в пользу возможности построения схемы акустической томографии мелкого моря на основе входных данных в виде значений  $f_{\max}$  для разных пар гидрофонов и в разных частотных диапазонах.

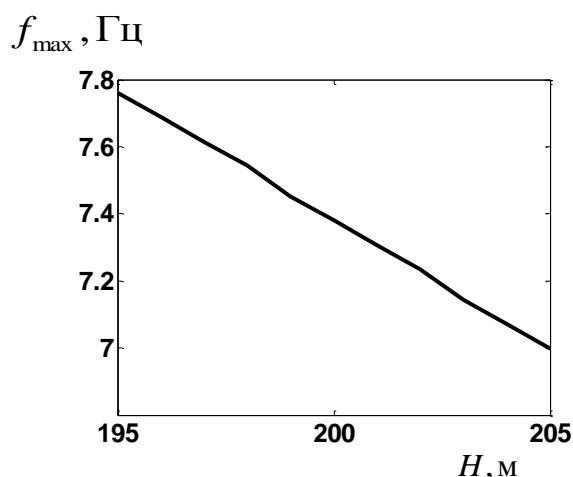


Рис. 2. Зависимость частоты максимума модельной спектрограммы корреляционной функции  $f_{\max}$  от толщины водного слоя  $H$ .

Следует отметить, что результаты, полученные в настоящей работе для пассивного режима, согласуются с результатами, полученными в случае активного излучения в работе [6], где было показано, что анализ частотных смещений интерференционной структуры низкочастотного звукового поля может быть использован для мониторинга изменчивости характеристик мелкого моря, вызванных, в том числе, приливно-отливными процессами.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента РФ № НШ-283.2014.2, грантов РФФИ № 13-02-00632, № 15-05-01183 и № 13-01-12469 офи\_м2.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. W. Munk, P. Worcester, C. Wunsch "Ocean Acoustic Tomography." Cambridge University Press, 1995.
2. В.В. Гончаров и др. // Акуст. журн., 2012. Т. 58. N 5. С. 614.
3. В.А. Акуличев и др. // Акуст. журн., 2002. Т. 48. N 1. С. 5.
4. R.L. Weaver, O.I. Lobkis // Phys. Rev. Lett., 2001. V. 87. 134301.
5. В.А. Буров и др. // Акуст. журн., 2014. Т. 60. N 6. С. 611.
6. В.М. Кузькин и др. // Акуст. журн., 2011. Т. 57. N 3. С. 387.