

СЕКЦИЯ 11. СПЕКТРОСКОПИЯ, ДИАГНОСТИКА И ТОМОГРАФИЯ

| | |
|--|----|
| Исследование рассеяния волн миллиметрового диапазона на порошках аминокислот <i>М. Г. Акатьева</i> | 3 |
| Применение методов импедансной спектроскопии и Оже-спектроскопии для изучения особенностей кинетики поверхностных процессов бинарных сплавов <i>Ю.К. Алёшин, М.А. Братенков, М.А. Чоба</i> | 7 |
| Четырехфотонная лазерная спектроскопия водных растворов биомолекул и наночастиц в микроволновом диапазоне частот <i>А.Ф. Бункин</i> | 12 |
| Пассивная томография океана при неизвестном расположении антенн <i>В.А. Буров, А.В. Прудникова, С.Н. Сергеев, А.С. Шуруп</i> | 14 |
| Магнитно-резонансная термометрия модельных объектов <i>Волков А.А., Никифоров В.Н., Пирогов Ю.А.</i> | 19 |
| Двухзонная БКШ-модель сверхпроводимости в высокотемпературном сверхпроводнике $Ba(Fe_{0.9}Co_{0.1})_2As_2$ <i>А.А. Воронков, Е.Г. Максимов, А.Е. Каракозов, Б.П. Горшунов, С.С. Жуков, Е.С. Жукова, М. Dressel, D. Wu, S. Haindl, K. Iida</i> | 20 |
| Влияние низкотемпературного отжига на спектр ФМР в гранулированных наноструктурах $(CoFeB)+(SiO_2)$ <i>С. А. Вызулин, Е.В. Лебедева, Н.Е. Сырьев, М.С. Шлапаков</i> | 22 |
| Электронные и магнитные оптические свойства тонких пленок $La_{1-x}Ca_xMnO_3$ ($0.5 < x < 0.7$) и $(La_{1-y}Pr_y)_{0.33}Ca_{0.66}MnO_3$ ($0 < y < 1$) на терагерцовых частотах <i>Л.С. Кадыров, А.А. Воронков, Е.С. Жукова, А.А. Борис, Б.П. Горшунов, S. Hühn, F. Fischgrabe, V. Moshnyaga, K. Samwer, M. Dressel</i> | 26 |
| Исследование спин-решеточной ядерной магнитной релаксации воды и водных растворов под воздействием низкочастотного электромагнитного поля <i>Д.В. Кашаев, Н.С. Васильев, М.Г. Барышев</i> | 28 |
| Методы квазистатической электромагнитной томографии в новых системах обеспечения безопасности <i>А.В. Корженевский</i> | 32 |

| | |
|--|----|
| ТГц-ДИК спектроскопия эпитаксиальных слоев $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ <i>П.С.Королёв, Е. С. Жукова, Н. П. Аксенов, Б. П. Горшунов, Ю. Г. Селиванов, И.И. Засавицкий, D. Wu, M. Dressel</i> | 34 |
| Быстрый способ снятия изотерм сорбции водяного пара концентрометрическим методом <i>Д.М. Курмашева, П.О. Капралов, В.Г. Артёмов</i> | 36 |
| Пространственное разделение спин-изомеров воды в порах сорбента. <i>А.А. Лескин, В.Г. Артёмов, П.О. Капралов, В.И. Тихонов, А.А. Волков</i> | 39 |
| Исследование молекулярной структуры электролита на основе раствора LiClO_4–этилен карбонат методом ядерного магнитного резонанса <i>Д.А. Лысак, А.А. Маринин, С.С. Джимамак</i> | 42 |
| Спектроскопия диэлектриков с потерями в области низких и микроволновых частот <i>А.К. Малышкин, Ю.А. Пирогов</i> | 47 |
| Решение обратных задач в терагерцовой спектроскопии <i>Е.В. Михайлов, А.В. Козарь, А.Ф. Королев</i> | 52 |
| Обмен сигналами между биообъектами на принципе модуляции СВЧ несущей – когерентного излучения ОН(1.7 ГГц) и орто-H_2O(22.3 ГГц) космических мазеров <i>С. М. Першин</i> | 54 |
| Радиовидение, томография и молекулярная визуализация <i>Ю.А. Пирогов</i> | 58 |
| Системы искусственного осязания. Оптимальное кодирование полей <i>В.А. Садовничий, В.А. Винокуров</i> | 60 |
| О вычислении потенциала возмущенных дискретных операторов по их спектру <i>А.И. Седов</i> | 62 |

ИССЛЕДОВАНИЕ РАССЕЯНИЯ ВОЛН МИЛЛИМЕТРОВОГО ДИАПАЗОНА НА ПОРОШКАХ АМИНОКИСЛОТ

М. Г. Акатьева^{1,2}

¹ *Институт радиотехники и электроники РАН (филиал в г. Фрязино)*

² *МГТУ им. Н. Э. Баумана, кафедра физики*

m-akt-ne@mail.ru

В настоящее время большое значение придаётся методам неразрушающего контроля состава жидких и твёрдых диэлектриков в миллиметровом диапазоне длин электромагнитных волн. В частности, эти методы позволяют исследовать состав жидких и твёрдых диэлектриков в реальном времени. Подобным образом можно исследовать многие сложные органические молекулы, их превращения и взаимодействие друг с другом. К таким молекулам относятся аминокислоты, которые можно исследовать как в виде порошков, так и в виде растворов различной концентрации. Данный неразрушающий метод исследования может найти важное применение, в первую очередь в медицине и в фармакологии. [1]

Аминокислоты – органические соединения, содержащие карбоксильные и аминные группы. Эти вещества способны образовывать белки, в биосинтезе белка в организме участвуют 20 стандартных аминокислот и, в некоторых случаях, нестандартные аминокислоты. 8 из стандартных аминокислот являются незаменимыми, т. е. организм не может синтезировать их из предшественников, либо синтезирует в недостаточном количестве, а 12 – заменимыми. Нестандартные аминокислоты являются производными стандартных.

На сегодняшний день данные о взаимодействии излучения с молекулами аминокислот заканчиваются в инфракрасном диапазоне длин волн. [2] Поэтому проводимые исследования спектров аминокислот в миллиметровом диапазоне длин волн являются важным дополнением имеющихся данных. Исследуя спектры порошков аминокислот, можно найти их комплексную диэлектрическую проницаемость, а исследуя растворы этих веществ, можно в реальном времени отслеживать изменение их концентрации и свойства раствора (кислотные или основные).

В проведённой серии экспериментов измерялись коэффициенты отражения и прохождения по мощности в порошкообразных аминокислотах в диапазоне частот от 81 до 120 ГГц. По полученным результатам рассчитывались диэлектрическую проницаемость вещества. В дальнейшем, помимо порошков, таким образом можно изучать растворы аминокислот различного состава и концентрации.

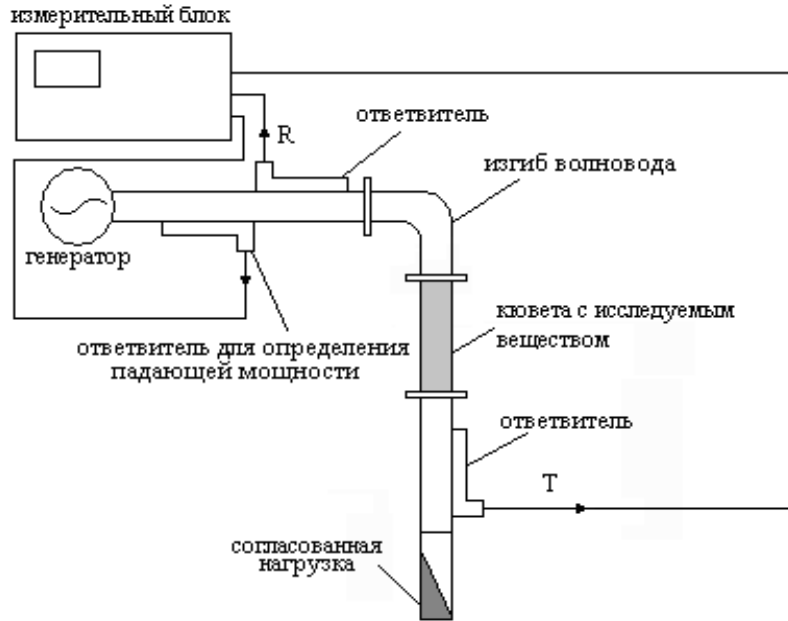


Рис. 1. Схема экспериментальной установки.

Измерения проводились на установке, схема которой показана на рис. 1. Внутри волноводной секции находился исследуемый порошок. Нижняя часть кюветы заклеена плёнкой, препятствующей высыпанию порошка. Верхняя часть при вертикальном расположении кюветы, показанном на рисунке, не требует закрытия плёнкой, поэтому отражение происходит непосредственно от границы «воздух – порошок». Вследствие этого повышается точность наблюдаемой интерференционной картины. В процессе измерений необходимо было найти минимумы модуля коэффициента отражения по мощности и соответствующие этим минимумам частоты. На рисунке 2 показан вид интерференционной картины для одного из исследуемых порошков (фенилаланин).

По полученным данным легко можно найти действительную и мнимую части комплексной диэлектрической проницаемости порошков.

$$\varepsilon^* = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 \quad (1)$$

Действительную часть можно оценить из соотношений

$$\beta^2 = k^2 \varepsilon_1 - \pi^2 a^2, \quad (2)$$

где:

$a = 2,4 \text{ мм}$ – размер широкой стенки волновода,

$$\beta = 2\pi/\lambda,$$

$$k = 2\pi f/c,$$

$c/f = \lambda_0$ – длина волны в свободном пространстве.

При рассмотрении стоячей волны в волноводе:

$$\lambda/2 = \pi/\beta \quad (3)$$

$\Delta\beta = \pi$ – при переходе между двумя соседними минимумами.

Мнимая часть комплексной диэлектрической проницаемости находится из значения ослабления в волноводе:

$$\Gamma = \frac{|\beta_0 - \beta|}{|\beta_0 + \beta|} \quad (4)$$

β_0 - постоянная распространения волны в незаполненном волноводе.

Значение ослабления связано с коэффициентом прохождения по формуле:

$$T_{\min, \max} = \frac{(1 - \Gamma)^2 \exp(-2\alpha l)}{(1 \pm \Gamma \exp(-2\alpha l))} \quad (5)$$

В таблице 1 представлены рассчитанные с помощью формул 1 – 5 результаты для некоторых из исследованных веществ.

Таблица 1.

| Вещество | ϵ_1 | ϵ_2 |
|-------------|--------------|--------------|
| Фенилаланин | 1,22 | 0,006 |
| Аспарагин | 1,27 | 0,075 |
| Лизин | 1,41 | 0,012 |

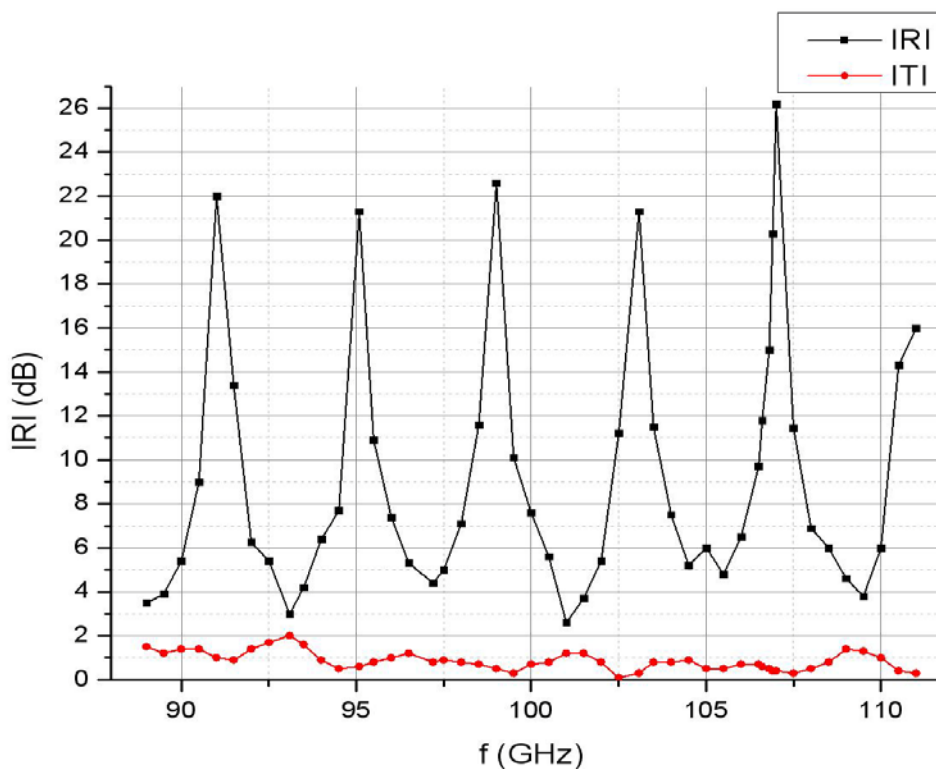


Рис. 2. Зависимость модулей коэффициентов отражения и прохождения от частоты для порошка фенилаланина.

ЛИТЕРАТУРА

1. Я. Ю. Ахадов, “Диэлектрические параметры чистых жидкостей”, М., Издательство МАИ, 1999.
2. Поплавко Ю. М. “Физика диэлектриков”. – Киев: Вища школа. Головное изд-во, 1980.
3. Yu. Feldman et al. // Physical Review Letters 100, 12802 (2008)
4. Я.Ю. Ахадов “Диэлектрические свойства бинарных растворов” М., «Наука», 1977.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ИМПЕДАНСНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ И ОЖЕ-СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ОСОБЕННОСТЕЙ КИНЕТИКИ ПОВЕРХНОСТНЫХ ПРОЦЕССОВ БИНАРНЫХ СПЛАВОВ

Ю.К. Алёшин, М.А. Братенков, М.А. Чоба
МГУ им. М.В.Ломоносова

Электрохимические исследования поверхностной сегрегации на границе сплавов с растворами электролитов представляют собой относительно новое направление в электрохимии. При этом надо отметить, что первые работы в этом направлении были выполнены более 40 лет назад. В них, используя импедансный метод, на качественном уровне было продемонстрировано, что поверхностные составы сплавов Sn-Pb и Au-Ag на границе с растворами электролитов существенно отличаются от объемных и обогащены атомами Pb и Ag, соответственно. Дальше эти исследования практически не развивались - это было связано с отсутствием методов исследования, которые позволяли бы получать хорошо воспроизводимые результаты.

Прогресс в исследованиях поверхностной сегрегации на границе сплавов с растворами электролитов был связан с развитием методики электрохимических измерений на электродах, поверхность которых подвергается, не прерывая поляризации, механическому обновлению (срезом тонкого слоя металла). Использование данной методики позволило решить две важные задачи:

1. Создавать в результате обновления начальное состояние поверхности электрода, при котором его объемный и поверхностный составы идентичны.
2. Исключить контакт электрода с атмосферой, в результате которого обычно происходит неконтролируемое загрязнение и окисление поверхности металла.

Была поставлена задача: экспериментально исследовать процесс поверхностной сегрегации с помощью метода импедансной спектроскопии на обновляемых электродах из сплава Ag-Bi (эвтектический сплав) с малым содержанием Bi (~3%) и разработать модель процесса.

Нами проведены измерения на чистом серебряном электроде с целью определения диапазона частот, в котором отличие статической и измеренной ёмкости минимально.

Установка представляет собой ячейку с обновляемым Ag-Vi электродом, вторичным электродом и электродом сравнения. Обновление поверхностного слоя электрода проводится методом срезания тонкого слоя электрода сапфировым резцом. Блок-схема установки представлена на рисунке 1.

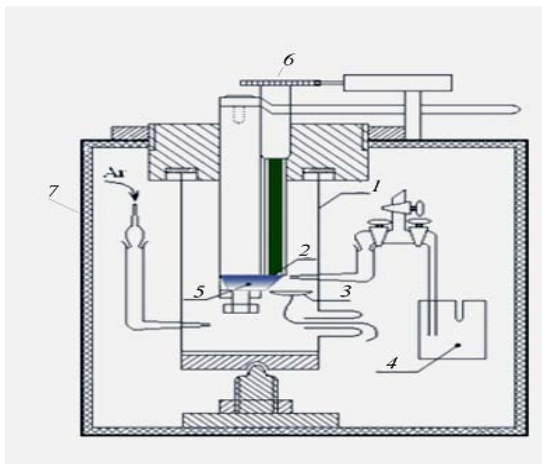


Рис. 1 1 - кварцевая ячейка, 2 - рабочий электрод, 3 - выходной электрод, 4 - к электроду сравнения, 5 - сапфировый резец, 6. - к микрометру, 7 - защитный ящик.

Методом импедансной спектроскопии проводились измерения ёмкости двойного электрического слоя для серебряного электрода в зависимости от напряжения на различных частотах. Экспериментальные данные представлены на рис 2. Так же было промоделирована трёхмерная поверхность на основе экспериментальных данных (рис. 3).

По результатам измерений видно стабильное изменение ёмкости в диапазоне частот 100Hz-1000Hz. Это позволяет измерять статическую ёмкость, не учитывая индуктивность, вносимую частотной зависимостью. В этом диапазоне выбрана рабочая частота для работы с электродом Ag-Vi.

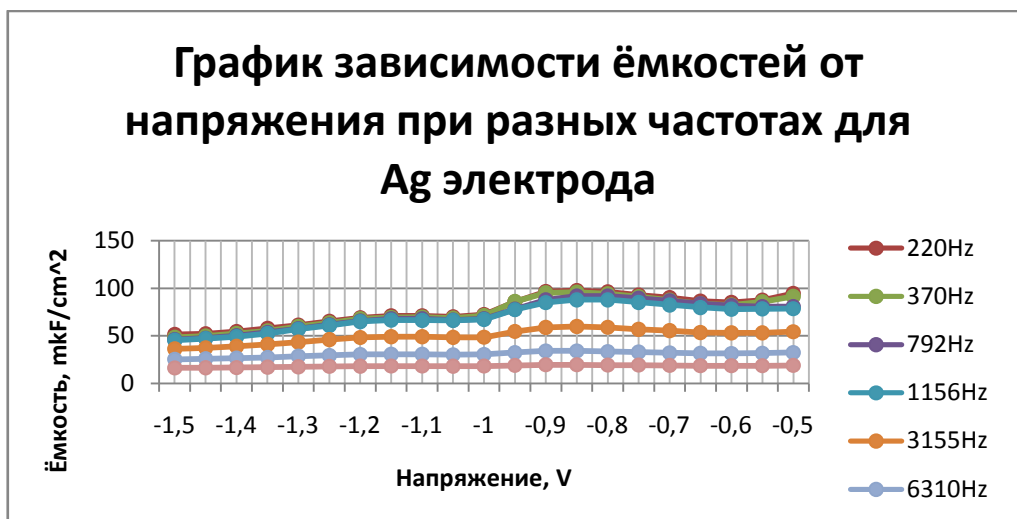


Рис. 2

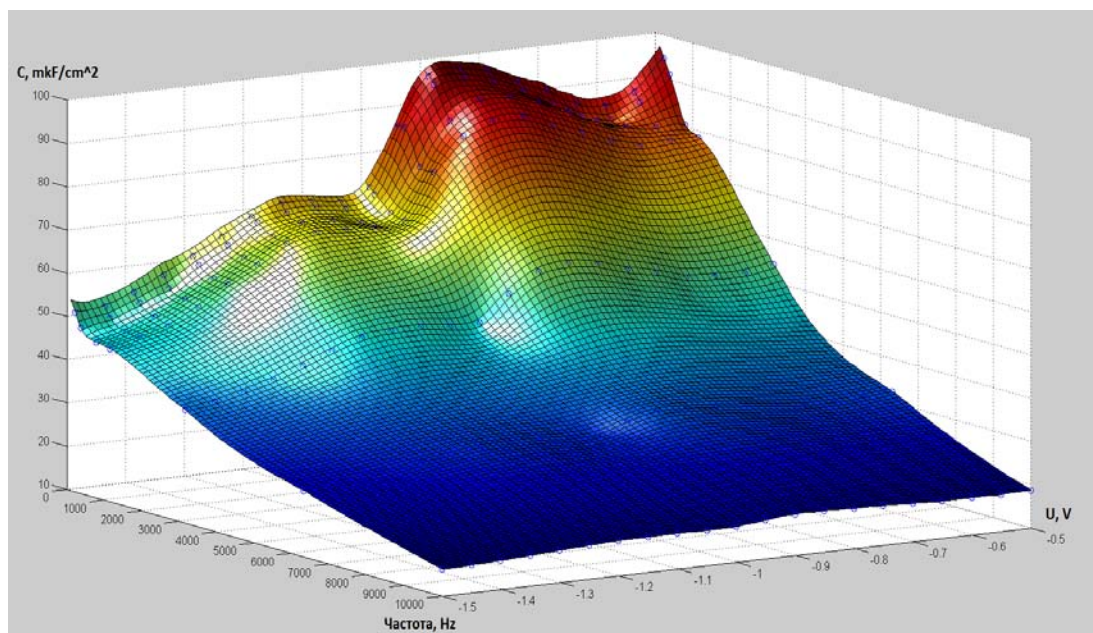


Рис. 3

Методом импедансной спектроскопии было обнаружено изменение ёмкости двойного электрического слоя с течением времени после среза для электрода Ag-Bi (1 wt. % Bi) в 0.05 M NaF. Как видно на рис. 4 ёмкостные зависимости преобразуются от характерных для Ag к характерным для Bi с течением времени. На основе этих данных сделан вывод, что Bi является поверхностно более активным веществом.

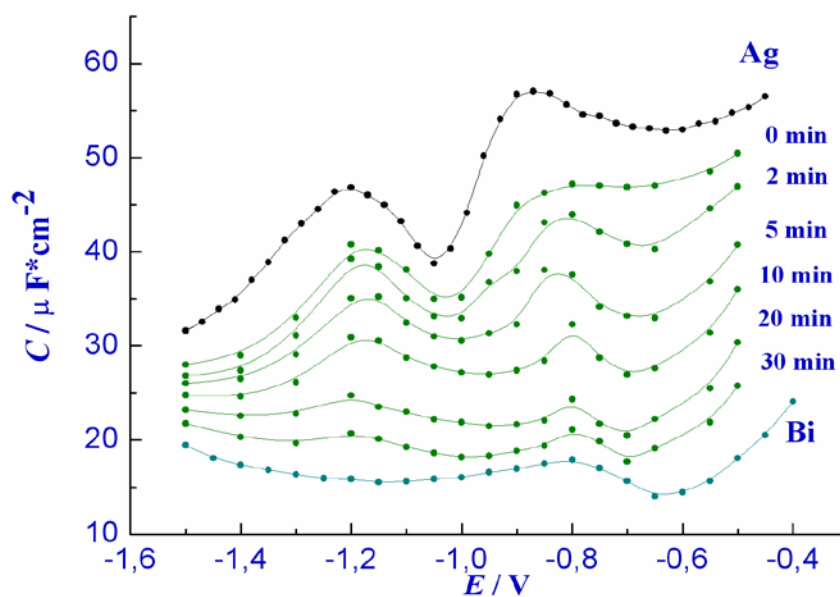


Рис. 4

Методом Оже-электронной спектроскопии исследована поверхность электрода Ag-Bi. По результатам Ожэ-спектроскопии видно как с течением времени после обновления поверхности концентрация Bi на поверхности увеличивается.

Результаты Ожэ-спектроскопии представлены на рис. 5 и 6.

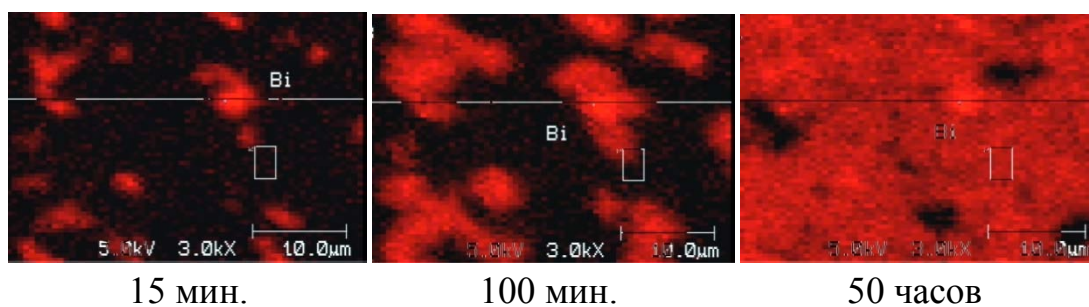
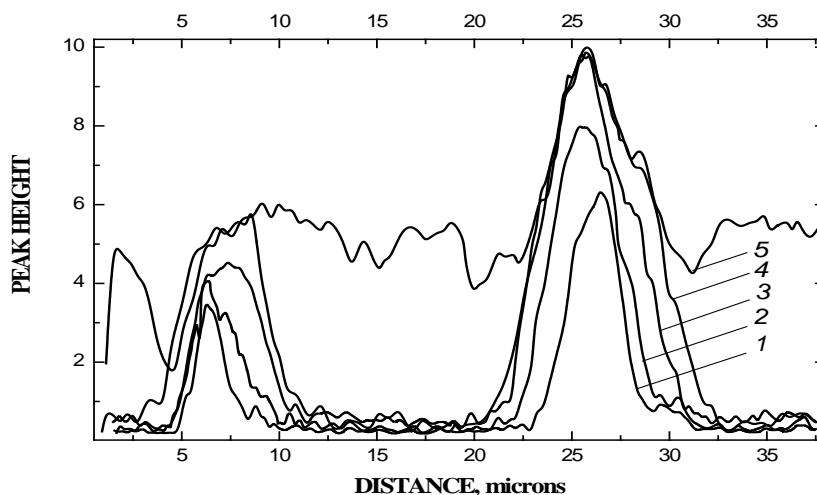


Рис. 5



1 – 5 2 – 13 3 – 23 4 – 40 5 – 60
мин. мин. мин. мин. часов

Рис.6

Метод импедансной спектроскопии, подержанный методами визуализации (Оже-электронная спектроскопия, и в дальнейшем атомно-силовая микроскопия), является информативным в задачах исследования поведения поверхности бинарных металлических сплавов эвтектического типа. Дальнейшее развитие этой методики позволит исследовать структурные изменения поверхности электродов в электролитах.

Работа поддержана грантом РФФИ № 09-03-00846-а.

ЧЕТЫРЕХФОТОННАЯ ЛАЗЕРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ БИМОЛЕКУЛ И НАНОЧАСТИЦ В МИКРОВОЛНОВОМ ДИАПАЗОНЕ ЧАСТОТ

А.Ф.Бункин

Научный центр волновых исследований Института общей физики им. А.М.Прохорова, РАН, Москва, 119991, ул. Вавилова, 38.

abunkin@rambler.ru

Спектроскопия четырехфотонного рассеяния (ЧФР) была применена для регистрации вращательных резонансов молекул H_2O и H_2O_2 в водных растворах белков, ДНК, денатурированной ДНК и углеродных нанотрубок в диапазоне $\pm 10 \text{ см}^{-1}$ со спектральным разрешением 3 ГГц. В этих спектрах зарегистрированы резонансы вращательного спектра молекулы H_2O_2 , а также орто- и пара-изомеров молекулы H_2O . Обнаружен значительный рост резонансного вклада вращательных переходов этих молекул в растворе по сравнению с дистиллированной водой. Этот факт может быть интерпретирован как проявление специфических свойств гидратного слоя на границе воды с биомолекулами и углеродными нанотрубками. Анализ спектров ЧФР показал, что концентрация молекул H_2O_2 в гидратном слое молекулы ДНК выросла в 3 раза после денатурации. Были получены спектры ЧФР водных растворов белка α -химотрипсин в спектральном диапазоне $\pm 7 \text{ см}^{-1}$ и концентрациях от 0 до 20 мг/см³. Обнаружено, что скорость гиперзвука водного раствора белка, измеряемая по сдвигу компонент Мандельштама-Бриллюэна (МБ) в спектре рассеяния, имеет кубическую зависимость от концентрации и достигает 3000 м/с при 20 мг/см³.

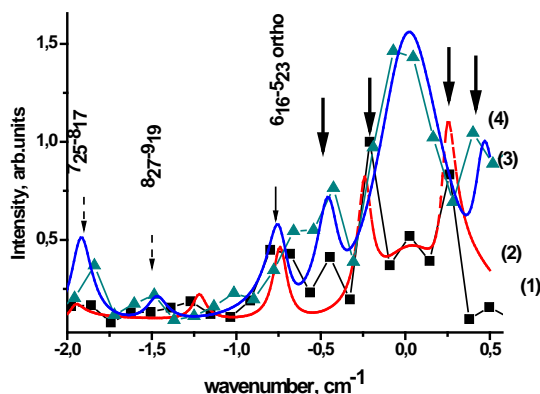


Рис. 1. Экспериментальный (1) (квадраты,) и расчетный (2) ЧФР спектры водного раствора ДНК (15 мг/см³), а также экспериментальный (3) (треугольники) и расчетный (4) (сплошная кривая) спектры ЧФР водного раствора

денатурированной ДНК при той же концентрации. Стрелки обозначают вращательные резонансы молекул H_2O_2 , H_2O , и резонансы МБ.

ПАССИВНАЯ ТОМОГРАФИЯ ОКЕАНА ПРИ НЕИЗВЕСТНОМ РАСПОЛОЖЕНИИ АНТЕНН

В.А. Буров, А.В. Прудникова, С.Н. Сергеев, А.С. Шуруп
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Физический
факультет, кафедра акустики
burov@phys.msu.ru

Мировой океан играет определяющую роль в формировании климата на Земле поэтому, требуются методы, позволяющие осуществить оперативный мониторинг как быстроразвивающихся явлений в океане (возникновение ураганов), так и медленных глобальных процессов (например, изменение курса Гольфстрима). На сегодняшний день только акустическая томография океана (АТО) позволяет получить оперативную информацию о пространственно-временной изменчивости океанических акваторий с размерами в сотни и тысячи километров. Данная работа является продолжением цикла работ [1–3], посвященных разработке новых перспективных схем АТО. Наиболее актуальная задача на сегодняшний день – разработка пассивных схем томографии, не требующих использования активного излучения.

Известно [4], что функция взаимной когерентности шумового поля океана, принимаемого двумя разнесенными в пространстве гидрофонами (далее – двухточечная корреляция), позволяет оценить поле, на одном гидрофоне, в случае если бы это поле было излучено вторым гидрофоном. Критичным для данной возможности является время накопления, требуемое для получения достоверных оценок: при расстоянии между гидрофонами ~ 100 км (что характерно для томографических задач) требуется несколько тысяч часов накопления шумов, что делает такой подход неприемлемым для томографии. Иной подход, основанный на измерении межмодовой (вместо двухточечной) корреляции шумов, был предложен в [1]. Требуемое время накопления в этом случае может составлять от нескольких до одного часа [1] при использовании комбинированных скалярно-векторных приемников. Информация, полученная из межмодовых корреляций, дает оценки времен распространения мод разных номеров между антеннами, что позволяет реализовать модовую томографию океана [5] без использования активного излучения.

Рассматривается акватория, окруженная по периметру вертикальными антеннами, принимающими шумовое поле. Положения антенн в горизонтальной плоскости характеризуются радиус-векторами \mathbf{r}_i , i – номер антенны (рис. 1). Предполагается, что межмодовые корреляции шумовых полей позволили оценить времена распространения $t_{ij}^{(m)}$ мод m -

ых номеров между всеми i -ми и j -ми вертикальными антеннами, используя подходы, описанные, например, в [2]. Ставится задача определения возмущения характеристик океанического волновода относительно их фоновых значений на основе набора данных $t_{ij}^{(m)}$.

Решение рассматриваемой задачи усложняется тем, что в реальном океане всегда существуют течения, под действием которых вертикальные антенны могут смещаться в неизвестных направлениях на неизвестные расстояния относительно их первоначальных положений. Для решения данной проблемы в [3] предложено использовать относительные углы горизонтальной рефракции мод $\alpha_{ij;k}^{(m)}$ (рис. 1), распространяющихся от двух «излучающих» i -ых и j -ых антенн на одну «приемную» k -ую антенну. Здесь предполагается, что корреляционная обработка шумовых сигналов соответствуют случаю излучения мод двумя антеннами и их приему третьей антенной. Возмущения углов $\delta\alpha_{ij;k}^{(m)}$, вызванные наличием океанических неоднородностей, слабо чувствительны к неизвестным смещениям антенн в горизонтальной плоскости на расстояния вплоть до нескольких сотен метров. В [3] предложен метод измерения $\alpha_{ij;k}^{(m)}$ с помощью вертикальных антенн, оснащенных приемниками градиентного типа с компасами, на основе модифицированного алгоритма Кейпона. Однако для оценок углов $\alpha_{ij;k}^{(m)}$ таким методом за разумные времена накопления требуется использование дополнительного активного излучения, так как отношение сигнал/помеха в пассивной схеме недостаточно для этих измерений.

В настоящей работе для реализации пассивной модовой томографии океана предлагается использовать вместо углов $\alpha_{ij;k}^{(m)}$ их оценки $\hat{\alpha}_{ij;kn}^{(m)} = \arccos(t_{ik}^{(m)} - t_{in}^{(m)} / t_{kn}^{(m)}) - \arccos(t_{jk}^{(m)} - t_{jn}^{(m)} / t_{kn}^{(m)})$. Как показали численные расчеты, времена $t_{ij}^{(m)}$, получаемые из межмодовых корреляций для нескольких часов накопления шумового сигнала, позволяют получить $\hat{\alpha}_{ij;kn}^{(m)}$ с точностью, требуемой для проведения томографического

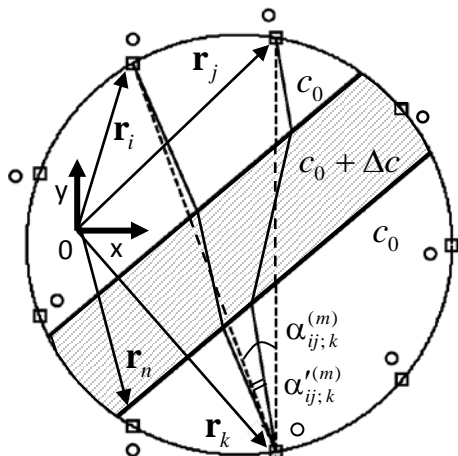


Рис. 1. Схема акватории в горизонтальной плоскости. Несмещенное положение антенн обозначено символами \square , смещенное положение (не в масштабе) – символами \circ . Наличие неоднородности вызывает возмущения углов $\delta\alpha_{ij;k}^{(m)} = \alpha'_{ij;k}^{(m)} - \alpha_{ij;k}^{(m)}$; оценки углов $\hat{\alpha}_{ij;kn}^{(m)} = \arccos(t_{ik}^{(m)} - t_{in}^{(m)} / t_{kn}^{(m)}) - \arccos(t_{jk}^{(m)} - t_{jn}^{(m)} / t_{kn}^{(m)})$ используются для целей пассивной томографии.

эксперимента.

При численной реализации используется представление акустического поля в виде «вертикальные моды – горизонтальные лучи» в адиабатическом приближении, что позволяет свести трехмерную задачу распространения звука в океане к набору независимых двумерных задач распространения мод вдоль горизонтальных лучей. Далее рассматривается двумерная задача в горизонтальной плоскости. Исследуемая акватория радиуса $R_a = 10^5$ м окружена 19 расположенными по периметру вертикальными антеннами. Восстанавливалось возмущение скорости звука $\Delta c(\mathbf{r}) = \Lambda_1 \exp\left[-|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1''|^2 / \sigma^2\right] + \Lambda_2 \exp\left[-|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2''|^2 / \sigma^2\right]$ относительно фонового значения $c_0 = 1500$ м/с, $\Lambda_1 = 9.8$ м/с, $\Lambda_2 = -4.9$ м/с, $\sigma = 0.25R_a$, $\mathbf{r}_1'' = \{-0.35R_a, 0.35R_a\}$, $\mathbf{r}_2'' = \{0.35R_a, -0.35R_a\}$ (рис. 2а). Для описания неоднородности использовался полосчатый базис [3], состоящий из 8 полос, равномерно покрывающих рассматриваемую акваторию и поворачиваемых с равным угловым шагом $\pi/15$ в интервале $[0, \pi)$:

$\Delta c(\mathbf{r}) = \sum_l x_l \theta_l(\mathbf{r})$, $\theta_l(\mathbf{r}) = 1$ м/с, при $\mathbf{r} \in N_l$, $\theta_l(\mathbf{r}) \equiv 0$ при $\mathbf{r} \notin N_l$, где N_l – область, занимаемая базисной полосой. Восстановление неоднородности осуществлялось путем решения системы линейных уравнений $A |X\rangle = |\Delta T\rangle$, где вектор-столбец $|X\rangle$ образован неизвестными коэффициентами x_l ; $|\Delta T\rangle$ состоит из возмущений наблюдаемых данных, вызванных присутствием в акватории восстанавливаемой неоднородности; A – матрица возмущений. МНК-решение $|\hat{X}\rangle = (A^+ A)^{-1} A^+ |\Delta T\rangle$ дает оценку

$\Delta \hat{c}(\mathbf{r}) = \sum_l \hat{x}_l \theta_l(\mathbf{r})$. На рис. 2б приведены результаты восстановления на основе только возмущений времен при известном расположении антенн. При неизвестном расположении антенн (рис. 2в, антенны смещены в случайных направлениях на расстояния $\cong 50$ м относительно их известных положений) картина восстановления существенно ухудшается. Использование возмущений углов, оцениваемых из времен $t_{ij}^{(m)}$, позволяет восстановить $\Delta c(\mathbf{r})$ с удовлетворительной точностью (рис. 2г).

В работе предложена схема пассивной модовой томографии океана. Вместо часто используемой двухточечной корреляции [4], рассматриваются межмодовые корреляции [1] шумовых полей, принимаемых вертикальными антеннами, что дает оценки времен распространения мод, как если бы они возбуждались и принимались этими антеннами. Времена распространения мод используются для оценки

относительных углов рефракции этих мод. Полученная угловая информация позволяет реализовать пассивную томографическую схему слабо чувствительную к неизвестному смещению антенн в горизонтальной плоскости.

Работа выполнена при поддержке грантов Президента РФ № НШ-4590.2010.2, № МК-2041.2011.5 и грантов РФФИ № 10-05-00229, № 10-02-00636.

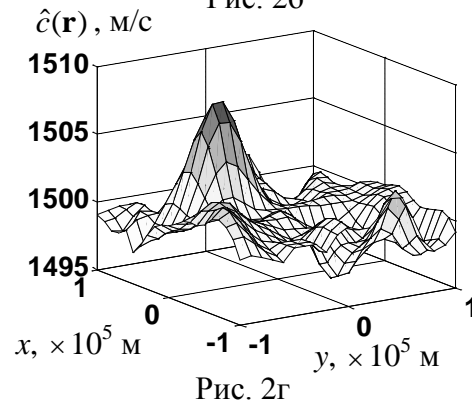
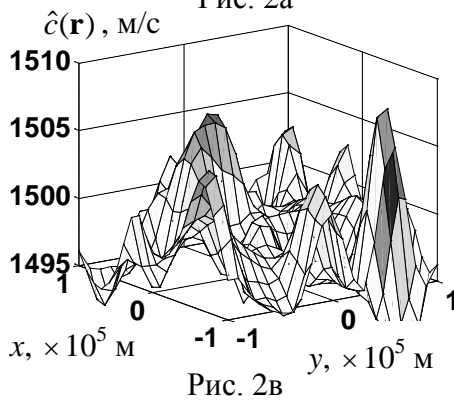
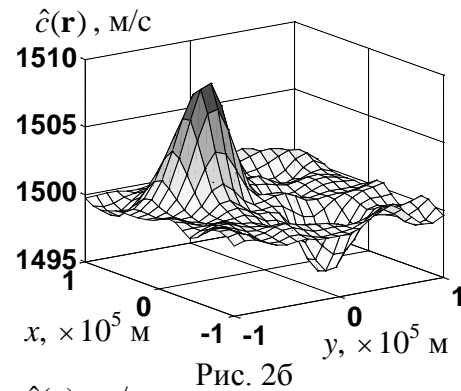
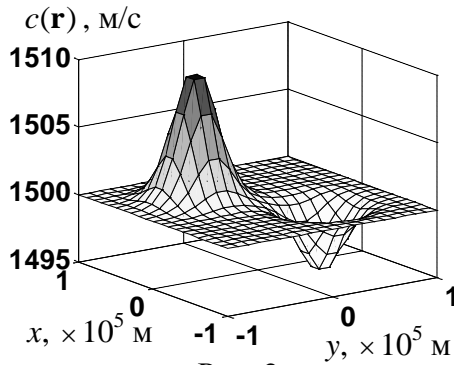


Рис. 2. Восстановление неоднородности скорости звука: (а) – истинное распределение; (б) – результаты восстановления по временным задержкам при известном расположении антенн. При неизвестном смещении антенн: (в) – восстановление по временной информации $t_{ij}^{(m)}$; (г) – восстановление по угловой информации $\hat{\alpha}_{ij;kn}^{(m)}$, полученной из $t_{ij}^{(m)}$.

ЛИТЕРАТУРА

1. В.А. Буров, С.Н. Сергеев, А.С. Шуруп // Акустич. журнал. 2008. Т.54. No 1. С. 51-61.
2. В.А. Буров, С.Н. Сергеев, А.С. Шуруп // Акустич. журнал. 2009. Т.55. No 2. С. 232-246.
3. В.А. Буров, С.Н. Сергеев, А.С. Шуруп // Акустич. журнал. 2011. Т.57. No 3. С. 348-363.
4. O.A. Godin, N.A. Zabotin, V.V. Goncharov // Geophys. Res. Let. 2010. V 37. L13605.

5. В.В. Гончаров, В.Ю. Зайцев, В.М. Куртепов, А.Г. Нечаев, А.И. Хилько “Акустическая томография океана” Н. Новгород: ИПФ РАН, 1997.

МАГНИТНО-РЕЗОНАНСНАЯ ТЕРМОМЕТРИЯ МОДЕЛЬНЫХ ОБЪЕКТОВ

Волков А.А., Никифоров В.Н., Пирогов Ю.А.

*Центр магнитной томографии и спектроскопии МГУ имени М.В. Ломоносова,
физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова.*

resetna@mai.ru

В настоящем докладе рассматривается метод магнитно-резонансной термометрии - единственный способ неинвазивного исследования температурных полей внутри биологических объектов. Сообщается о моделях диффузии тепла, имитирующих реальные процессы гипертермии в медицинской терапии. Рассматриваются модели остывания, нагрева и термодиффузии в пористых средах в присутствии температурных градиентов.

Докладывается о результатах выполненных измерений в экспериментах по МР лазерной гипертермии. Изучалось трехмерное распределение температурного поля в ткани в режиме реального времени с визуализацией температурного поля и оценкой точности измерения температуры в зоне нагрева. В качестве исследуемого объекта использовались модельные фантомы, имитирующие свойства реальных тканей (сырой и коагулированный белки, жир и вода). Нагрев осуществлялся медицинским YAG-лазером с длиной волны 1.07 мкм и мощностью 10 Вт. Томографические данные регистрировались на биоспектральном томографе Bruker Biospec 30/70 с напряженностью магнитного поля 7 Тл. Для регистрации температуры применялся метод, основанный на изменении спин-решеточного времени релаксации T_1 в зависимости от температуры. При этом велось постоянное сравнение результатов МРТ-измерений с термическими данными, регистрируемыми стандартным методом с помощью пиродатчика.

В докладе анализируется соответствие поведения температурного поля с теоретической моделью, оценивается перспективность применения метода в медицинской практике.

ДВУХЗОННАЯ БКШ-МОДЕЛЬ СВЕРХПРОВОДИМОСТИ В ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОМ СВЕРХПРОВОДНИКЕ $\text{Ba}(\text{Fe}_{0.9}\text{Co}_{0.1})_2\text{As}_2$

А.А. Воронков^{1,2}, Е.Г. Максимов³, А.Е. Каракозов⁴, Б.П. Горшунов^{1,2}, С.С. Жуков⁵, Е.С. Жукова^{1,2}, М. Dressel⁶, D. Wu⁶, S. Haindl⁷, K. Iida⁷

¹Учреждение Российской академии Наук Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

²Московский физико-технический институт (Государственный Университет)

³Учреждение Российской академии наук Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН

⁴Институт физики высоких давлений РАН

⁵Волгоградский государственный технический университет

⁶1. Physikalisches Institut, Universität Stuttgart

⁷IFW Dresden, Institute for Metallic Materials

Andrey.a.voronkov@yandex.ru

В данном сообщении приводятся результаты анализа измеренных нами ранее [1] терагерцовых и инфракрасных спектров проводимости и диэлектрической проницаемости высокотемпературного сверхпроводника $\text{BaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}_2$ ($T_c=20$ К). Мы показываем, что поведение проводимости и диэлектрической проницаемости $\text{BaFe}_{1-x}\text{Co}_x\text{As}_2$ в сверхпроводящей фазе при низких, около 5 К, температурах хорошо укладывается в рамки стандартной однозонной БКШ-модели, см. Рис1, за исключением значительного поглощения на подщелевых частотах.

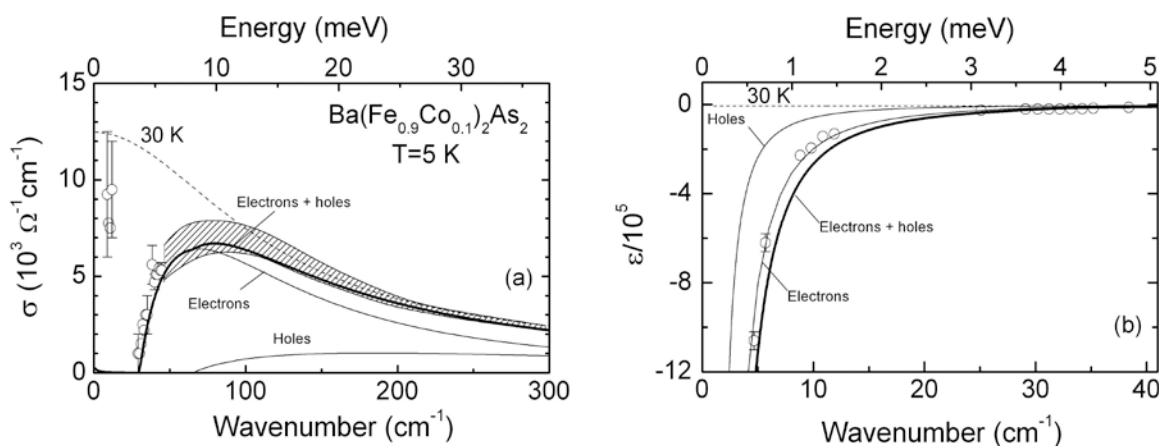


Рис.1. Спектры проводимости и диэлектрической проницаемости $\text{Ba}(\text{Fe}_{0.9}\text{Co}_{0.1})_2\text{As}_2$ в сверхпроводящей фазе при температуре $T=5$ К [1]. Тонкие линии - вклады от электронных и дырочных зон, толстые линии – суммарные вклады (расчёт в рамках стандартной модели БКШ). Пунктирная линия - спектры в нормальной фазе ($T=30$ К).

Природа такого поглощения, остаётся пока невыясненной. При более высоких температурах, $T>5$ К, и тем более при $T \rightarrow T_c$, описать спектры $\text{Ba}(\text{Fe}_{0.9}\text{Co}_{0.1})_2\text{As}_2$ в рамках однозонной модели БКШ, уже не удаётся. Это легко увидеть из Рис.2: при $T>0.6T_c$ температурная зависимость глубины

проникновения $\delta(T)$ не может быть описана расчётными зависимостями как электронного или дырочного конденсата по отдельности (тонкие сплошные линии на Рис.2), так и их совместным вкладом (пунктир на Рис.2). В то же время, описать экспериментальную зависимость $\delta(T)$ удаётся введением, дополнительно к внутризонному, также и межзонного спаривательного взаимодействия. Из Рис.2 видно, что в таком случае температурная зависимость глубины проникновения воспроизводится во всех деталях. Соответствующая модель двухзонной БКШ-сверхпроводимости была развита ранее для MgB_2 [2]. Обработка спектров позволила нам определить константы внутризонной : $\lambda \approx 0.45$ и межзонной $\lambda_{12} = 0.1$ связи.

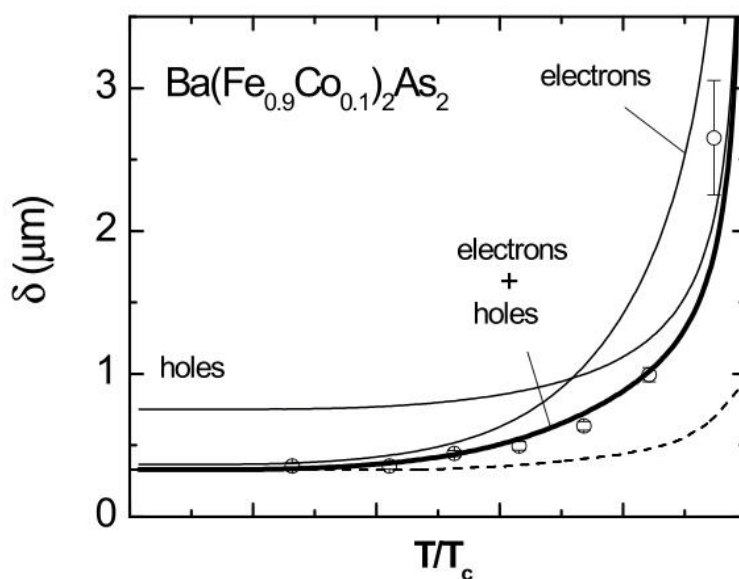


Рис.2. Температурная зависимость глубины проникновения магнитного поля в $Ba(Fe_{0.9}Co_{0.1})_2As_2$ [1]. Тонкие сплошные линии – расчёт в рамках модели БКШ для электронной и дырочной зон, пунктирная линия – их аддитивный вклад, . Сплошная толстая линия – расчёт согласно двухзонной БКШ-модели с учётом внутризонного и межзонного взаимодействия [2].

ЛИТЕРАТУРА

1. B. Gorshunov, D. et al. // Phys. Rev. B. 2010. V. 81, P. 060509.
2. E.G. Maksimov, A.E. Karakozov, Y.G. Ponomarev // JETP Lett. 2010. T. 91. Стр. 24.

ВЛИЯНИЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО ОТЖИГА НА СПЕКТР ФМР В ГРАНУЛИРОВАННЫХ НАНОСТРУКТУРАХ (CoFeB)+(SiO₂)

С. А. Вызулин¹, Е.В. Лебедева², Н.Е. Сырьев², М.С. Шлапаков¹

¹ Кубанский государственный университет

² Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

vizulin@kubsu.ru

Среди наномасштабных магнитных материалов особое место занимают гранулированные магнитные наноструктуры, содержащие включения магнитных наночастиц (гранул) в немагнитной матрице. Первостепенную роль в формировании магнитных свойств таких материалов играют эффекты взаимодействия между гранулами, определяемые расстоянием между ними, их размером, формой, объемной концентрацией, а также материалом матрицы.

Цель работы – исследование методом ФМР структурных перестроек композитных нанопленок, обусловленных низкотемпературным отжигом.

Исследовались пленочные нанокompозиты (Co₄₀Fe₄₀B₂₀)_f(SiO₂)_{100-f}, состоящие из гранул (размером 3–5 нм) аморфного сплава CoFeB, внедренных в немагнитную матрицу SiO₂. Объемная концентрация f магнитной фазы вдоль направления напыления пленки менялась от 5 до 31%, а в поперечном направлении оставалась примерно постоянной. Длина пленки 240 мм. Структура была синтезирована в Воронежском ГТУ методом ионно-лучевого распыления. Синтез проводился путем распыления составной мишени соответствующего состава на кварцевую подложку [1]. Получаемые из такой структуры образцы размером 3x3 мм² различались величиной f , при этом изменение f в отдельном образце в среднем не превышало 3 %. Исследовались спектры ФМР образцов, не прошедших термообработку и отожженных в течение 2.5 часов при температуре 200°С (низкотемпературный отжиг по сравнению с температурой Кюри). Отжиг проводился в присутствии магнитного поля, приложенного в плоскости образца перпендикулярно направлению изменения концентрации магнитных гранул в наноструктуре.

Концентрация магнитных гранул определялась методом рентгеноспектрального анализа с помощью растрового электронного микроскопа «JSM 7500F» с энерго-дисперсионной приставкой «INCA-Energy» [2].

Спектры ФМР наблюдались на частоте 9,13 ГГц. Измерения проводились резонаторным способом на ЭПР спектрометре JEOL JES FA-300 с применением обычной модуляционной техники при комнатной температуре. Регистрировалась первая производная сигнала поглощения. Записи спектров проводились при возрастающем во времени поле. Возможности прибора позволяли изменять поле

подмагничивания H от -100 до 20000 Э.

Все измерения проводились при комнатной температуре. Регистрировались H_r – резонансные поля и ΔH – ширины линий сигнала поглощения при нормальной ($\alpha=0$) и касательной ($\alpha=90^\circ$) ориентациях постоянного магнитного поля \mathbf{H} относительно плоскости пленки (α – угол между нормалью \mathbf{n} к поверхности образца и вектором \mathbf{H}).

Для исследованных образцов характерно наличие анизотропии в плоскости пленки [3]. Поэтому при $\alpha=90^\circ$ записывались спектры в зависимости от направления \mathbf{H} , характеризуемого углом φ относительно направления напыления. Направление $\varphi=0$ обозначено вектором \mathbf{i} . В случае $\varphi=0$ переменное поле \mathbf{h} направлено перпендикулярно \mathbf{i} , при $\varphi=90^\circ$ – параллельно \mathbf{i} . При $\alpha=0$ спектры, записанные при $\mathbf{h} \parallel \mathbf{i}$ и $\mathbf{h} \perp \mathbf{i}$, практически совпадали, поэтому ниже эти ориентации отдельно не обсуждаются.

Экспериментальная зависимость $H_r(\varphi)$ при $\alpha=90^\circ$, представленная на рис.1а, указывает на то, что отжиг образцов с концентрацией магнитной фазы $f < 21\%$ при температуре 200°C не приводит к регистрируемым изменениям ориентации выделенных направлений в исследованных наноструктурах. Случай $\varphi=0$ соответствует направлению оси легкого намагничивания (ОЛН), а случай $\varphi=90^\circ$ – оси трудного намагничивания (ОТН). При более высоких значениях f такие изменения уже наблюдаются. Например, при $f \approx 32\%$ (рис.1б) происходит поворот в плоскости пленки как ОЛН, так и ОТН на угол порядка 16 град.

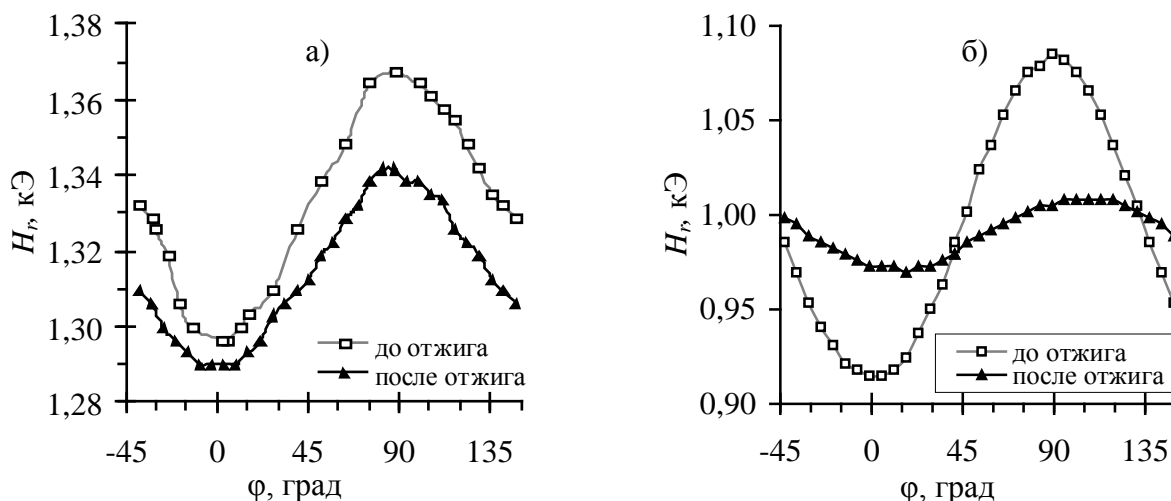


Рис.1. Угловые зависимости резонансного поля: а – для образца с $f=20\%$; б – $f=32\%$

Величины H_r до и после термообработки могут существенно различаться. На рис.2 представлены концентрационные зависимости поля одноосной анизотропии H_a , равного разности резонансных полей для направлений легкого и трудного намагничивания. До отжига поле анизотропии с ростом концентрации магнитной фазы практически монотонно увеличивается от $5 \div 10$ Э при $f=7\%$ до 150 Э при $f=32\%$.

Отжиг мало влияет на величину H_a при $f < 20\%$. При $20\% < f < 30\%$ термообработка образцов приводит к существенному уменьшению H_a .

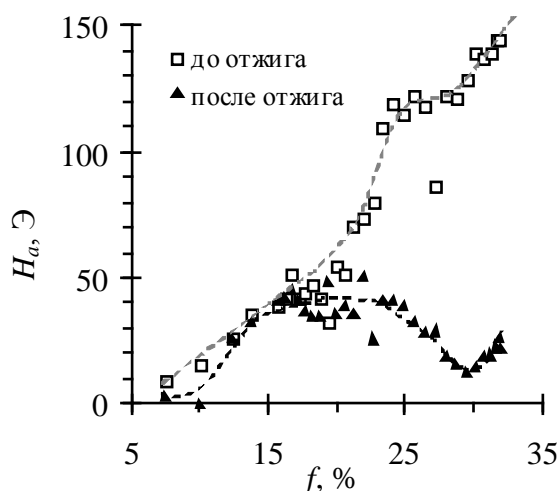


Рис. 2. Концентрационные зависимости поля анизотропии до и после отжига

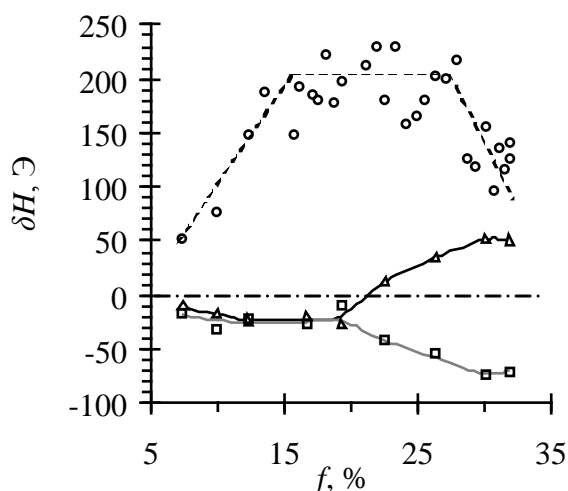


Рис. 3. Концентрационные зависимости сдвига резонансных полей после отжига

При f выше 30% рост концентрации магнитной фазы так же, как и в исходных образцах, приводит к росту анизотропии.

На рис. 3 приведены концентрационные зависимости сдвига резонансных полей $\delta H = H_{r2} - H_{r1}$ после отжига. Здесь H_{r1} и H_{r2} – резонансные поля до и после термообработки. Представлены три случая: 1) $\alpha = 90^\circ$, ОЛН (помечен маркером Δ); 2) $\alpha = 90^\circ$, ОТН (\square) и 3) $\alpha = 0$ (\circ).

В отожженных образцах с $f < 20\%$ сдвиг резонансных полей при намагничивании вдоль ОЛН ($\alpha = 90^\circ$) и вдоль ОТН ($\alpha \neq 90^\circ$) практически одинаков. Термическое воздействие в обоих случаях приводит к уменьшению H_r на величину порядка 10-40 Э (для $\alpha = 90^\circ$ и ОЛН с ростом концентрации магнитной фазы абсолютная величина сдвига растет). При $f > 20\%$ для направления $\mathbf{H} \parallel \text{ОТН}$ ход зависимости $\delta H(f)$ остается неизменным: с ростом f значение δH уменьшается. При $\mathbf{H} \parallel \text{ОЛН}$ ход зависимости $\delta H(f)$ меняется – значение δH с ростом f увеличивается, проходя через 0 при $f = 21 \div 22\%$. Качественно аналогичная ситуация наблюдалась в [4] при исследовании влияния отжига на удельное электросопротивление образцов такого же состава. Было установлено, что концентрационные зависимости удельного электрического сопротивления образцов до и после отжига пересекаются в точке с $f = 21\%$. При $f < 21\%$ отжиг приводил к росту сопротивления приблизительно в 10 раз, при $f > 21\%$ – напротив, к снижению сопротивления в 10 раз. Отжиг проводился при 400°C в течение 30 мин. По-видимому, эта концентрация соответствует порогу перколяции данных композитов, при котором начинает формироваться сплошная сетка металлических гранул.

При нормальном намагничивании ($\alpha = 0$) H_r после отжига с ростом f от 7 до 16 % увеличивается от 50 до 200 Э. Значение δH на интервале

$16\% < f < 28\%$ изменяется случайным образом на величины порядка ± 50 Э относительно среднего значения 200 Э. При концентрациях больше 28 % сдвиг H_r уменьшается, достигая величины порядка 100 Э при $f = 32\%$.

Влияние отжига на ширину линии поглощения однородного ФМР незначительно.

Анализ полученных экспериментальных результатов выполнен в приближении эффективной среды, состоящей из одинаковых эллипсоидальных магнитных гранул, равномерно распределенных в немагнитной матрице, направление главных полуосей которых совпадает с направлениями ОЛН, ОТН и нормали к поверхности пленки. Форма и размер гранул зависит от концентрации f . Экспериментальные результаты показывают, что до порога и в области порога перколяции низкотемпературный отжиг не приводит к изменению гранулированной структуры. Расчет показывает, что изменение резонансных полей связано в этом случае с температурным изменением намагниченности.

Экспериментально исследовано влияние низкотемпературного отжига на спектр однородного ФМР гранулированных наноструктур $(\text{CoFeB})+(\text{SiO}_2)$. Наблюдаемые концентрационные зависимости поля одноосной анизотропии до и после отжига и концентрационные зависимости сдвига резонансных полей однородного ФМР после отжига образцов могут быть объяснены в рамках модели эффективной среды.

ЛИТЕРАТУРА

1. И.В. Золотухин, Ю.Е. Калинин // Современные проблемы физики твердого тела и материаловедения. Воронеж, 2005. С. 44 – 54.
2. С.А. Вызулин, А.В. Горобинский, М.Е. Соколов, М.С. Шлапаков // Материалы XII Южно-российской научно-практической конференции «Инновационные технологии в образовательном процессе». Том 2. – Краснодар, 2010. – С. 27-30.
3. М.С. Шлапаков, С.А. Вызулин. // Материалы XLVIII международной научной студенческой конференции "Студент и научно-технический прогресс". 10-14 апреля 2010 г. Новосибирск: Новосибирский государственный университет. 2010. С. 320.
4. Ю. Е. Калинин, А. В. Ситников, О. В. Стогней. // Международный научный журнал «Альтернативная энергетика и экология» №10 (54) 2007. С 9 – 21.
5. С. А. Вызулин, Е. В. Лебедева, Д. А. Лысак, Н. Е. Сырьев // Известия РАН. Серия физическая, 2010, том 74, № 12, с. 1767–1769.

ЭЛЕКТРОННЫЕ И МАГНИТНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТОНКИХ ПЛЕНОК $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ ($0.5 < x < 0.7$) И $(\text{La}_{1-y}\text{Pr}_y)_{0.33}\text{Ca}_{0.66}\text{MnO}_3$ ($0 < y < 1$) НА ТЕРАГЕРЦОВЫХ ЧАСТОТАХ

Л.С. Кадыров^{1,2}, А.А. Воронков^{1,2}, Е.С. Жукова^{1,2}, А.А. Борис^{1,2}, Б.П. Горшунов^{1,2}, S. Hühn³, F. Fischgrabe³, V. Moshnyaga³, K. Samwer³, M. Dressel⁴

¹ Учреждение Российской академии наук, Институт общей физики им. А.М. Прохорова

² Московский физико-технический институт (государственный университет)

³ I. Physikalisches Institut, Universität Göttingen

⁴ I. Physikalisches Institut, Universität Stuttgart

kadyrovlennar@yandex.ru

Методами терагерцовой-субтерагерцовой спектроскопии выполнены первые измерения температурных зависимостей динамической проводимости и диэлектрической проницаемости эпитаксиальных тонких пленок ($d_{\text{пленки}} \sim 100$ нм) манганитов состава $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ ($0.5 < x < 0.75$) и $(\text{La}_{0.6}\text{Pr}_{0.4})_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$. Образцы были изготовлены на подложках MgO методом металлоорганического аэрозольного осаждения, применяемого при получении сверхпроводящих и оксидных пленок [1]. Измерения проводились на ЛОВ-спектрометре (ЛОВ – лампа обратной волны) [2] на частотах $5 - 45$ см⁻¹ и при температурах от 5 К до 300 К, а также для состава $(\text{La}_{0.6}\text{Pr}_{0.4})_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ дополнительно и в магнитном поле (0 – 7 Тл).

На Рис. 1 показана температурная зависимость проводимости материала состава $(\text{La}_{0.6}\text{Pr}_{0.4})_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$, на которой отчетливо видны признаки перехода в фазу с зарядовым упорядочением ($T_{\text{co}} \sim 220 - 280$ К).

Рис. 1. Температурная зависимость терагерцовой проводимости тонкой пленки ($d_{\text{пленки}} = 130$ нм) $(\text{La}_{0.6}\text{Pr}_{0.4})_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ на подложке MgO.

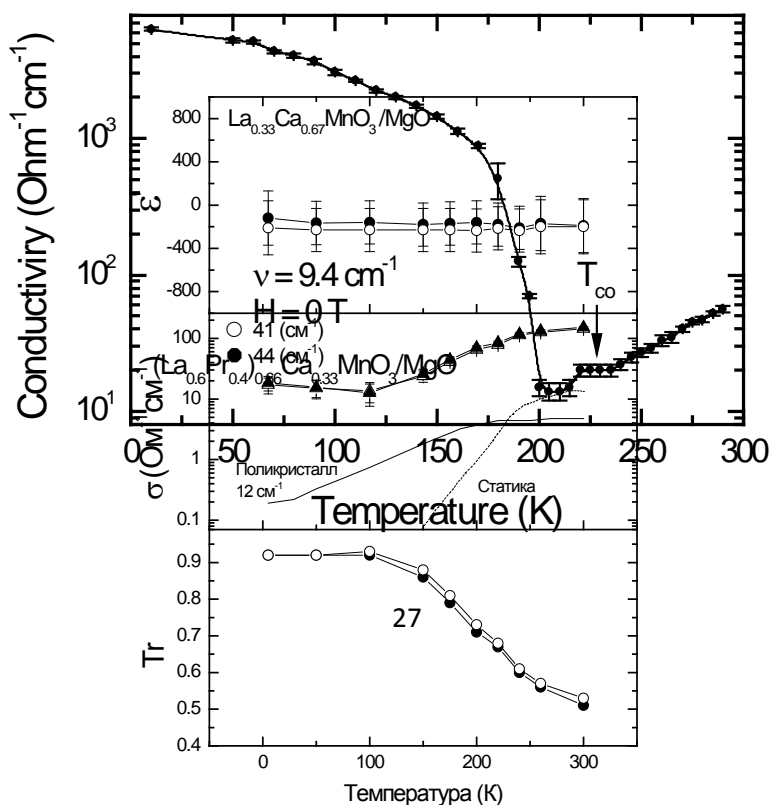
В температурных зависимостях динамической проводимости плёнок $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ для состава с $x=0.67$ в антиферромагнитной фазе ($T \leq 120$ K) обнаружено металлическое температурное и частотное поведение динамической проводимости и диэлектрической проницаемости (Рис. 2), свидетельствующее о возникновении делокализованных носителей заряда.

В настоящее время обсуждаются возможные микроскопические механизмы, ответственные за такое «аномальное поведение» (аномальное по сравнению с поликристаллическими манганитами [3]) электродинамических параметров пленочных образцов – появление металлической проводимости в передопированных манганитах и зарядовое упорядочение в манганитах с колоссальным магнитосопротивлением.

Рис. 2. Температурные зависимости действительной части диэлектрической проницаемости и проводимости плёнки $\text{La}_{0.33}\text{Ca}_{0.67}\text{MnO}_3$ на двух разных частотах. Сплошная линия – зависимость динамической проводимости поликристаллического образца. Пунктир – зависимость статической проводимости. На нижней панели – температурная зависимость коэффициента пропускания плёнки ($d_{\text{пленки}} = 126$ нм) на подложке MgO.

ЛИТЕРАТУРА

1. V. Moshnyaga, I. Khoroshun, A. Sidorenko, and P. Petrenko. // Appl. Phys. Lett.. 1999. V. 74. No 19. P. 2842.
2. Б.П. Горшунов, А.А. Волков, А.С. Прохоров, И.Е. Спектор // ФТТ. 2008. Т. 50. Вып. 11. С. 1921.
3. E. Zhukova, B. Gorshunov, T. Zhang, et al. // Europhys. Lett.. 2010. V. 90. P. 17005.



ИССЛЕДОВАНИЕ СПИН-РЕШЕТОЧНОЙ ЯДЕРНОЙ МАГНИТНОЙ РЕЛАКСАЦИИ ВОДЫ И ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ НИЗКОЧАСТОТНОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ

Д.В. Кашаев¹, Н.С. Васильев¹, М.Г. Барышев¹
ГОУ ВПО «Кубанский государственный университет»
nikolasvs@mail.ru

На сегодняшний день многими исследователями активно изучается воздействие электромагнитного поля на различные биологические и физико-химические системы. Мощным исследовательским инструментом при изучении таких объектов является метод ядерного магнитного резонанса (ЯМР). И для понимания природы происходящих процессов в облучённых электромагнитным полем образцов, весьма актуальным является изучение релаксационных механизмов в ЯМР. В качестве своеобразных исследовательских зондов для низкочастотного магнитного поля могут выступать изотопы водорода – протий и дейтерий, а также активный в ЯМР изотоп кислорода ¹⁷O.

Для проведения экспериментов использовали дистиллированную воду с удельным сопротивлением 300 кОм/см. Обработку образцов воды производили в стеклянной емкости при помощи генератора низкочастотных сигналов ГЗ-118, к которому подсоединяли катушку индуктивности с 2500 витков, в многослойной экранированной камере. Напряженность магнитного поля составляла 0,01 А/м. Напряженность электрического поля была пренебрежимо мала. Нестабильность частоты в диапазоне от 1 Гц до 20 Гц составляла 0,2 %. Измерение и контроль частоты и напряженности магнитного поля проводили с помощью измерителя индукции Ш1-8, частотомер ЧЗ-54. ЯМР исследования проводились на импульсном спектрометре JNM-ECA400. Время спин-решеточной релаксации (T_1) определялось с помощью метода «инверсии восстановления», состоящего из импульсной последовательности ($180^\circ - \tau - 90^\circ - \text{Acq}$). Погрешность при измерении времени спин-решеточной релаксации не превышала 2 %.

На рисунке 1 представлена температурная зависимость времени спин-решеточной релаксации на ядрах изотопа кислорода ¹⁷O природного содержания дистиллированной воды.

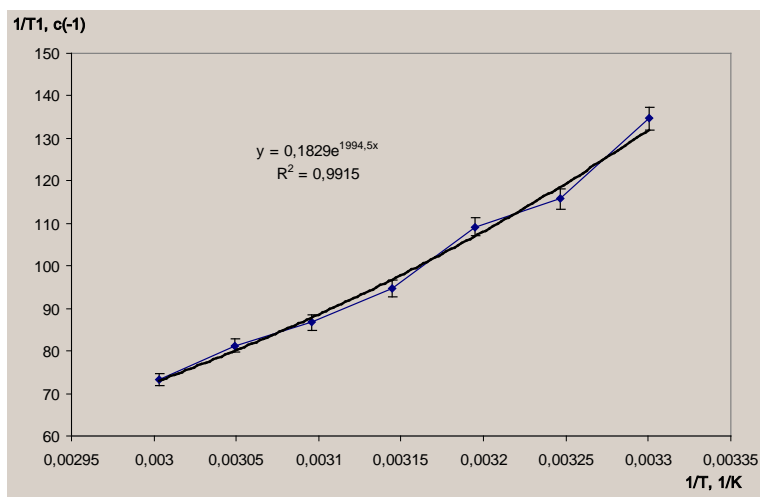


Рис. 1. Температурная зависимость времени спин-решеточной релаксации на ядрах изотопа кислорода ^{17}O природного содержания дистиллированной воды

Для данной температурной зависимости была проведена аппроксимация экспоненциальной функцией, результаты и точность аппроксимации представлены на рисунке 1. Проведен расчет энергии активации молекулярно-динамических процессов в воде, величина которой составила $(3,85 \pm 0,05)$ ккал/моль. Для сравнения, энергия активации без обработки низкочастотным магнитным полем составляла величину $3,88 \pm 0,05$ ккал/моль. Таким образом, воздействие низкочастотного магнитного поля практически не приводит к изменению энергии активации. Однако при варьировании частоты магнитного поля в диапазоне 1-20 Гц было установлено изменение времени спин-решеточной релаксации (рисунок 2) при фиксированной температуре 30 °С.

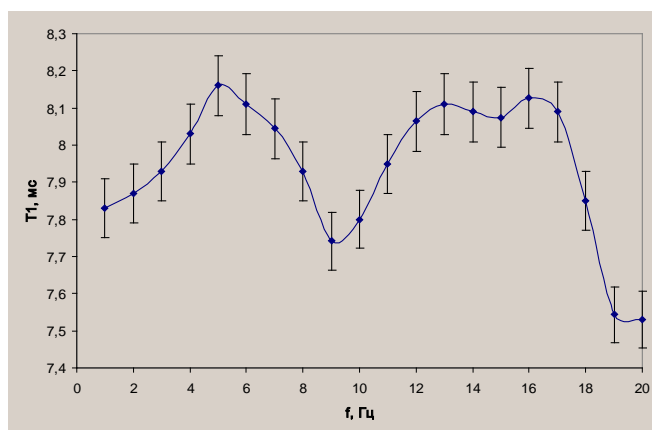


Рис. 2. Время спин-решеточной релаксации на ядрах изотопа кислорода ^{17}O природного содержания дистиллированной воды при разной частоте воздействия магнитного поля и фиксированной температуре (30 °С)

Характер данного изменения, как видно из рисунка 2, полиэкстремумный: наблюдалось несколько квазипериодических

максимумов и минимумов. Подобный много экстремумный характер свойственен резонансным механизмам низкочастотного магнитного воздействия и наблюдается не только при исследовании дистиллированной воды, но и сложных водных растворов, разнообразных биологических систем [1-3].

Была произведена оценка энергии активации для обработанного магнитным полем образца и контроля по данным спин-решеточной релаксации (рис. 3).

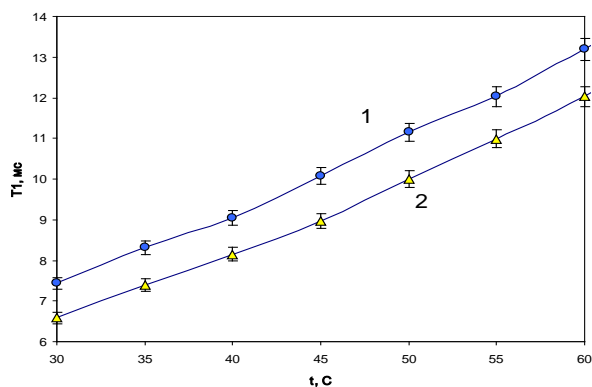


Рис. 3. Температурная зависимость времени спин-решеточной релаксации на ядрах изотопа кислорода ^{17}O природного содержания водного раствора NaCl (1 – при воздействии магнитного поля частотой 10 Гц и амплитудой 0,01 А/м, 2 – контрольный вариант, не подвергавшийся воздействию магнитного поля)

Для обработанного образца величина энергии активации при аппроксимации аррениусовой зависимостью составила 8,1 ккал/моль, для контрольного образца – 8,8 ккал/моль, разница составила 0,7 ккал/моль. Для сравнения, энергия активации движения во льду составляет 14 ккал/моль. Учитывая, что энергия водородной связи порядка 3,5 ккал/моль, то разница в энергии активации для обработанного и контрольного образца может быть связана с другим типом субмолекулярного взаимодействия, например, Ван-дер-Ваальсовым.

На рисунке 4 представлено изменение времени спин-решеточной релаксации на ядрах изотопа кислорода ^{17}O природного содержания водного раствора NaCl при различной частоте воздействия магнитного поля.

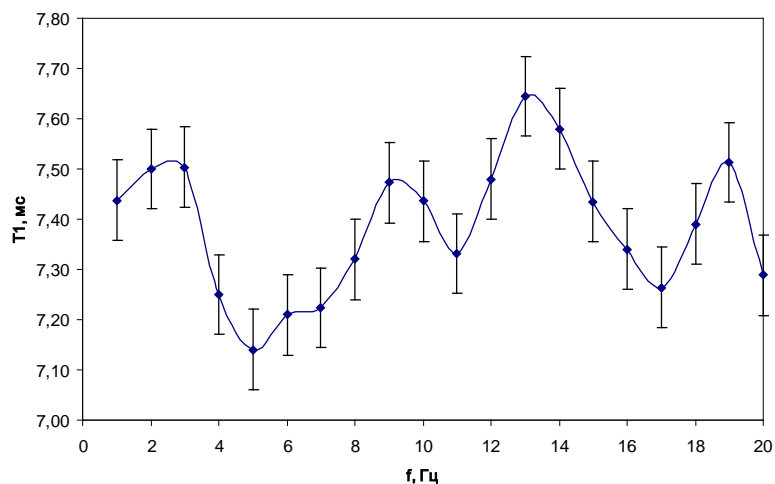


Рис. 4. Время спин-решеточной релаксации на ядрах изотопа кислорода ^{17}O природного содержания водного раствора NaCl при различной частоте воздействия магнитного поля

Таким образом, на основе полученных результатов можно сделать следующие выводы:

1. Низкочастотное магнитное воздействие приводит к изменению процессов спин-решеточной релаксации ^{17}O дистиллированной воды.
2. Согласно частотной зависимости времени спин-решеточной релаксации на ядрах ^{17}O (рис. 2 и 3) воздействие низкочастотного магнитного поля носит резонансный характер, что свойственно процессам низкоинтенсивного воздействия различной природы, в том числе и электромагнитной.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бурлакова Е.Б., Конрадов А.А., Мальцева Е.Л. // Биофизика. 2004. Т. 49. Вып. 3. С. 551-564.
2. Дронина Т.В., Попова Л.Ю. // Биофизика. 1998. Т.43. Вып. 3. С. 522-525.
3. Дорфман Я.Г. “Влияние магнитных полей на биологические объекты” М.: Наука, 1971.

МЕТОДЫ КВАЗИСТАТИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ТОМОГРАФИИ В НОВЫХ СИСТЕМАХ ОБЕСПЕЧЕНИЯ БЕЗОПАСНОСТИ

А.В. Корженевский

Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН
avklab@gmail.com

Различные угрозы, существующие сегодня в мире, требуют разработки новых технических средств обеспечения безопасности. Бесконтактные томографические методы зондирования объектов квазистатическими электромагнитными полями позволяют обнаруживать, идентифицировать и визуализировать скрытые под одеждой или в герметичных контейнерах опасные предметы и вещества без использования ионизирующих излучений. К таким методам относятся магнитоиндукционная, электроемкостная и электрополевая томография.

Обнаружение опасных жидкостей является глобальной проблемой. Сегодня на самолет нельзя проносить жидкости объемом более 100мл, так как нет эффективных устройств, позволяющих обнаруживать опасные жидкости. Разработан прибор, в котором используется метод электрополевой томографии, позволяющий оценивать пространственное распределение электрических свойств среды и определять характеристики жидкости независимо от толщины стенок герметичного контейнера. В свою очередь, электрические свойства жидкости позволяют оценивать ее опасность.

Металлоискатели, используемые в настоящее время для обнаружения оружия, малоэффективны из-за большого количества ложных сигналов тревоги. При помощи современных методов обнаружения невозможно различать опасные и не представляющие опасности металлические предметы. Магнитно-индукционная томография позволяет визуализировать пространственное распределение электрических и магнитных свойств внутри объектов, используя переменное магнитное поле в качестве зондирующего средства, и решить проблему локализации и идентификации обнаруживаемых объектов.

В подошвах и каблуках обуви возможно наличие потенциально опасных включений. Предполетный досмотр пассажиров осуществляется сканированием снятой обуви в рентгеновском интроскопе. Завершается разработка прибора для обследования обуви без ее снятия, в котором используется метод 3D электроемкостной томографии для поиска неоднородностей и аномальных областей. Измерение пространственного распределения параметров, таких как комплексная диэлектрическая проницаемость, сравнение их с накопленной базой данных позволяет достоверно выявлять подозрительные включения, не создавая ложных

тревог, связанных со стандартными элементами конструкции обуви.

ТГЦ-ДИК СПЕКТРОСКОПИЯ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СЛОЕВ $Pb_{1-x}Eu_xTe$

П.С.Королёв^{1,2}, Е. С. Жукова^{1,3}, Н. П. Аксенов^{1,4}, Б. П. Горшунов^{1,3}, Ю. Г. Селиванов⁵, И. И. Засавицкий⁵, D. Wu⁶, M. Dressel⁶

¹ Учреждение Российской академии наук Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН, Москва, Россия

² Физический факультет МГУ, Москва

³ МФТИ (ГУ), Долгопрудный, Россия

⁴ Научно-исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

⁵ Учреждение Российской академии наук Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН, Москва, Россия

⁶ 1. Physikalisches Institut, Universität Stuttgart, Stuttgart, Germany
korolev.petr@gmail.com

В настоящее время возрождается интерес к халькогенидам европия PbX ($X = O, S, Se, Te$) [1-3], что связано с использованием твердых растворов на их основе для создания полупроводниковых гетероструктур с эффективным электронным и оптическим ограничением и для изготовления высокоотражающих брэгговских зеркал в средней инфракрасной области спектра. Данных по оптическим свойствам твердых растворов $Pb_{1-x}Eu_xTe$ известно немного. Поэтому с целью получения детальной информации о взаимодействиях ионов Eu в кристаллической матрице полупроводника типа IV-VI нами выполнены первые измерения спектров пропускания эпитаксиальных слоев $Pb_{1-x}Eu_xTe$ на подложках из BaF_2 и Si в широкой области частот при температурах от комнатной до гелиевой. Монокристаллические слои $Pb_{1-x}Eu_xTe$ ($0 \leq x \leq 0.37$) выращивались методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложках BaF_2 и Si . Измерения спектров коэффициентов пропускания и отражения проводились на частотах $7 - 4000 \text{ см}^{-1}$ с применением терагерцового спектрометра на лампах обратной волны ($7 - 38 \text{ см}^{-1}$) [4] и стандартного инфракрасного Фурье спектрометра. Типичные экспериментальные спектры показаны на Рис.1. Осцилляции в спектрах на частотах $10 \text{ см}^{-1} - 100 \text{ см}^{-1}$ связаны с интерференцией излучения в подложке. Звёздочками помечены максимумы и минимумы, возникающие при интерференции в слоях $PbEuTe$. Анализ серии подобных спектров позволил нами сделать следующие заключения:

- помимо фононных и примесных линий поглощения в подложках и в буферных слоях, в $PbEuTe$ наблюдалось поглощение на локальной моде в области $110-114 \text{ см}^{-1}$, что объясняется наличием в слое неоднородностей с размерами порядка микрометров;

- наблюдалось смягчение частоты поперечного оптического фонона от ~ 32 до 18 см^{-1} при понижении температуры от 300 до 5 К .

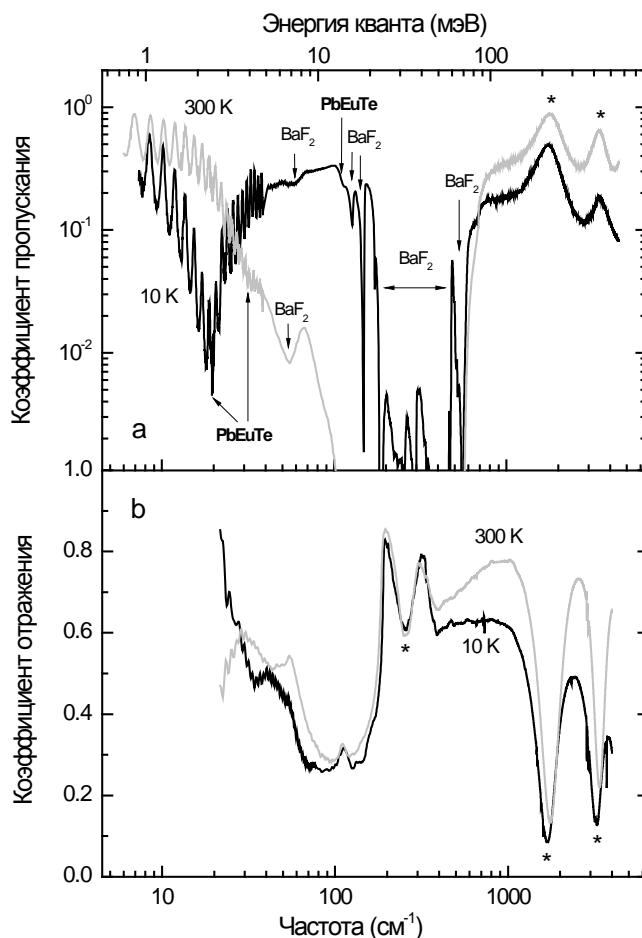


Рис. 1. Спектры коэффициентов пропускания (а) и отражения (б) эпитаксиального слоя $Pb_{1-x}Eu_xTe$ ($x = 0.076$, толщина $0.67 \mu m$), выращенного на подложке BaF_2 (толщина $1.05 mm$), при температурах 300 и 10 К. Стрелками на панели (а) обозначены линии поглощения, относящиеся к BaF_2 и $PbEuTe$.

ЛИТЕРАТУРА

1. З. Метфессель, Д. Маттис. «Магнитные полупроводники», Мир, М. 1972. С. 408.
2. S. Hüfner. Optical Spectra of Transparent Rare Earth Compounds, AP, New York, San Francisco, London 1978. P. 190.
3. P. Wachter. Europium Chalcogenides: EuO, EuS, EuSe and EuTe. In "Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earth" / Eds: K. A. Gschneider, Jr., LeRoy Eyring, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, New York, Oxford 1979. V. 2. P. 507.
4. Б. П. Горшунов, А. А. Волков, А. С. Прохоров, И. Е. Спектор. ФТТ 50. 1921. 2008.

БЫСТРЫЙ СПОСОБ СНЯТИЯ ИЗОТЕРМ СОРБЦИИ ВОДЯНОГО ПАРА КОНЦЕТРОМЕТРИЧЕСКИМ МЕТОДОМ

Д.М. Курмашева^{1,2}, П.О. Капралов¹, В.Г. Артёмов¹

¹Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, 119991, Москва, ул. Вавилова, 38

²Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

darya_mk@inbox.ru

За малые или большие времена практически любые материалы поддаются проникновению в них молекул воды, что существенно влияет на свойства этих материалов. Многие практические проблемы: хранение продуктов питания, влагоудержание почв, фильтрация, сушка, коррозия, полимеризация, кристаллизация и т.д., связаны с влагосодержанием [1].

Одна из важнейших характеристик взаимодействия водяного пара с веществом - равновесная изотерма сорбции, наиболее точный способ получения которой состоит в методе интервальной сорбции с привлечением гравиметрических приборов типа весов Мак-Бена. Изотермы адсорбции и десорбции паров дают возможность получить важные сведения о внутренней структуре пористых адсорбентов и катализаторов. Процесс измерения сопряжен с большими временными затратами, возникающими в связи с необходимостью ожидания установления полного адсорбционного равновесия на каждом этапе. Характерное время одного шага сильно зависит от степени пористости материала и может составлять несколько суток.

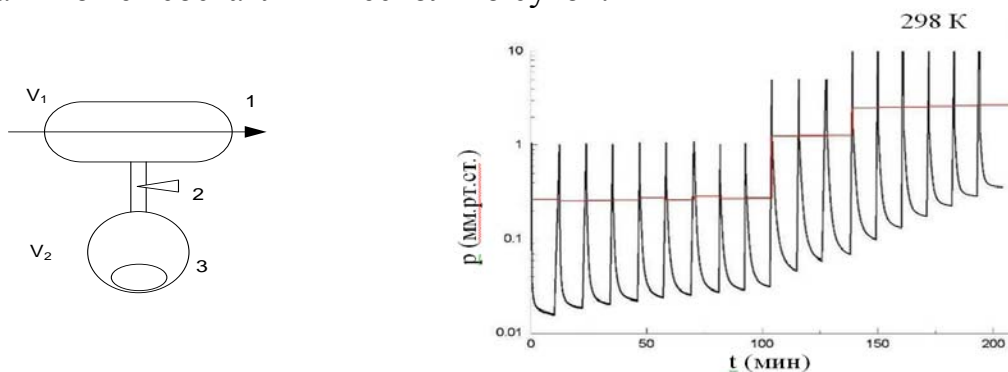


Рис. 1. Схема адсорбционно-релаксационных измерений. 1 – дозирующая кювета, просвечиваемая лазерным излучением, 2 – вакуумный разделительный кран, 3 – дозируемый объем с исследуемым адсорбентом в термостате.

Рис. 2. Последовательность релаксационных кривых давления водяного пара в ходе интервальной сорбции молекул воды на сферических гранулах SiO_2 при 298 К. Горизонтальные штрихи указывают расчетное давление расширения в мертвый объем без учета адсорбции.

В настоящем докладе сообщается о разработке экспериментальной методики с использованием концентрометрических измерений, позволяющей получать изотермы сорбции водяного пара на пористых объектах, сокращая время одного интервала сорбции до нескольких минут.

В основе способа измерений лежит метод оптической диодно-лазерной (ДЛ) спектроскопии, принцип его работы описан в [3]. Прибор отличается бесконтактностью высокой скоростью (до 100 изм./сек) и селективностью, что позволяет следить за молекулами воды в составе любых газовых смесей. Чувствительность метода измерения составляет 10^{-4} мм.рт.ст (10^{14} см⁻³ или 0.003 мкг), что на порядок превосходит аналогичный показатель лучших гравиметрических измерений.

Схема эксперимента приведена на Рис.1. Перед началом измерений адсорбент обезгаживается путем вакуумной откачки до 0,01 мм.рт.ст. Далее осуществляется многократное перепускание известного числа N молекул воды из кюветы 1 в термостатируемую кювету 3 с адсорбентом. ДЛ-спектрометр регистрирует релаксационную кривую уменьшения концентрации в процессе сорбции и диффузии водяного пара в пробе на каждом шаге (Рис.2). По изменению концентрации рассчитывается количество молекул, ушедших в адсорбент и строится соответствующая изотерма адсорбции.

Особенность разработанного метода состоит в использовании одновременно концентрационного и теплового градиентов, возникающих на каждом интервале сорбции. Первый обеспечивается разностью давлений, а второй сбросом поступательной энергии сорбируемых молекул и переходом ее в тепло. В совокупности они вызывают увеличение скорости диффузии молекул воды внутри пористой матрицы на начальном участке сорбции сразу после открытия разделительного крана. В результате концентрация в газовой фазе в первый момент резко падает (см. Рис.2), что приводит к уменьшению общего времени, требуемого для установления равновесия. Кроме этого, учет полиэкспоненциальность релаксационной кривой, описанной ранее в [4], дает возможность предсказания точки адсорбционного равновесия по углу наклона экспоненты с наибольшим временем релаксации. Результатом учета всех факторов является возможность сокращения единичного интервала сорбции до нескольких минут, что приводит к существенному (на порядок) сокращению общего времени снятия изотермы адсорбции. Метод видится перспективным для экспресс анализа сорбции молекул воды различными пористыми средами. Дальнейшее развитие метода позволит получать важные сведения о внутренней структуре пористых адсорбентов на основании полученных данных.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. Ball, A Biography of Water, Weidenfeld & Nicolson, London, 1999, 386 p.
2. Капралов П.О., Артемов В.Г., Макуренок А.М., Тихонов В.И., Волков А.А.// Приборы и техника эксперимента, №6, С. 123–126, 2008

3. Капралов П.О., Артёмов В.Г., Гусев Г.А., Тихонов В.И., Волков А.А.
// Известия РАН, сер. Физ., 2008, Т.72, №12, С. 1791–1795.

ПРОСТРАНСТВЕННОЕ РАЗДЕЛЕНИЕ СПИН-ИЗОМЕРОВ ВОДЫ В ПОРАХ СОРБЕНТА.

А.А. Лескин¹, В.Г. Артёмов², П.О. Капралов², В.И. Тихонов², А.А. Волков²

¹Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова

²Учреждение Российской академии наук Институт общей физики
им. А.М. Прохорова, 119991, Россия, Москва, ул. Вавилова, 38

leskin@physics.msu.ru

Спиновая изомерия воды – способность разделения молекул на две фракции – молекул с нулевым суммарным ядерным спином (пара-изомер) или спином равным единице (орто-изомер). Была предсказана в самом начале 20-го столетия, на заре становления квантовой механики. Однако первое экспериментальное подтверждение было получено в 80-х годах после того, как в экспериментах с газодинамическим лазером была замечена разница в поведении орто и пара молекул при конденсации тяжелой воды на кластерах углекислоты [1] и позже в процессах сорбции [2]. Данная работа продолжает изучение вопроса разделения спиновых изомеров при взаимодействии с различными твердыми веществами молекул с твердой поверхностью.

Основная причина такого разделения видится нам в зависимости энергии взаимодействия молекул воды с приповерхностным электрическим полем вещества от ее вращательного состояния. На рис.1 черным цветом изображен характерный потенциал без учета такой зависимости.

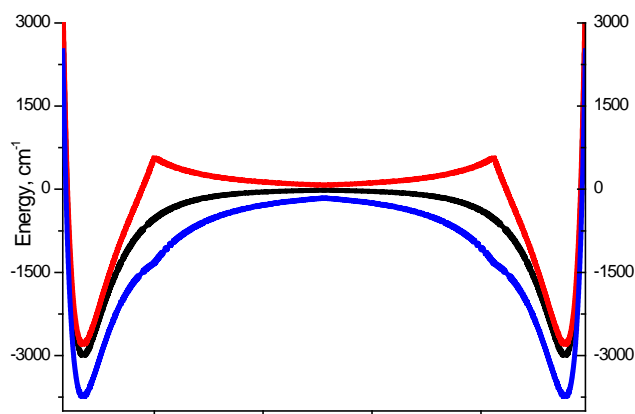


Рис. 1. Распределение потенциала взаимодействия молекулы воды в микрованале, черным цветом для молекул с нулевым Штарковским сдвигом, красным - для LFS, синим - для HFS.

Учет влияния вращательного состояния базируется на хорошо

известном Штарк-эффекте – эффекте изменения вращательной энергии под действием электрического поля [3]. Для молекул воды Штарк-эффект является квадратичным по полю - смещение вращательной энергии для каждого уровня определяется следующей величиной:

$$\Delta E = \alpha_i * \vec{E}^2 \quad (1)$$

где α_i - различный для каждого вращательного состояния коэффициент Штарковского сдвига. Направление смещения (знак коэффициента α_i) определяет характер взаимодействия молекулы с электрическим полем. Молекулы с $\alpha < 0$ втягиваются в область сильного поля (HFS (high-field seeking) молекулы), молекулы с $\alpha > 0$ выталкиваются из поля (LFS (low-field seeking) молекулы).

Наличие дополнительного сдвига энергии, своего для каждого вращательного состояния, приводит к расщеплению потенциала взаимодействия молекулы воды и поверхности [3]. При этом для HFS молекул этот сдвиг увеличивает энергию притяжения стенки (на рис.1 указано синим цветом). Для LFS молекул наличие Штарковского сдвига приводит к появлению дополнительного барьера (на рис.1 изображен красным цветом).

При низких давлениях, когда реализуется Кнудсеновский режим протекания (длина свободного пробега больше характерного размера микроканала), молекулы практически не взаимодействуют между собой. Вследствие этого, определяющим фактором распределения молекул в канале является потенциал взаимодействия, свой для каждого сорта молекул. HFS молекулы при этом смещаются ближе к поверхности, в то время как LFS молекулы группируются вдали от поверхности (см. рис.2). Таким образом, в порах вещества образуется устойчивое распределение LFS и HFS молекул, отличное от равновесного.

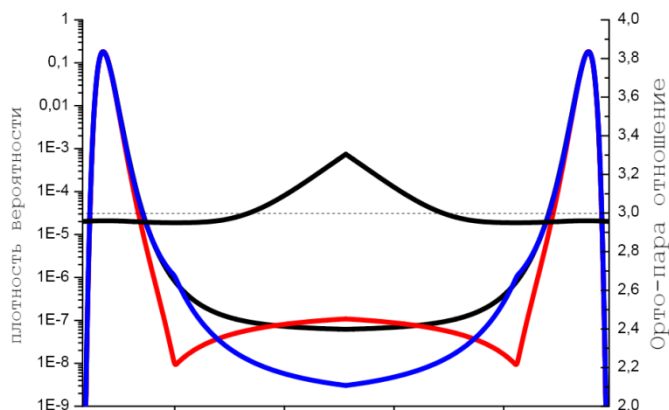


Рис. 2. Распределения молекул воды и отношения числа спин-изомеров воды в

микроканале.

Вместе с разделением молекул по вращательным состояниям происходит их разделение по спиновым изомерам: по своей природе LFS молекулы содержат в себе больше орто-изомеров, в то время как HFS молекулы преимущественно пара-смещены [4].

Таким образом, при движении молекул воды в веществе, обладающим сильными приповерхностными электрическими полями, взаимодействие молекулы и поверхности определяется не только имеющимся электрическим полем, но также и вращательным состоянием отдельной молекулы воды. При низких давлениях, когда реализуется Кнудсеновский режим протекания за счет имеющихся в веществе микропор, молекулы воды перераспределяются в соответствии с потенциалом взаимодействия, что приводит к перераспределению по вращательным состоянием. В результате этого в центральной области микроканалов образуется устойчивая область орто-смещенного водяного пара.

ЛИТЕРАТУРА

1. Конюхов В.К., Прохоров А.М., Тихонов В.И., Файзулаев В.Н. // Письма в ЖЭТФ, 1986, Т.43, стр. 65-67.
2. Tikhonov V.I., Volkov A.A. // Science, 2002, Vol.296, p.2363.
3. Moro R., Bulthuis J., Heinrich J., Kresin V.V. // Physical review A, 2007 Vol. 75., p.013415(5).
4. Капралов П.О., Артёмов В.Г., Лескин А.А., Тихонов В.И., Волков А.А // Краткие сообщения по физике, №7, С.43, 2008.

ИССЛЕДОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ ЭЛЕКТРОЛИТА НА ОСНОВЕ РАСТВОРА LiClO_4 –ЭТИЛЕН КАРБОНАТ МЕТОДОМ ЯДЕРНОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА

Д.А. Лысак¹, А.А. Маринин², С.С. Джимаков¹

¹Кубанский государственный университет

²Институт проблем химической физики РАН

Ldaxx@yandex.ru

Литиевые источники тока получили применение в широком диапазоне устройств: от портативной электроники (сотовые телефоны, фотоаппараты, ноутбуки и т.п.) до гибридных транспортных средств. Одним из компонентов безводных электролитов, используемых в таких источниках тока, является раствор перхлорат лития (LiClO_4)–этилен карбонат ($\text{C}_3\text{H}_4\text{O}_3$). Однако понимание физических свойств таких систем на молекулярном уровне всё ещё ограничено. Хорошо известно, что появление ионных пар в растворе сильно зависит как от взаимодействия ион–растворитель, так и от взаимодействия растворитель–растворитель [1]. Указанные явления оказывают огромное влияние на величины таких важных параметров электролитов, как проводимость и вязкость.

В данной работе проводилось моделирование молекулярной структуры раствора перхлората лития в этилен карбонате с различными молярными концентрациями LiClO_4 , а также сопоставление рассчитанных ЯМР–сдвигов (химических сдвигов) таких систем с их экспериментальными значениями.

ЯМР спектры высокого разрешения на ядрах ^1H , ^7Li , ^{13}C , ^{17}O , ^{35}Cl были измерены на ЯМР спектрометре фирмы Bruker AVANCE III 500 на частотах 500, 194.4, 125.8, 67.8 и 49 МГц соответственно. Для настройки однородности поля в ампулу с образцом помещался капилляр с дейтерированным растворителем (D_2O). Измерения проводились при температуре 40°C (т.к. температура плавления этилен карбоната 39°C). Химические сдвиги для ядер ^1H и ^{13}C измерялись относительно соответствующих ядер тетраметилсилана ($\text{Si}(\text{CH}_3)_4$), для ядер ^7Li и ^{35}Cl –относительно ядер ^7Li и ^{35}Cl одномолярного раствора LiCl в воде, для ядра ^{17}O –относительно ядра ^{17}O в молекуле воды.

Вычисления проводились методом функционала плотности с помощью компьютерной программы для квантовых расчётов “Priroda”, используя обменно–корреляционный функционал PBE (Perdew, Burke and Ernzerhof) [2].

Для указанных вычислений в качестве базисного набора функций, описывающих атомные орбитали, был выбран “sbk.bas”, позволяющий минимизировать по энергии молекулярные системы с приемлемыми вычислительными затратами. Это достигается благодаря тому, что данный базисный набор достаточно точно описывает орбитали валентных

электронов каждого атома, которые играют основную роль при образовании химической связи. При этом орбитали остова внутренних электронов описывается приближённо.

Благодаря влиянию собственных электронов и ближайшего окружения ядро каждого атома вещества, помещённого во внешнее магнитное поле H , находится под действием эффективного магнитного поля

$$H_{эф} = (1 - \sigma)H \quad (1)$$

где σ – константа экранирования.

Для всех неэквивалентных атомных ядер каждой смоделированной системы проводились расчёты констант экранирования σ . При этом в качестве базисного набора функций, описывающих атомные орбитали, использовался базисный набор “hf.bas”, достаточно точно описывающий орбитали остова внутренних электронов, оказывающих основное влияние на величину константы экранирования атомного ядра σ . Однако при экспериментальном ЯМР–исследовании измеряется не величина константы экранирования образца σ , а его химический ЯМР–сдвиг δ , т.е. разность констант экранирования для соответствующего эталонного вещества $\sigma_{эт}$ и для исследуемого образца $\sigma_{об}$

$$\delta = \sigma_{эт} - \sigma_{об}. \quad (2)$$

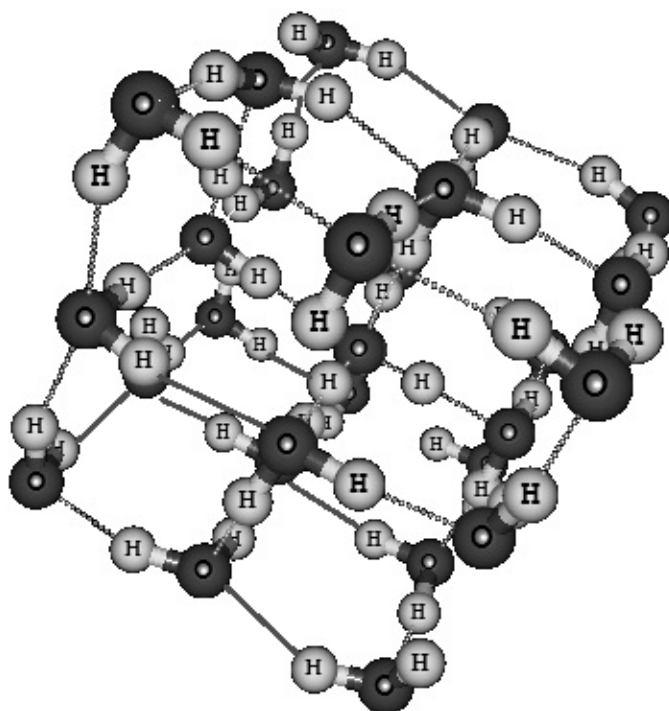


Рис. 1. «Калибровочная» структура воды для расчёта химического сдвига кислорода ^{17}O

Таким образом, для теоретического расчёта химических сдвигов δ прежде всего необходимо найти «калибровочную» структуру эталонного вещества, что является не простой полуэмпирической задачей. В данном исследовании были найдены «калибровочные» структуры для химических сдвигов δ всех изучаемых ядер. Например, «калибровочная» структура воды для расчёта химических сдвигов кислорода ^{17}O состоит из двадцати семи молекул H_2O (Рис. 1).

В зависимости от того какое начальное приближение было выбрано, мы можем найти либо локальный, либо абсолютный минимум полной энергии системы. Поэтому для нахождения реальной конфигурации молекулярного комплекса необходимо найти различные локальные минимумы гамильтониана исследуемой системы, отвечающие всевозможным начальным приближениям. Из всех рассчитанных конфигураций в качестве реальной молекулярной системы выбирается та, которая одновременно отвечает двум критериям:

- 1) теоретическому – минимум средней потенциальной энергии на один атом;
- 2) экспериментальному – минимум среднего относительного отклонения рассчитанных ЯМР–сдвигов δ от их экспериментально измеренных значений.

Теоретически было предсказано и подтверждено экспериментально, что в диапазоне концентраций от 0.01 до 1 моль/литр химические сдвиги ядер, содержащихся в электролите, не изменяются. Это обусловлено тем, что при малых концентрациях соль перхлората лития полностью диссоциирует, а катион (Li^+) и анион (ClO_4^-) не образуют ионной пары. В данной работе при исследовании молекулярной структуры максимально разбавленного раствора (0.01 моль/л) противоионы рассматривались независимо друг от друга, ограничиваясь первой сольватной оболочкой. Были промоделированы кластеры с различным числом молекул этилен карбоната и содержащие либо катион (Li^+), либо анион (ClO_4^-).

Таблица 1. Экспериментально измеренные и теоретические значения химических сдвигов

| Хим. сдвиги ядер | C1, М.Д. | C2, М.Д. | O1, М.Д. | O2, М.Д. | H, М.Д. | Li, М.Д. | Cl, М.Д. |
|-----------------------------|----------|----------|----------|----------|---------|----------|----------|
| 0.01 моль/л (эксперимент) | 156.64 | 65.63 | 214.10 | 109.40 | 4.85 | -0.39 | 1012.37 |
| 3 моль/л (эксперимент) | 158.25 | 66.39 | 198.13 | 113.27 | 4.89 | -0.49 | 1001.00 |
| 0.01 моль/л (теория) | 164.99 | 71.11 | 188.78 | 122.65 | 4.27 | -0.43 | 1011.12 |
| 3 моль/л (теория см. Рис.2) | 165.59 | 71.37 | 205.87 | 118.96 | 4.37 | -0.60 | 1018.16 |

В таблице 1 представлены экспериментально измеренные и теоретически рассчитанные значения химических сдвигов всех содержащихся в электролите ядер для минимальной и максимальной концентраций перхлората лития в растворе этилен карбоната. Не удалось экспериментально определить значения химических сдвигов для ядер кислорода в анионе ClO_4^- . При концентрации перхлората лития 3 моль/литр соль полностью не диссоциирует, что подтверждается экспериментально измеренными значениями химических сдвигов. При этом в растворе присутствует как ионные пары, так и диссоциированные ионы. Ионная пара, смоделированная с помощью квантово-химических расчётов и удовлетворяющая указанным выше критериям, представлена на Рис. 2. Так как между молекулами в жидкости существует быстрый обмен, то на ЯМР спектре наблюдается одна спектральная линия, значение химического сдвига которой соответствуют некоторому среднему значению, что было использовано при теоретическом расчёте.

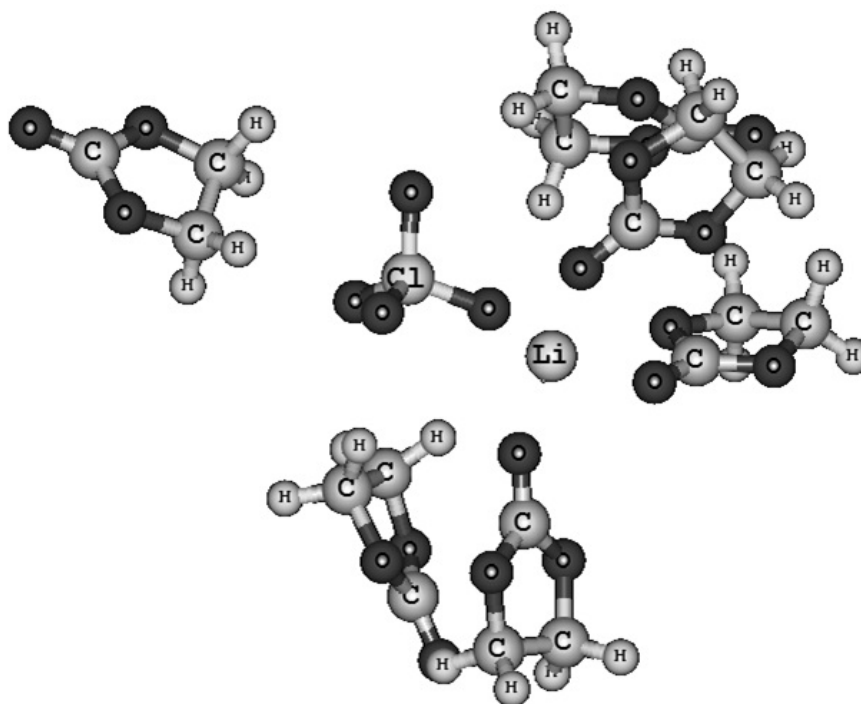


Рис. 2. Ионная пара $\text{Li}^+ - \text{ClO}_4^-$ в растворе этилен карбоната

Была найдена молекулярная структура раствора LiClO_4 в этилен карбонате для различных концентраций перхлората лития, включая максимально разбавленный раствор. При этом средняя относительная погрешность теоретического определения химических сдвигов относительно их экспериментально измеренных значений составила порядка 10%. Было установлено, что координационное число лития равно четырём, что согласуется с результатами, полученными в работе [3].

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Takeuchi // J. Molec. Liq.. 2009. V.148. P. 99
2. J.P. Perdew // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77. No 18. P. 3865.
3. M.D. Bhatt // Ap. Surf. Sc. 2010. V. 257. P. 1463.

СПЕКТРОСКОПИЯ ДИЭЛЕКТРИКОВ С ПОТЕРЯМИ В ОБЛАСТИ НИЗКИХ И МИКРОВОЛНОВЫХ ЧАСТОТ

А.К. Малышкин, Ю.А. Пирогов
Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова,
кафедра фотоники и физики микроволн
mak64msu@yandex.ru

Исследование диэлектрического отклика вещества представляет собой предмет изучения макроскопических проявлений движения составляющих его электронов, ионов, атомных и молекулярных кластеров. В данной области за последние сто лет накоплен большой объем теоретического и экспериментального материала. Он составляет основу сложившихся представлений о фундаментальных процессах в веществе, связанных с поляризацией и проводимостью. Однако тема диэлектрического отклика вещества остается актуальной в силу того, что ежедневно появляются новые прикладные задачи и новые научные гипотезы, требующие проверки.

Актуальные задачи при проведении прикладных измерений обычно связаны с исследованием диэлектрических свойств новых материалов.

Конкретным выражением описания диэлектрических свойств вещества являются действительная и мнимая части диэлектрической проницаемости ϵ , а также проводимость σ , тангенс угла потерь $\text{tg}\delta$ и др.

Современная аппаратура позволяет измерять диэлектрический отклик в огромном диапазоне частот – от ультранизких (10^{-6} Гц) до оптических (10^{15} Гц) при использовании различных типов установок [1, 2] и методов исследований. На этом интервале можно выделить, в основном, два типа методик измерения – импедансные (контактные) и оптические (бесконтактные).

В работе представлен пример совместного использования различных измерительных комплексов с целью расширения частотного диапазона исследования диэлектрических материалов и стыковки полученных результатов.

Для измерения на низких частотах ($f = 10^{-1} \div 10^6$ Гц) была использована контактная методика измерения импеданса. Из спектров импеданса автоматически рассчитываются спектры комплексной диэлектрической проницаемости и комплексной проводимости. Измерительное оборудование в этом интервале частот представляет собой широкополосный диэлектрический спектрометр Concept-40 (NOVOCONTROL).

В диапазоне частот $f = 9,8 \cdot 10^{10} \div 1,4 \cdot 10^{11}$ Гц применялась бесконтактная методика измерения коэффициента пропускания при использовании

миллиметрового спектрометра СМД-Т [1]. Схема измерительной установки показана на рис. 1.

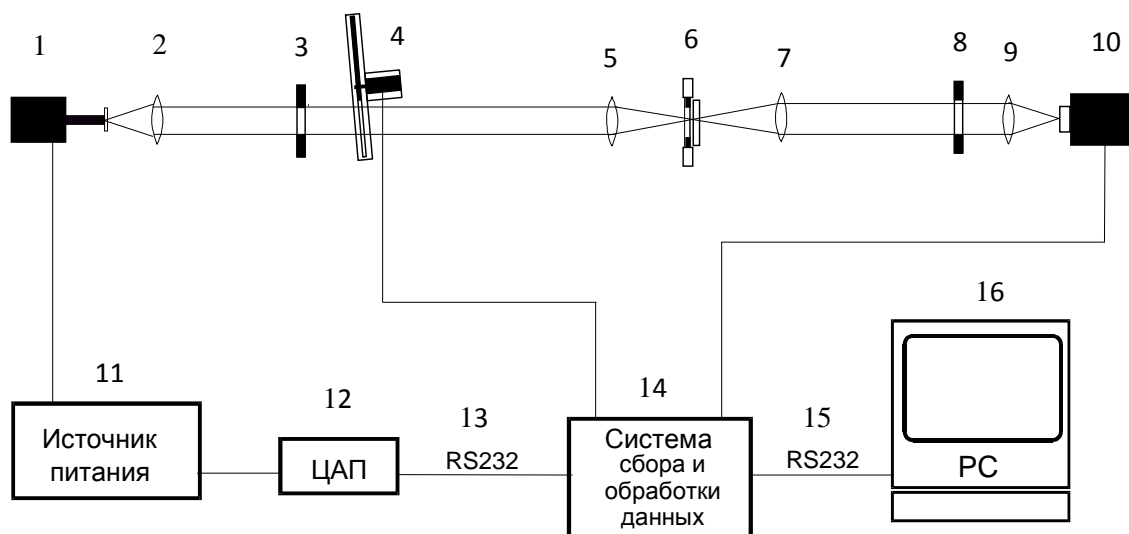


Рис. 1. Схема миллиметрового спектрометра СМД-Т.

- | | |
|---|--|
| 1 – квазиоптический источник излучения, | 11 – прецизионный источник питания, |
| 2, 5, 7, 9 – фторопластовые линзы, | 12 – цифроаналоговый преобразователь, |
| 3, 8 – поглощающие диафрагмы, | 13, 15 – канал связи RS232, |
| 4 – амплитудный модулятор, | 14 – система сбора и обработки данных, |
| 6 – держатель образца, | 16 – персональный компьютер |
| 10 – оптико-акустический приёмник, | |

Принципом работы спектрометра является исследование периодических осцилляций, обусловленных многократным отражением волн (интерференции) внутри образца. При этом период осцилляций определяется коэффициентом преломления n и толщиной d образца, а величина максимумов - диэлектрическими потерями k .

Формула для коэффициентов пропускания T и отражения R плоскопараллельной пластинки с диэлектрическими параметрами ϵ' и ϵ'' в случае нормального падения плоской волны известна из оптики [3]:

$$T = e^{-\frac{4\pi kd}{\lambda}} \frac{(1 - R)^2 + 4R \sin^2 \phi}{(1 - R \cdot e^{-\frac{4\pi kd}{\lambda}})^2 + 4R \cdot e^{-\frac{4\pi kd}{\lambda}} \sin^2(\frac{2\pi nd}{\lambda} + \phi)}, \quad (1)$$

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}, \quad \phi = \arctan \frac{2k}{(n+1)^2 + k^2}, \quad \epsilon' = n^2 - k^2, \quad \epsilon'' = 2nk, \quad \lambda = c/f$$

$$\phi = \frac{2\pi nd}{\lambda} - \arctan \frac{k(n^2 + k^2 - 1)}{n(n^2 + k^2)(2 + n)} + \arctan \frac{R \cdot e^{-\frac{4\pi kd}{\lambda}} \sin 2(\frac{2\pi nd}{\lambda} + \phi)}{1 - R \cdot e^{-\frac{4\pi kd}{\lambda}} \cos 2(\frac{2\pi nd}{\lambda} + \phi)}$$

где d - толщина образца, λ - длина волны, f - частота, c - скорость света, n и k - коэффициенты преломления и поглощения соответственно.

В спектрометре СМД-Т алгоритм расчета диэлектрических спектров материалов состоит из аппроксимации по методу наименьших квадратов теоретической зависимости коэффициента пропускания $T(f)$ (1) к экспериментальной. При этом средние погрешности диэлектрических измерений ϵ' и ϵ'' составляют 1-5% и 5-10% соответственно.

Для совместных исследований важным являлся выбор объекта исследования. Выбор материала был обусловлен желанием иметь образец с неизвестными заранее диэлектрическими параметрами во всем частотном диапазоне. Роль такого тестового материала сыграла таблетка аскорбиновой кислоты ($C_6H_8O_6$), имеющая геометрические размеры, необходимые для использования различных методик измерений.

На графиках, изображенных на рис. 2 и 3, точками в виде квадратов представлены экспериментально полученные значения ϵ' и ϵ'' образца в широком частотном диапазоне. Видно, что полученные разными методами низкочастотные и микроволновые данные вполне согласуются по величине диэлектрической проницаемости на стыковых границах соответствующих областей измерений.

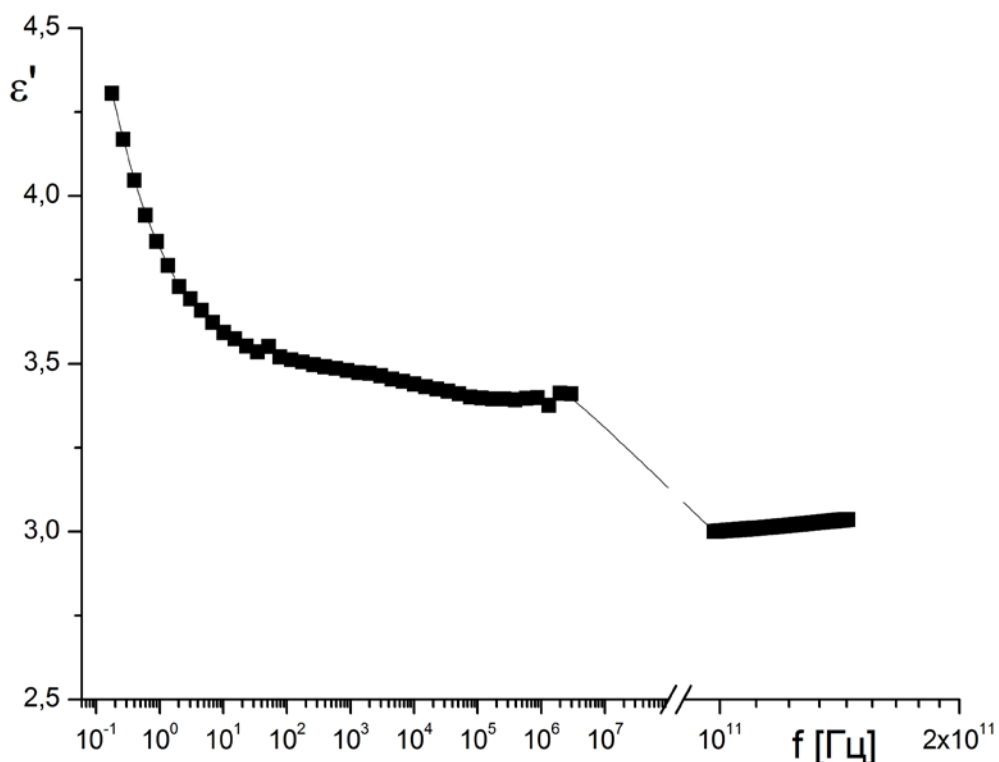


Рис. 2. Частотная зависимость ε' образца в области низких и высоких частот.

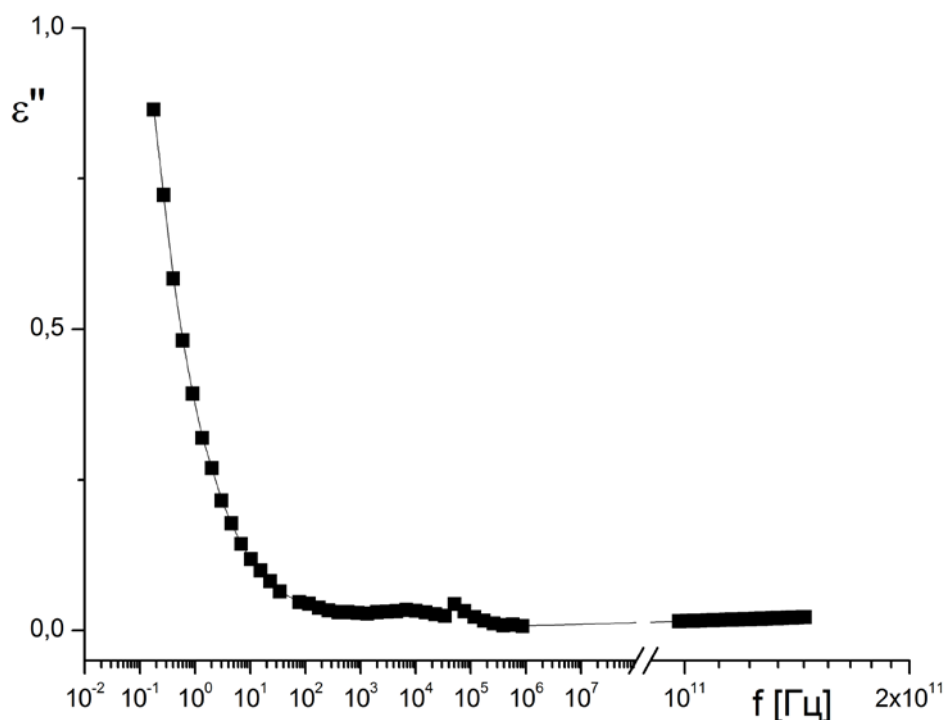


Рис. 3. Зависимость $\varepsilon''(f)$ образца в низкочастотной и микроволновой областях.

Были исследованы также σ и $\operatorname{tg}\delta$ тестового образца. На низких частотах проводимость менялась в диапазоне $\sigma = 8,5 \cdot 10^{-14} \div 3,5 \cdot 10^{-9} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$, достигая в СВЧ-диапазоне величин $\sigma = 8,4 \cdot 10^{-4} \div 1,7 \cdot 10^{-3} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$. Соответственно тангенс угла потерь в области $f = 10^{-1} \div 10^6$ Гц изменялся в пределах $\operatorname{tg}\delta = 2,0 \cdot 10^{-1} \div 2,5 \cdot 10^{-3}$ до $\operatorname{tg}\delta = 5,1 \cdot 10^{-3} \div 7,2 \cdot 10^{-3}$ при $f \approx 10^{11}$ Гц.

И в этом случае диэлектрические параметры тестового образца, полученные с помощью различных измерительных установок и методик, находятся в хорошем соответствии с аппроксимирующей кривой, соединяющей обе области измерений. Кроме того, стоит отметить, что фармацевтическая продукция может послужить перспективным объектом для диэлектрической спектроскопии.

ЛИТЕРАТУРА

1. А.А. Волков, Ю.Г. Гончаров, Г.В. Гончаров, С.П. Лебедев // Труды ИОФАН, том 25. Субмиллиметровая диэлектрическая спектроскопия твердого тела.- М.: Наука, 1990, с. 3-51.
2. Р.Н. Bolivar, М. Bruchersieifer, J.G.Rivas and others // IEEE Trans. on Microwave Theory and Techniques. 2003. V. 51. No 4. P. 1062-1065.

3. М. Борн, Э. Вольф. Основы оптики // Под ред. Мотулевич Г.П.- М.: Наука, 1970.

РЕШЕНИЕ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ В ТЕРАГЕРЦОВОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Е.В. Михайлов, А.В. Козарь, А.Ф. Королев
Физический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова
Кафедра фотоники и физики микроволн
emih@list.ru

Обратные задачи в терагерцовой спектроскопии довольно часто возникают в связи с необходимостью проектирования многослойных покрытий с заранее заданными спектральными характеристиками (задаваться могут спектры прохождения и отражения), а также при исследовании характеристик образцов на основе измерений спектров пропускания и отражения.

Исследуемый образец с неизвестной пространственной и частотной зависимостью показателя преломления может быть представлен совокупностью плоскопараллельных слоев, причем полагается, что внутри каждого слоя показатель преломления не зависит от пространственных координат. Таким образом, задача определения пространственных и частотных электрофизических характеристик сводится к обратной задаче по определению параметров слоев многослойной системы.

В то время как прямые задачи по определению спектров прохождения и отражения в слоистых средах теоретически исследованы и представлены в классической литературе [1], обратные задачи представляют сложности как при выборе начального приближения, так и при выборе модели образца [2].

Измерения проводились на квазиоптической установке «Эпсилон». Запись спектра прохождения $T(\nu)$ для исключения аппаратной функции спектрометра производилась в два этапа: измерялись спектры прохождения - с образцом и без образца в тракте, а затем рассчитывался спектр прохождения $T(\nu)$ путем деления двух массивов чисел – основного на калибровочный. Диапазон измерений лежал в пределах от 123 ГГц до 180 ГГц. При решении обратных задач использовался метод игольчатых вариаций [3][4]. Достоинство данного метода заключается в том, что он достаточно нечувствителен к выбору начального приближения, что при недостатке начальной информации представляется очень полезным.

На рис. 1 можно видеть результат решения обратной задачи на примере плоскопараллельной кварцевой пластинки. Как видно из графиков, в результате было получено значение показателя преломления n в указанном диапазоне частот с точностью до второго знака равно 1,96, по сравнению с табличным значением 1,98.

В результате аналогичных измерений полупроводниковых образцов было получено, что для кремния было значение n равно 4,2, а табличное значение составляет 3,4.

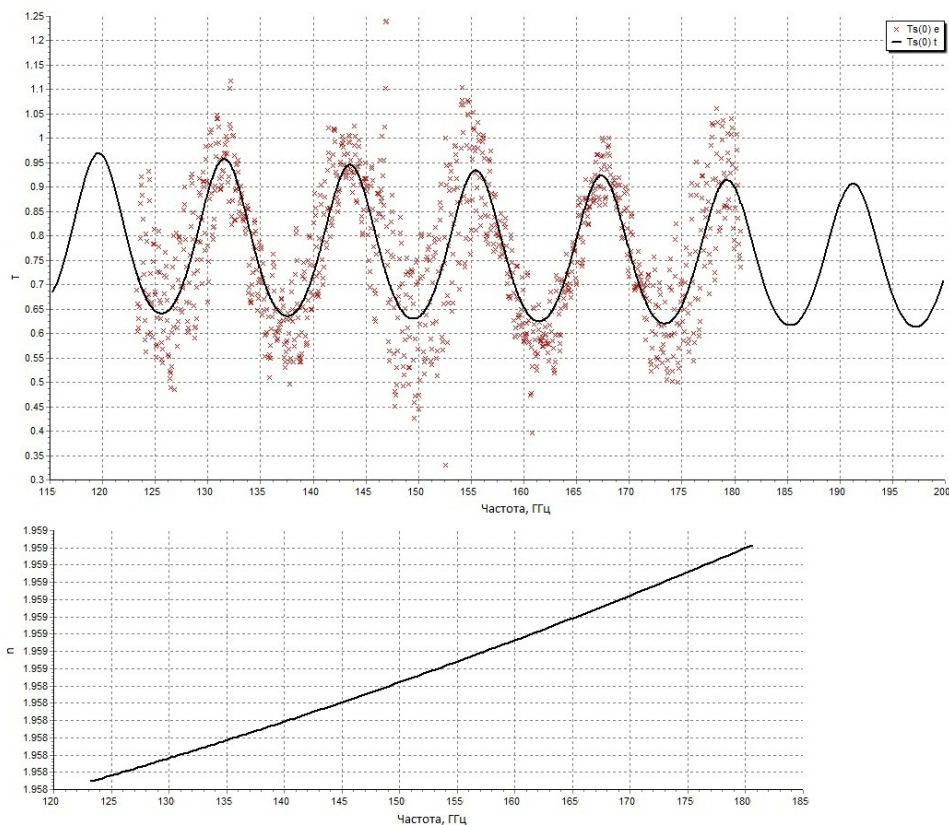


Рис. 1. Результаты обработки спектра пропускания кварцевой плоскопараллельной пластинки.

Таким образом, видно, использованный метод решения обратных задач применим в миллиметровом диапазоне длин волн, результаты расчета согласуются с табличными данными.

ЛИТЕРАТУРА

1. Борн М., Вольф Э. “Основы оптики” М.:Наука, 1983,
2. А.Н. Тихонов, А.В. Гончарский, В.В. Степанов, А.Г. Ягола. “Регуляризирующие алгоритмы и априорная информация. - М.: Наука, 1983,
3. Трубецков, М. К. “Обратные задачи синтеза и распознавания в оптике многослойных покрытий” : Дис. д-ра физ.-мат. наук : 01.04.05 М., 2001
4. Sh. A. Furman and A.V.Tikhonravov “Basics of Optics of Multilayer Systems. Editions Frontier” Gif-sur-Yvette, 1992

ОБМЕН СИГНАЛАМИ МЕЖДУ БИООБЪЕКТАМИ НА ПРИНЦИПЕ
МОДУЛЯЦИИ СВЧ НЕСУЩЕЙ – КОГЕРЕНТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ОН(1.7
ГГц) И ОРТО-Н₂О(22.3 ГГц) КОСМИЧЕСКИХ МАЗЕРОВ

С. М. Першин

*Научный центр волновых исследований, ИОФ им. А.М. Прохорова РАН,
ул. Вавилова 38, Москва 119991, Россия; тел.8499-503-87-58;*

pershin@kapella.gpi.ru

Сформулирована концепция однобитовой (да-нет) биокоммуникации на основе известного в радиофизике принципа модуляции несущей и резонансных приемо-передающих устройств. В качестве несущей предложено когерентное СВЧ излучение космических мазеров на молекулах ОН (1.7 ГГц) и орто-Н₂О (22.3 ГГц). Обнаруженные нами вращательные резонансы этих молекул в воде и водных растворах биомолекул рассмотрены как резонансы контуров приемника и передатчика.

Физический механизм обмена сигналами между био-объектами (биокоммуникация) давно занимает исследователей. При этом хорошо изучен дистанционный обмен сигналами по зрительному и акустическому каналу связи, а также хемокоммуникация с помощью пахучих веществ-феромонов. Однако в некоторых случаях биокоммуникацию невозможно объяснить без привлечения электромагнитного канала связи. Например, при делении икринок вьюна были обнаружен обмен сигналами между разделенными объемами с икрой, что проявлялось в рождении вьюнов-уродов [1]. Наибольший интерес представляет биокоммуникация между людьми. Имеются факты, когда близкие родственники, чаще матери, испытывают дискомфорт, если их дети попадают в сложную ситуацию или погибают. В Стэнфорде, США были проведены десятки экспериментов по установлению достоверности дистанционного обмена сигналами между участниками (индуктор и реципиент) на расстоянии в сотни километров [2]. А.Тараторин и др. [<http://lib.ru/ZHURNAL/istoria.txt>] интенсивно изучали механизм биокоммуникации в ИРЭ РАН в 1988-89гг.

Предлагаемые модели обмена сигналами не соответствуют существующим физическим представлениям. Основным ограничением является нарушение закона сохранения энергии. Ранее [3] нами был предложен механизм обмена сигналами между удаленными объектами, который не противоречит закону сохранения энергии и принципам радиосвязи на основе модуляции несущей частоты.

Базовый принцип. Известно, что прием информации детекторным приемником (без нарушения закона сохранения энергии) не требует дополнительной энергии. Таким образом, если био-объекты обладают резонансными частотами и существует внешний источник несущей на этих

частотах, то необходимые требования для обеспечения канала связи между ними формально будут выполнены. Данная концепция разработана на основе экспериментально установленного нами нового физического явления: вращения молекул в воде и водных растворах биополимеров [4]. Пример четырехфотонного спектра воды в субтерагерцовом диапазоне показан на рис.1. Наши выводы о наличии мономеров H_2O в воде были подтверждены независимыми исследованиями в США [5].

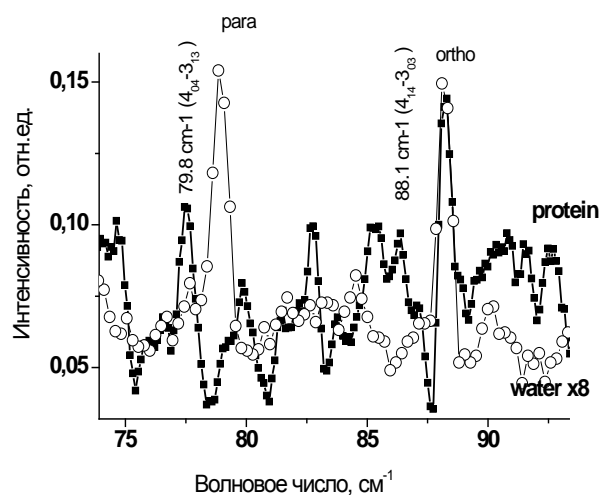


Рис.1. Спектр четырехфотонного рассеяния в воде (круги), увеличенного в 8 раз, и в растворе белка (квадраты)

Более того, в водных растворах белков и ДНК происходит селективное взаимодействие пара-изомеров с биомолекулами [4]. Амплитуда линий этих изомеров уменьшается, тогда как концентрации орто-изомеров увеличивается в таких растворах (см. Рис.1).

По-видимому, впервые узкие (~1-3 ГГц) линии в воде, в растворах солей и тканях человека были получены в СВЧ спектроскопии поглощения [6], которые показаны на рис.2а и 2б. Признание факта вращения молекул позволяет теперь отнести эти экстремумы к резонансам молекул OH , H_2O и H_2O_2 , частоты которых попадают в эти диапазоны. Например, спектр вращательных линий на рис.3 удовлетворительно совпадает с видом полос на рис.2. Важно, что эти молекулы есть и в тканях человека [6]. Например, вода, нагретая ладонью руки, отличается большей проводимостью, чем при электроподогреве [7]. Несомненно, этот факт заставляет признать присутствие резонансных линий в воде и в излучении ладони

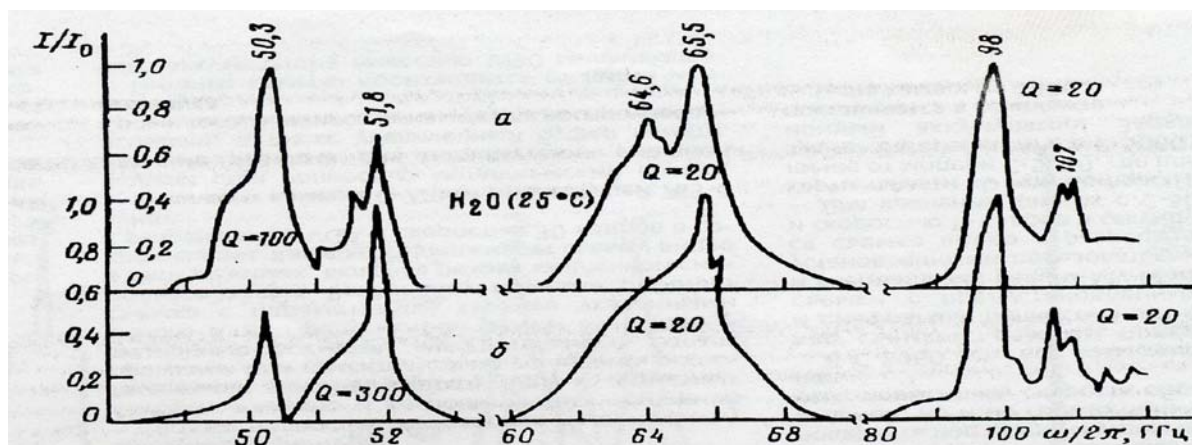


Рис.2. Линии поглощения в объемной воде (а), тканях человека (б) из работы [6].

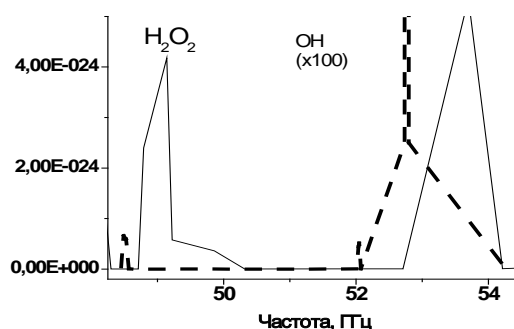


Рис.3. Вращательный спектр молекул H_2O_2 (линия), OH (пунктир).

Вторым базовым физическим явлением в основе нашей концепции [3], является генерация когерентного СВЧ излучения звездными мазерами [8] на вращательных переходах молекулы воды H_2O и гидроксила OH . Эти мазеры распределены во всех частях Вселенной на небесной сфере. Они непрерывно облучают Землю на частотах, сопоставимых с несущей частотой средств мобильной связи.

Зная эти экспериментальные факты, допустим, что в рассматриваемом случае несущей является излучение космических мазеров (на H_2O , 0.74 см^{-1} , 22.25 ГГц, длина волны 1.35см, а также OH , 1.667 ГГц, длина волны ~18см), а приемником (или модулятором передатчика) являются резонансные переходы в молекулах воды или гидроксила. Если предположить, что эмоции изменяют концентрацию OH и соотношение орто-пара спин-изомеров H_2O в организме, то модуляция несущей будет зависеть от эмоционального состояния организма: радость, страх и пр. Известно [9], что вода есть неравновесная жидкость (в смысле спиновой температуры) и любое слабое возмущение будет увеличивать отношение орто/пара. Тогда становится понятным возможный механизм обмена не только между био-объектами, но и влияние на жидкую воду в объеме [4].

Существенно, что частоты мазеров лежат в микроволновом диапазоне, излучение которого проникает в здания и обеспечивает взаимодействие объектов внутри помещений.

Средства мобильной связи, работающие в полосе частот в окрестности 0.9 и 1.7-1.8 ГГц, существенно увеличили уровень электромагнитного фона (загрязнения). Этот фон может оказывать возмущающее действие на биологические объекты посредством возбуждения молекул гидроксила ОН на вращательных переходах в полосе 1.6-1.7 ГГц, особенно в ближней зоне антенных комплексов.

Зная теперь возможность резонансного взаимодействия излучения мобильного телефона с организмом, становится понятным несостоятельность утверждения о безвредности излучения якобы из-за его незначительной мощности. Важно, что эта мощность сосредоточена в узком спектральном диапазоне, который может совпадать с резонансом молекул гидроксила, концентрация которых в нейтральной воде не менее чем 10^7 см^{-3} .

Таким образом, находясь в рамках современной физики, можно утверждать, что безконтактный обмен сигналами между био-объектами возможен по схеме радиосвязи без каких-либо нарушений законов сохранения энергии с использованием излучения космических мазеров как неиссякаемого источника несущей. Несомненно, необходимы отдельные эксперименты для подтверждения этой концепции.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Бурлаков и др. // ДАН. 1999. Т. 368. С. 562.
2. H. Puthoff and R. Targ // Proc. IEEE. 1976. V. 64. P. 329.
3. С.М. Першин, Труды конф. «Водные экосистемы, организмы и инновации», изд. Биологический ф-т МГУ, 15 окт. 2005. С. 27.
4. А.Ф. Бункин, С. М. Першин, С.А. Потехин, Р.С. Хусаинова // Биофизика. 2009. Т. 54. No 3. С. 275.; S.M. Pershin, A.F. Bunkin, N.V. Anisimov, Yu.A. Pirogov // Laser Physics. 2009. V. 19. No 3. P. 1.
5. H. Huang, et al. // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 2009. V. 106. No 36. P. 15214; www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.0904743106
6. В. Петросян, Ю.В. Гуляев и др. // Радиотехника и электроника. 1995. В. 1, С. 127.
7. О.В. Бецкий, В.В. Кислов, Н.Н. Лебедева «Миллиметровые волны и живые системы». М.: «Сайнс-Пресс», 2004.
8. В.С. Стрельницкий // Космические мазеры. УФН. 1974. Т. 113. С. 463.
9. S.M. Pershin, A.F. Bunkin // Laser Phys. 2009. V. 19. No 7. 1410.

РАДИОВИДЕНИЕ, ТОМОГРАФИЯ И МОЛЕКУЛЯРНАЯ ВИЗУАЛИЗАЦИЯ

Ю.А. Пирогов

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Центр магнитной томографии и спектроскопии

Физический факультет, кафедра фотоники и физики микроволн

yuri937@gmail.com

Обсуждаются физические основы и современные применения систем радиовидения, которые являются альтернативой оптическим средствам, бессильных для видения через оптически непрозрачный камуфляж или при интроскопии живых и неживых объектов. Системы радиовидения подразделяются на активные и пассивные устройства [1]. Достоинством пассивных систем, основанных на обнаружении радиотепловых образов, является абсолютная скрытность наблюдения, недостатками - относительно невысокое разрешение и низкое быстродействие, связанное с необходимостью накопления сигналов слабых радиотепловых излучений. Активные системы радиовидения намного чувствительней и хороши для работы в реальном времени и объемной (3D) интроскопии.

Представлены современные применения и направления разработок систем радиовидения - радиоастрономия, слепая посадка самолетов в плохих погодных условиях, досмотровые комплексы обнаружения спрятанных под одеждой потенциально опасных предметов (оружия, взрывчатки и взрывных устройств), ряд специальных применений. Анализируются тенденции развития радиовидения - переход к наиболее коротким (терагерцовым) волнам, разработки новой элементной базы, применение фазированных антенных решеток для сканирования наблюдаемых радиосцен.

На основе краткого обзора томографических способов интроскопии в особое положение выделяется магнитно-резонансная томография (МРТ), которую можно отнести к активным средствам радиовидения. В самом деле, в МРТ регистрируется отклик изучаемой среды на падающее радиоизлучение, а 3D сканирование объекта осуществляется за счет пространственно-временной вариации вспомогательных градиентных магнитных полей, наложенных на основное поле, соответствующее частоте магнитного резонанса ядер в молекулах вокселя наблюдаемой среды. Дается представление о современных направлениях разработок в области МРТ, диагностических возможностях и применениях в научных исследованиях [2]. Обсуждаются также новые подходы в МРТ визуализации слабых морфологических изменений в структуре тканей живых организмов, эффективные способы подавления мощных фоновых сигналов и артефактов, затеняющих отклик в области интереса. В качестве

конкретных примеров приводятся уникальные результаты обнаружения дефектов в ряде органов человека и животных: 3D образы раковых опухолей, ишемические образования мозговых тканей и внутренних органов, ненаблюдаемые стандартным методом морфологические отклонения от нормы в структуре отделов головного мозга при шизофрении, рассеянном склерозе и др. Интересные результаты получены в ЦМТС МГУ при комплексном изучении артикуляторных процессов произнесения звуков речи с применением МРТ наблюдений, кино-, фото- съемки и акустической записи.

Наиболее свежим и перспективным направлением МРТ является молекулярная визуализация (Molecular Imaging), позволяющая проследить за движением молекул введенного в организм посредством инъекции лекарственного препарата [3]. Включение в молекулы препарата парамагнитных ионов (Fe, Gd, Mn и т.п.) приводит к появлению яркого сигнала на МРТ изображении в месте нахождения молекул с парамагнитными метками. Таким образом удастся проследить, например, за движением меченых стволовых клеток, биоконтейнеров целевой доставки фармпрепарата, выявить динамику воздействия лекарственных средств на ту или иную патологию. Так, с помощью имеющегося в ЦМТС МГУ высокопольного биоспектротомографа BioSpec 70/30 (Bruker, 7 Тл) удалось проследить процесс восстановления структуры ишемически пораженной ткани головного мозга у подопытных животных, обнаружить целевую доставку меченых гадолинием липосом, содержащих лекарственный препарат, к злокачественной опухоли головного мозга мыши, увидеть стволовые клетки, доставленные к пораженной ткани средечной мышцы малого животного и т.п. Посредством МРТ контроля удалось отработать процедуры нового способа магнитной гипертермии, основанной на применении нанокапсулированных ферритовых (Fe_3O_4) частиц. Их введение в опухоль с последующей магнитной коагуляцией и индукционным разогревом в радиочастотном поле разрушает новообразование и приводит к излечению онкологической болезни.

В заключение обсуждаются социальные и экологические аспекты развития МРТ техники высоких и низких магнитных полей.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ю.А. Пирогов. Пассивное радиовидение в миллиметровом диапазоне длин волн// Изв.вузов. Радиоп физика. 2003, т.46, № 8-9, с.660-670.
2. Н.В. Анисимов, Ю.А. Пирогов, Л.В. Губский, В.В. Гладун. Управление контрастом и информационные технологии в магнитно-резонансной томографии// Под ред. Ю.А. Пирогова.- М.: МГУ, 2005, 145 с.

З. А.Ю. Юдина, А.А. Богданов (мл.), Ю.А. Пирогов. Магнитно-резонансная томография в изучении ангиогенеза и его молекулярных маркеров// Под ред. Ю.А. Пирогова.- М.: МГУ, 2008, 146 с.

СИСТЕМЫ ИСКУССТВЕННОГО ОСЯЗАНИЯ. ОПТИМАЛЬНОЕ КОДИРОВАНИЕ ПОЛЕЙ

В.А. Садовничий, В.А. Винокуров

МГУ

vinokur@narod.ru

Человек наделён пятью чувствами: зрение, слух, осязание, обоняние, вкус. Из этих пяти чувств в современном мире наибольшую информацию приносят зрение и слух. Именно для информации, даваемой этими двумя чувствами, человечество на сегодня добилось поразительных успехов в создании искусственных систем её записи, хранения, обработки, передачи и воспроизведения. Однако, в последнее десятилетие ряд лабораторий и фирм начали разработку и производство компонент систем искусственного осязания (краткая аббревиатура СИО). Основные приложения этих разработок: медицина, оборудование для слепых, оборудование для систем безопасности.

В МГУ работы по созданию систем искусственного осязания ведутся с 2007 года под научным руководством академика В.А. Садовничего. В программе создания СИО участвуют ряд подразделений МГУ им. М.В. Ломоносова, другие университеты России, государственные и частные предприятия. Первые экземпляры искусственных тактильных механорецепторов уже созданы и получили ряд дипломов на российских и международных выставках. Основой координации работ многочисленных научных и производственных коллективов, участвующих в проекте, является математическое описание СИО, дающее общий точный язык разработки. Именно на строгом математическом языке формулируются количественные требования к элементам системы, рассчитываются характеристики и проектируются конструкции этих элементов.

В настоящем докладе рассказывается о физических, математических и технических результатах работ по СИО. Мы формулируем математическое описание СИО и применяем это описание к математическому моделированию конструкций и алгоритмов работы при записи, кодировании, декодировании и интерпретации осязательной информации.

Мы также расскажем о новых математических конструкциях, созданных в ходе исследований СИО, в частности, об оптимальных методах кодирования многомерных полей, разработанных авторами доклада.

С основным содержанием доклада можно ознакомиться по статье [1].

ЛИТЕРАТУРА

1. В.А. Винокуров, В.А. Садовничий // Труды семинара «Время, хаос и математические проблемы». Вып. 4 – М.: Книжный дом «Университет». 2009 г. С. 5-28.

О ВЫЧИСЛЕНИИ ПОТЕНЦИАЛА ВОЗМУЩЕННЫХ ДИСКРЕТНЫХ ОПЕРАТОРОВ ПО ИХ СПЕКТРУ

А.И. Седов¹

¹ *Магнитогорский государственный университет*
sedov-ai@yandex.ru

Пусть Π – прямоугольник со сторонами a и b , $\frac{a^2}{b^2}$ иррациональное число. Рассмотрим оператор T_0 , действующий в $L_2(\Pi)$, порожденный краевой задачей Дирихле:

$$-\Delta v = \lambda v, \quad v|_{\partial\Pi} = 0,$$

где Δ – оператор Лапласа.

Введем оператор $T = \int_0^{\infty} \lambda^{\beta} dE(\lambda)$, где $E(\lambda)$ – спектральное разложение единицы оператора T_0 , $\beta > 3/2$, $\lambda^{\beta} > 0$ при $\lambda > 0$. Поскольку $\frac{a^2}{b^2}$ иррациональное число, то спектр $\sigma(T)$ оператора T однократный. Занумеруем упорядоченные по возрастанию собственные числа $\lambda_{kl} = \left(\frac{\pi^2 k^2}{a^2} + \frac{\pi^2 l^2}{b^2} \right)^{\beta}$ одним индексом.

Рассматривается следующая задача: найти такой оператор P – оператор умножения на функцию p , чтобы спектр оператора $T + P$ совпадал с заданной последовательностью $\{\chi_n\}$ мало отличающейся от последовательности $\{\lambda_n\}$.

Был предложен алгоритм нахождения такой функции и написана программа, реализующая этот алгоритм.

Приведем пример вычисления приближенной функции p для случая: стороны прямоугольника $a = \sqrt[4]{2}$ и $b = 1$; степень $\beta = 2$. Положим $m = 9$. Тогда будем иметь

$$\{\lambda_1, \dots, \lambda_9, \dots\} = \{28,76; 144,66; 218,68; 460,19; 535,21; 929,99; 1060,11; 1380,87; 2329,73, \dots\}$$

Здесь и далее, для экономии места, приведены только две значащих цифры. В качестве возмущенной последовательности возьмем множество

$$\{\chi_1, \dots, \chi_9\} = \{-14,70; 118,56; 189,90; 449,10; 511,75; 903,62; 1051,98; 1372,41; 2324,44\}.$$

Результатом реализации алгоритма является функция

$$\begin{aligned}
 p(x, y) = & -177,59 \cos(5,28x)\cos(6,28y) - 105,16\cos(10,56x)\cos(6,28y) - \\
 & 116,70\cos(5,28x)\cos(12,57y) - 44,36\cos(10,57x)\cos(12,57y) - \\
 & 91,65\cos(15,85x)\cos(6,28y) - 105,39\cos(5,28x)\cos(18,85y) - \\
 & 30,93\cos(15,85x)\cos(12,57y) - 33,09\cos(10,57x)\cos(18,85y) - \\
 & 19,70\cos(15,85x)\cos(18,85y).
 \end{aligned}$$

Обозначим спектр $T + P$, где P оператор умножения на построенную функцию p через $\{\mu_n\}$. Тогда

$$\sum_{n=1}^9 (\mu_n - \lambda_n) \leq 0,000075.$$

Для оператора Штурма-Лиувилля T порожденного краевой задачей Дирихле:

$$-y''(x) = \lambda y, \quad y(0) = y(\pi) = 0,$$

приближенное решение p обратной спектральной задачи для множества

$$\begin{aligned}
 \{\chi_1, \dots, \chi_{20}\} = \\
 \{ 1,58; 3,94; 8,81; 16,05; 25,14; 35,99; 48,91; 64,01; 81,07; 100,00; \\
 120,94; 144,01; 169,05; 196,00; 224,96; 256,00; 289,04; 324,00; 360,97; 400,01 \}
 \end{aligned}$$

приведено на рис. 1.

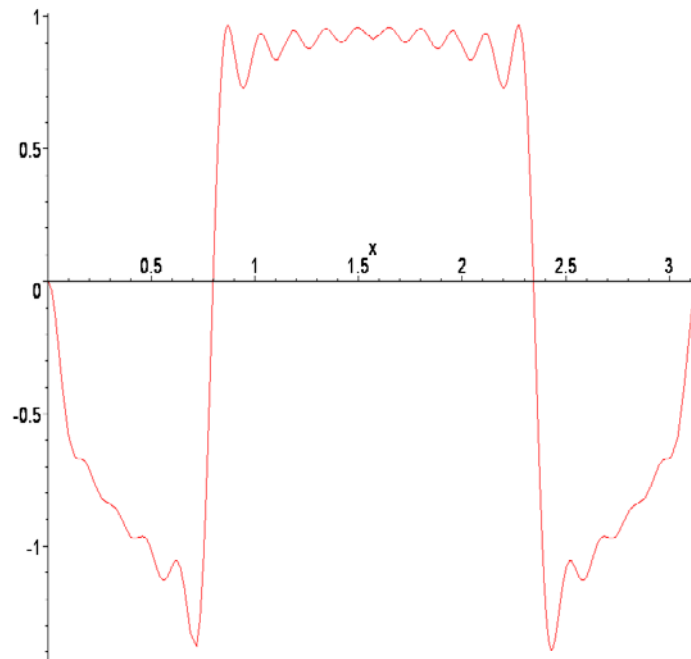


Рис. 1. Приближенная функция p для оператора Штурма-Лиувилля на $[0, \pi]$.

$$p(x) = -1,06 \cos 2x + 0,23 \cos 4x + 0,52 \cos 6x + 0,03 \cos 8x - 0,21 \cos 10x + \\ 0,06 \cos 12x + 0,22 \cos 14x + 0,02 \cos 16x - 0,11 \cos 18x + 0,04 \cos 20x + \\ 0,14 \cos 22x + 0,02 \cos 24x - 0,08 \cos 26x + 0,02 \cos 28x + 0,10 \cos 30x + \\ 0,01 \cos 32x - 0,06 \cos 34x + 0,02 \cos 36x + 0,06 \cos 28x - 0,01 \cos 40x .$$

Приведенные примеры являются иллюстрацией разработанному алгоритму и реализующей его программы. Алгоритм позволяет получать приближенное решение p для самосопряженного дискретного оператора T с ядерной резольвентой, действующего в сепарабельном гильбертовом пространстве [1].

ЛИТЕРАТУРА

1. А.И. Седов // Вестник Южно-Уральского гос.ун-та. Сер. Математическое моделирование и программирование. 2011. Вып. 7. No 4(221) . С. 91-99.