Национальная академия наук Беларуси Министерство образования Республики Беларусь Институт физики имени Б. И. Степанова НАН Беларуси Белорусский государственный университет ОО "Белорусское физическое общество" Белорусский республиканский фонд фундаментальных исследований

ІV КОНГРЕСС ФИЗИКОВ БЕЛАРУСИ

Симпозиум, посвященный 100-летию со дня рождения академика Б.И. Степанова

Belarusian-Swedish-Ukrainian Scientific Workshop on Optics and Laser Physics

24-26 апреля 2013 г.

СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

Минск «Ковчег» 2013 Редакционная коллегия

С.Я. Килин (главный редактор), П.А. Апанасевич, В.М. Анищик, Б.М. Джагаров, В.В. Кабанов, Н.С. Казак, Ю.А. Курочкин, М. Ларссон, В.А. Орлович, Н.А. Поклонский, О.С. Рабинович, В.В. Шепелевич, Е.А. Сафронов, Д.В. Шелковый

IV Конгресс физиков Беларуси (24–26 апреля 2013 г.): Сборник научных трудов. / редкол.: С. Я. Килин (гл. ред) [и др.]. – Минск : Ковчег, 2013. – 462 стр.; ил.

ISBN 978-985-7055-57-9.

Данный сборник содержит материалы докладов IV Конгресса физиков Беларуси, Симпозиума, посвященного 100-летию со дня рождения академика Б.И. Степанова и Белорусско-Шведско-Украинского семинара "Оптика и лазерная физика".

ISBN 978-985-7055-57-9

© ГНУ «Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси», 2013 © Оформление. ООО «Ковчег», 2013



Лауреат Государственных премий СССР, Государственной премии БССР, Герой Социалистического Труда, академик Борис Иванович Степанов

НАУЧНАЯ БИОГРАФИЯ Б.И. СТЕПАНОВА

Борис Иванович Степанов (28.04.1913, Санкт-Петербург - 07.12.1987), один из основателей белорусской школы физики. Академик Национальной академии наук Беларуси (1953), доктор физико-математических наук (1949), профессор (1953). Герой Социалистического Труда (1973). Заслуженный деятель науки БССР (1967). Почетный доктор Сегедского университета (Венгрия, 1971). Участник Великой Отечественной войны. Депутат Верховного Совета БССР в 1971-1986 гг.

Степанов родился в Санкт-Петербурге. После окончания девятилетки, учился в ФЗУ, в 1930 поступил в Ленинградский университет. С 1934 одновременно работал в ГОИ. После окончания университета в 1936 поступил в аспирантуру ГОИ, где уже работал лаборантом с 1934. Через три года защитил кандидатскую диссертацию на тему "Исследование резонансных возмущений в спектрах двухатомных молекул". В июле 1941 ушел добровольцем на фронт, воевал в составе 162-го партизанского отряда Ленинградского фронта, а затем на Сталинградском фронте. В январе 1943 отозван из армии для научной работы в ГОИ, находившемся тогда в эвакуации в Йошкар-Оле. В 1948 Степанов защитил докторскую диссертацию по теме "Расчет частот колебаний сложных органических молекул". До 1953 Степанов работал в ГОИ (с 1951 в должности начальника лаборатории). Одновременно работал в Ленинградском институте точной механики и оптики (ЛИТМО). Один из создателей инженерно-физического факультета ЛИТМО. Доцент, профессор кафедры Теоретической физики (1946-51).

В 1953 приглашен в Академию наук АН БССР. Принял активное участие в организации ИФ АН БССР. в 1955-73 заведовал лабораторией, в 1957-85 был директором института. Одновременно с 1953 — профессор БГУ, до 1963 возглавлял кафедру спектрального анализа. В 1985-87 член и советник Президиума АН БССР. С 1964 и до конца жизни — главный редактор выходящего в Минске всесоюзного "Журнала прикладной спектроскопии".

Степанов был членом КПСС с 1939, в 1971-86 депутатом Верховного Совета БССР.

Работы Степанова относятся к области спектроскопии, люминесценции, квантовой электронике, нелинейной оптике, лазерной оптической голографии, истории оптики.

В 1939 им развита теория аномалий в спектрах двухатомных молекул на основе численного определения параметров взаимодействия уровней из экспериментальных данных. В 1948 Степанов предложил эффективные методы расчета колебательных спектров сложных органических молекул. Стройная теория многоатомных молекул была изложена в двухтомной классической монографии «Колебания молекул» (соавторы — М.В. Волькенштейн и М.А. Ельяшевич), удостоенной в 1950 Государственной премии СССР.

В 1950-е годы Степановым была построена квантовомеханическая теория люминесценции сложных молекул, позволяющая единым образом описать ее характеристики и основные экспериментальные факты. В 1957 он показал, что спектры поглощения и люминесценции сложных молекул связаны между собой соотношением,

не зависящим от индивидуальных свойств молекул (универсальное соотношение Степанова).

В 1959 Степанов разработал теоретические основы спектроскопии отрицательных световых потоков, предсказал на ее основе существование новых оптических явлений — отрицательной люминесценции и отрицательного фотоэффекта.

В 1964 Степанов вместе с учениками предложил простые вероятностные методы расчета энергетических и временных характеристик лазерных систем. В большом цикле работ с единых физических позиций были рассмотрены все стороны процесса генерации. За этот цикл работ Степанову с соавторами (В.П. Грибковский, А.С. Рубанов, А.М. Самсон) в 1976 была присуждена Государственная премия БССР.

Широкое признание получили работы Степанова, связанные с открытием нового класса лазерных сред — органических красителей. Сначала в 1964 им совместно с А.Н. Рубиновым и В.А. Мостовниковым теоретически предсказана возможность, а спустя три года (одновременно с учеными США и ФРГ) осуществлена генерация на растворах ряда красителей. В Институте физики АН БССР была создана серия лазеров с плавно перестраиваемой частотой излучения в широкой области спектра. В 1972 эта деятельность была отмечена Государственной премией СССР.

В 1970-е годы Степанов заложил совместно с А.С. Рубановым и Е.В. Ивакиным основы динамической голографии, разработал новые методы преобразования световых пучков. Ими было открыто явление обращения волнового фронта при четырехволновом взаимодействии. Работа по голографической тематике (соавторы — П.А. Апанасевич, А.С. Рубанов, Е.В. Ивакин) в 1982 удостоена Государственной премии СССР.

Б.И. Степанов значительное внимание уделял вопросам истории науки. Его перу принадлежат замечательные очерки из истории оптической науки.

Симпозиум, посвященный 100-летию Б.И. Степанова

УДК 535.37+621.383.4+621.3.011.4

Н.А. Поклонский

Инверсные состояния и процессы в полупроводниках

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь <u>poklonski@bsu.by</u>

Внешнее воздействие вызывает нарушение термодинамического равновесия системы многих частиц в двух направлениях: положительном (увеличение температуры) или отрицательном (уменьшение температуры относительно исходного значения).

Ниже дается краткий комментарий к трем понятиям, связанным с инверсными («отрицательными») состояниями и процессами в полупроводниках и приборных структурах на их основе: 1) отрицательная люминесценция, 2) отрицательная прыжковая фотопроводимость на постоянном токе, 3) отрицательная дифференциальная электрическая емкость (импеданс индуктивного типа).

1) Поглощение и испускание фотонов полупроводниками происходят на фоне окружающего их равновесного (теплового) электромагнитного излучения. Таким образом, при исследованиях необходимо учитывать собственное тепловое излучение исследуемого объекта и приемника этого излучения, а также тепловое излучение, имеющееся в окружающей их среде и попадающее на объект и приемник. Отрицательная люминесценция (см., например, [1-7]) — дефицит мощности спонтанного испускания фотонов системой по сравнению с мощностью теплового излучения системы в заданном интервале энергий фотонов. Абсолютное значение мощности отрицательной люминесценции не может быть больше фона теплового испускания системы в заданном интервале частот электромагнитных волн. Одним из проявлений отрицательной люминесценции полупроводников является эффект радиационного охлаждения ими окружающих тел. Так, если внешним воздействием на полупроводник концентрации неравновесных электронов в *с*-зоне и/или дырок в *v*-зоне поддерживаются меньшими их равновесных значений, то интенсивность излучательной рекомбинации становится ниже интенсивности теплового излучения. В результате для фотонов с энергией, большей ширины запрещенной энергетической зоны (щели), поглощение доминирует над излучением, т. е. «возникает» поток фотонов извне к поверхности полупроводника. Таким образом, в этой части спектра энергий фотонов полупроводник поглощает тепловое излучение окружающих его тел и тем самым может понижать их температуру.

2) Следуя работам [8,9], кратко рассматриваются условия возникновения отрицательной фотопроводимости компенсированных полупроводников в условиях доминирования прыжковой миграции электронов и/или дырок (электронных вакансий) как по водородоподобным атомам примеси, так и по точечным дефектам одного сорта, находящимся в трех зарядовых состояниях (-1, 0, +1) на фоне трехмерной кристаллической матрицы. Обсуждаются также вопросы разработки болометров для познания холодной Вселенной (см., например, [10, 11]).

3) В микро- и наноэлектронике существует потребность в твердотельных аналогах катушек индуктивности, так как обычные катушки из-за их больших геометрических размеров не всегда могут применяться в интегральных схемах, изготавливаемых по планарной технологии на кристаллическом кремнии. Ясно, что вместо катушек индуктивности в интегральных схемах целесообразно использовать отдельные полупроводниковые элементы с отрицательной емкостью (импедансом индуктивного типа). Оказывается, что отрицательная дифференциальная электрическая емкость реализуется в кремниевых p^+ -*n*-диодах с радиационными дефектами [12,13]. Такие диоды позволяют «синтезировать» электрические параметры катушек индуктивности. Аналоги катушек индуктивности на основе диодов с большой локальной концентрацией радиационных дефектов вполне пригодны для микроминиатюризации электрических фильтров и фазосдвигающих цепей в интегральном исполнении.

- [1] Антонов-Романовский, В.В. Выход люминесценции системы с тремя уровнями энергии / В.В. Антонов-Романовский, Б.И. Степанов, М.В. Фок, А.П. Хапалюк // ДАН СССР. 1955. Т. 105. С. 50.
- [2] Степанов, Б.И. Основы спектроскопии отрицательных световых потоков / Б.И. Степанов. Минск: БГУ, 1961. 124 с.
- [3] Stepanov, B.I. Theory of luminescence / B.I. Stepanov, V.P. Gribkovskii. New York: Gordon & Breach, 1969. 506 p.
- [4] Степанов, Б.И. Введение в современную оптику: Фотометрия. О возможном и невозможном в оптике / Б.И. Степанов. Минск: Наука и техника, 1989. 254 с.
- [5] Malyutenko, V.K. Negative luminescence in semiconductors: a retrospective view / V.K. Malyutenko // Physica E. – 2004. – V. 20. – P. 553.
- [6] Петрушкин, С.В. Лазерное охлаждение твердых тел / С.В. Петрушкин, В.В. Самарцев. Москва: Физматлит, 2005. 224 с.
- [7] Иванов-Омский, В.И. Отрицательная люминесценция и приборы на ее основе / В.И. Иванов-Омский, Б.А. Матвеев // ФТП. 2007. Т. 41. С. 257.
- [8] Поклонский, Н.А. Модель прыжковой и зонной фотопроводимости на постоянном токе в легированных кристаллах / Н.А. Поклонский, С.Ю. Лопатин // ФТТ. – 2000. – Т. 42. – С. 218.
- [9] Поклонский, Н.А. Расчет электрической емкости самокомпенсированных полупроводников с межцентровыми прыжками одного и двух электронов (на примере кремния с радиационными дефектами) / Н.А. Поклонский, С.А. Вырко, А.Г. Забродский // ФТП. 2008. Т. 42. С. 1420.
- [10] Кузьмин, Л.С. Сверхчувствительные болометры на холодных электронах для исследования темной материи и темной энергии / Л.С. Кузьмин // УФН. – 2005. – Т. 175. – С. 549.
- [11] Фукс, Б.И. Использование теории переходных процессов в высокоомных полупроводниках для определения структуры холодной Вселенной / Б.И. Фукс // ФТП. 2009. Т. 43. С. 769.
- [12] Отрицательная емкость (импеданс индуктивного типа) кремниевых p+-nпереходов, облученных быстрыми электронами / Н.А. Поклонский [и др.] // ФТП. – 2006. – Т. 40. – С. 824.
- [13] Impedance and barrier capacitance of silicon diodes implanted with high-energy Xe ions / N.A. Poklonski [et al.] // Microelectron. Reliab. 2010. V. 50. P. 813.

УДК 535.34

А. Л. Толстик

СИНГУЛЯРНАЯ ДИНАМИЧЕСКАЯ ГОЛОГРАФИЯ

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь tolstik@bsu.by

Работы в области динамической голографии получили развитие в нашей республике в начале 70-х годов, когда в Институте физики АН БССР были записаны первые динамические голограммы и введено понятие динамической голографии [1]. За работы в этом направлении Б.И.Степанов, Е.В.Ивакин, А.С.Рубанов и П.А.Апанасевич были удостоены Государственной премии СССР.

Для записи динамических голограмм используются среды, которые в реальном времени под действием лазерного излучения изменяют коэффициент поглощения и/или показатель преломления. Динамическая голография возникла на стыке классической голографии и нелинейной оптики, что в короткий промежуток времени позволило разработать новые методы преобразования пространственно-временной структуры лазерного излучения и развить методы и устройства для оптической обработки информации.

Существенное расширение возможностей голографических методов преобразования световых полей связано с переходом к исследованиям многоволновых взаимодействий, реализуемых в резонансных средах при проявлении нелинейностей высших порядков [2]. В таких условиях появляется возможность брегговской дифракции считывающего пучка во второй и более высокие порядки, что позволяет реализовать различные виды преобразований светового пучка (преобразование формы волнового фронта, корректировка искажений пространственной структуры, изменение направления распространения и места фокусировки светового пучка, частотное преобразование объемных изображений и т. д.) [3].

В настоящей работе приведен обзор теоретических и экспериментальных результатов по преобразованию сингулярных световых полей (оптических вихрей) динамическими голограммами в условиях нелинейной голографической записи в средах с резонансной и тепловой нелинейностью. Особенностью сингулярных световых пучков является наличие на волновом фронте особой точки – винтовой дислокации, в которой интенсивность обращается в ноль, а фаза не определена [4]. При обходе вокруг винтовой дислокации по сечению пучка фаза изменяется на величину $2\pi l$, где l – топологический заряд. Сингулярные световые пучки обладают свойством сохранять свой заряд при распространении, что позволяет их использовать для оптической передачи информации, захвата и манипуляции микрообъектами и др.

Сингулярные динамические голограммы, формируются при интерференции гауссовых и сингулярных световых пучков. В результате такой интерференции в области винтовой дислокации образуется характерная вилка, при этом количество разветвлений характеризует величину топологического заряда сигнального пучка.

Показано, что световые пучки, дифрагированные в различные порядки дифракции, отличаются не только направлением распространения, но и фазой дифрагированной волны, которая кратна фазе сигнальной волны (ϕ_D = - $M\phi_S$). При использовании в качестве сигнальной волны сингулярного светового пучка мультиплицирование фазы приводит к мультиплицированию топологического заряда. В результате топологический заряд дифрагированной волны определяется выражением: $l_D = -Ml_S$.

Экспериментальные исследования вырожденных и невырожденных по частоте многоволновых взаимодействий гауссовых и сингулярных световых пучков проведено с использованием этанольных растворов красителя родамин 6ж и полиметинового красителя 3274У. В обеих схемах взаимодействия подтверждено мультиплицирование топологического заряда при использовании различных порядков брегговской дифракции на объемных динамических голограммах, а также реализовано частотное преобразование оптических вихрей (перевод из ИК-области спектра в видимую) [5].

Дополнительные возможности открывают схемы записи динамических голограмм, когда в качестве как сигнальной, так опорной и считывающей волн используются сингулярные световые пучки. В этом случае величина топологического заряда дифрагированного пучка определяется выражением: $l_D = M l_1 + l_2 - M l_S$, которое определяет возможность осуществления алгебраических операций (сложение, вычитание, умножение) при использовании топологического заряда в качестве информационного параметра.

Таким образом, результаты теоретических и экспериментальных исследований преобразования гауссовых и сингулярных световых пучков при многоволновых взаимодействиях иллюстрируют широкие возможности использования сингулярных динамических голограмм в системах управления пространственной и фазовой структурой лазерного излучения. При этом возможна реализация мультиплицирования топологического заряда, а также частотного преобразования изображений, что перспективно для визуализации сингулярных световых полей со сложной топологической структурой, а также для кодировки информации при рассмотрении топологического заряда в качестве информационного параметра.

- [1] Степанов Б. И. О регистрации плоских и объемных динамических голограмм в просветляющихся веществах / Б. И. Степанов, Е. В. Ивакин, А. С. Рубанов // ДАН СССР. 1971. Т. 196. С. 567–571.
- [2] Rubanov A. S. Nonlinear formation of dynamic holograms and multiwave mixing in resonant media / A. S. Rubanov, A. L. Tolstik, S. M. Karpuk, O. Ormachea // Optics Commun. – 2000. – V. 181. – P. 183–190.
- [3] Ormachea O. Frequency up-conversion of coherent images by intracavity nondegenerate four-wave mixing / O. Ormachea, O. G. Romanov, A. L. Tolstik et. al. // Optics Express. - 2006. – V.14. – P. 8298–8304.
- [4] Soskin M. S. Topological charge and angular momentum of light beams carrying optical vortices / M. S. Soskin, V. N. Gorshkov, M. V. Vasnetsov et. al. // Phys. Review A. – 1997. – V. 56. – P. 4064-4075.
- [5] Романов О. Г. Частотное преобразование оптических вихрей при невырожденном многоволновом взаимодействии в растворах красителей / О. Г. Романов, Д. В. Горбач, А.Л. Толстик // Оптика и спектроскопия. 2010. Т. 108. С.812–817.

УДК 535

В. А. Савва

БОРИС ИВАНОВИЧ СТЕПАНОВ У ИСТОКОВ ЛАЗЕРНОЙ ФИЗИКИ В БЕЛАРУСИ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь v.savva@ifanbel.bas-net.by

Борис Иванович Степанов – создатель научной школы лазерных исследований в республике Беларусь. Степановская лазерно-оптическая школа сформировалась вслед за московскими школами, раньше, чем в других республиках Союза. Первая в СССР Конференция по лазерам была проведена в Беларуси на берегу озера Нарочь. Эта Всесоюзная конференция по когерентной и нелинейной оптике проводится до сих пор. Инициатива учредить ее исходила из Минска и оказала организующее влияние на развитие лазерно-физических исследований в Советском Союзе.

Лазер с момента создания воспринимался как нечто необычное, вызывал смутное предчувствие невиданных применений. Было очевидно – он изменит лик оптики и спектроскопии, так оно и произошло. Институт физики был, в основном, оптическим институтом, и его директор Б.И. Степанов остро осознавал – надо выходить на новую дорогу, к новым идеям. Стремление уйти от старого было для него не меньшим стимулом, чем привлекательность нового, которое было непонятным, незнакомым, можно сказать, пугающим. Оптик и спектроскопии. Его призыв был услышан, хотя и не всеми, не сразу, не без опасений. Эту черту Б.И. Степанова – острое чувство новизны в науке, бесстрашно вступать на новые научные пути хорошо знали ученики и сотрудники Института. Редкое ценное качество – одно из ярких свидетельств незаурядности человека, его творческого характера.

Краткая хроника создания школы: не только призывы, но целая система мер. Впервые в республике он начал читать спецкурс по лазерам на физфаке. Завлекал, готовил, отбирал студентов для работы в Институте. Заключил ряд хоздоговоров по лазерным исследованиям с ГОИ и ЛОМО (Ленинград). Потом установились связи с научными и производственными учреждениями Подмосковья, Рязани и др. Б.И. Степанов привез в Институт подарок – выращенный в Институте кристаллографии (Москва) кристалл рубина. Эту драгоценную лазерную среду две экспериментальные группы, соревнуясь, использовали, создав первые в Беларуси лазерные установки. Первый рубиновый лазер заработал! Было положено начало экспериментальным лазерным работам в Институте, а потом и в других организациях Республики.

Создание школы, исследований в области лазерной физики в Беларуси – выдающееся научное достижение Б.И. Степанова, что позволяет рассматривать эту незаурядную личность как культурное явление в истории нашей страны.

Особенностью Степанова физика-теоретика был его принцип построения описания физического процесса – наиболее простой подход (теория), который уже нельзя упростить без потери существа дела. Тогда рельефно выявляется сущность

процесса. Не многие физики-теоретики следуют этому подходу, в чем многократно приходилось убеждаться.

На начальном этапе формирования физики лазеров Б.И. Степанов и теоретики его школы разработали и широко использовали довольно простой подход к описанию работы лазера. Его называли вероятностным методом. Он представлял собой обобщение, развитие подхода А. Эйнштейна, который ввел коэффициенты А и В для спонтанного и вынужденного испускания при взаимодействии излучения со средой в термодинамического равновесия. Метод использовали состоянии оптики и спектроскописты при описании люминесценции. Он содержал нелинейные балансные уравнения для плотности излучения и для населенностей уровней лазерной среды. Метод удивительно хорошо работал как при описании стационарной генерации, так и динамических режимов лазеров (пичковая и моноимпульсная генерация). В методе в явном виде не содержалась квантовая поляризация среды. Для тех, кто пришел в лазерную физику из квантовой радиофизики, от мазеров, было непонятно, как можно не учитывать поляризацию среды, т.е. дипольный момент единицы ее объема. Куда делось дифференциальное уравнение второго порядка для этой величины. С этих позиций метод неоднократно подвергался критике со стороны теоретиков других школ. Б.И. Степанов, напротив, настойчиво его пропагандировал. Как теоретик, он знал, всякая теория имеет границы и призвал молодых сотрудников исследовать границы применимости вероятностного метода.

В научных дискуссиях оппоненты метода неоднократно приводили яркий пример: излучение падает на невозбужденную среду, вероятностный метод дает плавный ход населенностей во времени, а более строгое описание на основе уравнения Шредингера или уравнения Блоха для матрицы плотности, т.е. с учетом поляризации среды, дает пульсации Раби, которые испытывают населенности уровней. Разгоралась острая дискуссия. Впрочем, в то время в лазерной физике острые дискуссии проходили почти по всем вопросам.

Уравнения для матрицы плотности превращаются в аналог уравнения для струны. А ее поведение известно, она колеблется. Наличие струны еще не значит, что она будет всегда колебаться. Со временем появился ряд работ, где подробно были исследованы границы применимости вероятностного метода, т.е. балансных уравнений. Свой вклад в решение этой проблемы внесли физики степановской школы, прежде всего, П.А. Апанасевич и А.М. Самсон. И метод балансных уравнений легально занял свое определенное место в физике лазеров. Им и до сих пор пользуются при рассмотрении ряда вопросов лазерной физики, не связанных со сверхбыстрыми процессами в пико- и фемтосекундной временной шкале. Свой научный подход Борис Иванович прививал ученикам. Этот принцип помогал ему в работе, но и осложнял общение с коллегами других научных школ.

Отмечая столетие Бориса Ивановича Степанова, уместно вспомнить яркую личность, его деятельность, результаты. Я хочу подчеркнуть, что он по праву занимает достойное место в ряду лучших творцов культуры нашей страны (а наука – это часть культуры, может быть, лучшая ее часть).

Физика фундаментальных взаимодействий, теоретическая физика

УДК 539.12

И.Д.Феранчук, А.И.Бенедиктович, А.В.Леонов, К.Ф.Кривулько

ИМПУЛЬСНОЕ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ РЕНТГЕНОВСКОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ОТ ЭЛЕКТРОННЫХ СГУСТКОВ В КРИСТАЛЛЕ

Белорусский государственный университет, пр.Независимости, 4, 220030, Минск, Беларусь ilya.feranchuk@bsu.by

Использование источников, генерирующих ультракороткие импульсы рентгеновского излучения, открывают новые возможности для анализа структуры материалов и динамики процессов в конденсированных средах. Основное направление в этой области связано с рентгеновскими лазерами на свободных электронах (РЛСЭ). Большое число фотонов в в одном импульсе делает возможным регистрировать полный образ нанообъекта или полную дифракционную картину за одно измерение с длительностью в несколько фемтосекунд. Несмотря на полное разрушение исследуемого объекта после измерения, теоретически и экспериментально доказано, что дифракционная картина успевает сформироваться до того, как кристалл начинает разрушаться.

Этот результат открывает новые возможности для использования параметрического рентгеновского излучения (ПРИ) от релятивистских электронов, движущихся в кристалле. Ранее было показано (см. [1] и цитированную литературу), что выход монохроматических рентгеновских квантов от одного электрона вследствие механизма ПРИ существенно выше, чем вследствие других радиационных механизмов, включая синхротронное и ондуляторное излучение. В то же время интегральный выход ПРИ на линейных ускорителях достаточно низкий, поскольку оно обычно рассматривается для стационарного тока электронов J. Эта величина сильно ограничена, поскольку кристалл разрушается при среднем токе $\bar{J} \ge 1 \ mA$. Однако, если рассмотреть сгусток с высокой плотностью электронов, но с длительностью ~ 100 fs, то кристаллическая структура будет сохраняться в течение этого времени и импульс ПРИ с такой же длительностью и высокой спектральной плотностью фотонов успевает сформироваться. Такой импульс будет обладать достоинствами, присущими ПРИ, такими как : i) малой угловой расходимостью; ii) возможностью плавной перестройки частоты испускаемых фотонов.

Существенно также, что оптимальные параметры импульса ПРИ достигаются для энергий электронов $E \geq 50 \ MeV$, что существенно ниже, чем в ускорителях, используемых для РЛСЭ. В работе показано, что электронные сгустки в таких ускорителях с энергией электронов 1 GeV могут генерировать ~ 10^4 монохроматических фотонов с энергией 10 keV от одного сгустка, что соответствует яркости в пике ~ $10^{17} \ photons/(s \ mrad^2 \ 0.1\% \ BW)$ и угловой расходимости ~ $10^{-3} \ rad$. Дальнейшее увеличение яркости такого источника возможно в том случае, когда плотность электронов в сгустке ρ_e будет больше, чем пороговая величина ρ_{th} для параметрической пучковой неустойчивости [1]. Требования к параметрам электронных сгустков также рассмотрены в работе.

[1] Baryshevsky V.G. Parametric X-Ray Radiation in Crystals. Theory, Experiment and Applications/ V.G.Baryshevsky, I.D.Feranchuk and A.P.Ulyanenkov // Springer-Verlag, Berlin Heidelberg - 2005 - P.167

УДК 53.043; 537.87

В. В. Тихомиров^{1,2}, А. И. Сытов^{1,2}, А. А. Голованов²

НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ УПРАВЛЕНИЯ ПУЧКАМИ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ ПРИ ПОМОЩИ КРИСТАЛЛОВ

¹Институт ядерных проблем Белгосуниверситета, ул. Бобруйская, 11, 220030, Минск, Беларусь <u>vvtikh@mail.ru, alex_sytov@mail.ru</u> ²Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь aliaksei.halavanau@gmail.com

Кристаллы широко применяются в физике высоких энергий для генерации жесткого электромагнитного излучения и управления пучками ускорителей – их коллимации и вывода. В работе исследуется возможность применения каналирования частиц в изогнутом кристалле для вывода высокоинтенсивного пучка протонов энергией 8 ГэВ из накопительного кольца (Recycler Ring) в Национальной лаборатории имени Ферми (ФНАЛ) в США. Планируется направлять последовательность банчей на кристалл при помощи высокочастотных дефлекторов таким образом, чтобы траектории частиц лишь касались кристалла. Время вывода составит 1/15 с, причем его многооборотная эффективность достигнет 95-98% [1].

Принципиальной особенностью эксперимента является рекордная интенсивность выводимого пучка – свыше 10¹² протонов/с, инжектируемых в Главный инжектор (Main Injector) с последующим ускорением и использованием в нейтринных экспериментах. При этом, возникает проблема радиационной стойкости кристалла и необходимость максимального снижения количества неупругих ядерных реакций частиц в нем.

Решением этой проблемы может стать применение разрыва кристаллической структуры (кристалл с вырезом) [2]. Идея заключается в потере поперечной энергии в вырезе протонами, которые продолжат движение вне области тепловых колебаний атомов в кристалле. Это не только увеличит эффективность каналирования, но и снизит вероятность неупругих ядерных реакций, делая кристалл более прозрачным для протонов. Принципиальным условием применения метода является малая угловая расходимость падающего пучка, достигнутая в накопительном кольце [3].

Исследование динамики пучка в накопительном кольце проводилось при помощи программы STRUCT, разработанной в ФНАЛ [4]. Для моделирования взаимодействия протонов с кристаллом нами был разработан алгоритм, позволяющий рассчитать реальную траекторию частиц в усредненном межплоскостном потенциале с учетом рассеяния на ядрах и электронах на каждом шаге. Начальные координаты и углы частиц в ускорителе разыгрывались по методу Монте-Карло, что позволило нам распараллелить программу для расчета на многопроцессорных ЭВМ и использовать белорусский суперкомпьютер СКИФ К-1000-2.

Результаты моделирования приведены на Рис. 1. На Рис. 1а-б в разных масштабах представлена зависимость доли потерь выведенного пучка от ориентации кристалла. Как видно из Рис. 1б, применение идеи выреза уменьшает потери частиц в 2 раза,

поскольку существенно большее количество частиц выводится из ускорителя за одно прохождение кристалла, что значительно понижает радиационную нагрузку, и увеличивает эффективность выведения до 98%. Сопоставление фазовых портретов выведенного пучка, приведенных на Рис. 1в и 1г показывает, что вырез уменьшает не только угловой разброс каналированных частиц, но и долю неканалированных частиц, отклоненных благодаря объемному отражению (ОО) и некогерентному рассеянию.



Рис. 1. а-б: зависимость доли потерь выведенного пучка от ориентации кристалла; в-г: фазовые портреты отклоненного пучка на входе в септум-магнит.

Таким образом, проведенное моделирование эксперимента по выведению протонного пучка энергией 8 ГэВ изогнутым кристаллом в режиме каналирования показало, что кристалл с разрывом кристаллической структуры позволит уменьшить потери частиц в 2 раза, значительно снизить радиационные потери в кристалле, сузить фазовое пространство выведенного пучка, и увеличить эффективность вывода до 98%.

- [1] Shiltsev V. Novel slow extraction scheme for proton accelerators using pulsed dipole correctors and crystals / V. Shiltsev // FNAL, No. DE-AC02-07CH11359. 2012. 3 p.
- [2] Tikhomirov V.V. A technique to improve crystal channeling efficiency of charged particles / V.V. Tikhomirov // JINST. – 2007. – Vol. 2. – P08006.
- [3] Tikhomirov V. New ideas for crystal collimation / V. Tikhomirov, A. Sytov // Proc. of the 23th Intern. Conf. "Russian Particle Accelerator Conference" RuPAC 2012. September 24–28, 2012, Peterhof, St. Petersburg, Russia. P. 79-81. Date of access: 12.11.2012. Mode of access: <u>http://accelconf.web.cern.ch/AccelConf/rupac2012/papers/tucch01.pdf</u>
- [4] Baishev I.S. The STRUCT program user's reference manual / I.S. Baishev et al. // Mode of access: <u>http://www-ap.fnal.gov/users/drozhdin/</u>. Date of access: 31.08.2012. 43 p.

УДК 537.852:621.3.027.89

В. В. Гавриловец, В. В. Тихомиров

МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТОКУМУЛЯТИВНОГО ГЕНЕРАТОРА С ПРЕДЕЛЬНЫМИ ПАРАМЕТРАМИ

"Институт ядерных проблем" БГУ, г. Минск, ул.Бобруйская 11, 220030 Минск, Беларусь <u>bycel@tut.by, vvtikh@mail.ru</u>

Спиральные магнитокумулятивные генераторы (МКГ) используются в качестве источников мощных импульсов напряжения, тока и магнитного поля. С их помощью можно изучать экстремальные состояния вещества путем его сжатия магнитным полем, проводить эксперименты по инерциальному термоядерному синтезу. Возможно также использование МКГ в качестве сверхмощных импульсных источников питания в различных научных установках. Моделирование работы генератора при максимально допустимых условиях, таких как нагрев проводников и напряженность внутреннего электрического поля, позволяет определить предельные величины параметров, при которых работа генератора остается стабильной, что позволяет достичь максимальной мощности без увеличения габаритов.

Конструкция МКГ представлена на рисунке. Основными её частями являются соленоид, называемый индуктором, и металлическая труба – лайнер. Индуктор, намотанный одним проводом, называется однозаходным; несколькими параллельными проводами – многозаходным, при этом число заходов соответствует числу параллельно намотанных проводов. Лайнер, обычно изготовленный из меди или алюминия, вставляется внутрь индуктора и заполняется взрывчатым веществом. Вместе с индуктором он образует электрическую цепь, замыкаемую нагрузкой (см. рисунок). В генераторе создается начальный ток и с торца лайнера производится подрыв взрывчатого вещества. Под действием продуктов взрыва лайнер начинает конусообразно расширяться, достигает индуктора и последовательно замыкает его витки, увеличивая при этом энергию магнитного поля.

Для изучения работы МКГ использовалась двумерная модель, подробно описанная в [1]. В ней индуктор разбивается на витки, а лайнер – на кольца, которые представляются в виде эквивалентных контуров с током. Каждый эквивалентный контур имеет собственную индуктивность $L_i=M_{ii}$ и сопротивление R_i . Система уравнений эквивалентных контуров имеет вид

$$\sum_{j} M_{ij} \frac{dI_{j}}{dt} + \sum_{j} \frac{dM_{ij}}{dt} I_{j} + R_{i}I_{i} = U_{i} ,$$

где U_i – напряжение на контуре, обусловленное нахождением в электрической цепи, I_j – ток, M_{ij} – взаимная индуктивность между эквивалентными контурами *i* и *j*; *i*,*j*=1...*n*, где n – полное количество эквивалентных контуров тока.

<u>17</u>



Рис. Разбиение магнитокумулятивного генератора в двумерной модели

Существует два основных механизма потерь энергии в генераторе: внутренние потери магнитного потока и омические. Первые обусловлены тем, что за точкой контакта индуктора и лайнера остаются токи I_{zi}^{θ} (см. рисунок), а, следовательно, и связанный с ними магнитный поток [1]. Для однозаходных индукторов внутренние потери потока могут превосходить сопротивление в несколько раз, но при увеличении шага намотки индуктора они уменьшаются. Данные выводы справедливы при плотной намотке индуктора.

Отдельной задачей является расчет эффективного сопротивления генератора. В двумерной модели основной вклад в последнее дает индуктор, а сопротивлением лайнера, как правило, можно пренебречь. Вычислять сопротивление при существенном нагреве следует с использованием модели нелинейной магнитной диффузии [2]. Расчеты показывают, что данная модель справедлива при нагреве поверхности провода индуктора до температуры плавления, в то время как при дальнейшем повышении температуры генератор работает нестабильно.

По результатам моделирования для типичных параметров генератора найден предел объемной плотности тока, равный 60 кА/мм², при котором становится существенным аномальный скин-эффект, проявляющийся в перераспределении плотности тока с нагретого приповерхностного слоя вглубь проводника. При этом возникает так называемая «токовая волна», когда область с максимальной плотностью тока постепенно распространяется вглубь проводника, увеличивая внутренние потери магнитного потока и, соответственно, приводя к ограничению производной тока генератора и эффективности его работы в целом.

- [1] Haurylavets V. V., Tikhomirov V. V. Two-dimensional model of intrinsic magnetic flux losses in helical flux compression generators // E-print arXiv:1209.5633v1 [physics.plasm-ph]. 2012. 29 p. Mode of access: http://lanl.arxiv.org/abs/1209.5633 Date of access: 20.11.2012.
- [2] Гавриловец, В. В. Математическое моделирование физических процессов в спиральном магнитокумулятивном генераторе / В.В. Гавриловец, В.В. Тихомиров // Математическое моделирование. – 2012. – Т.24. – №12. С. 8 – 12.

УДК 539.12

В. В. Андреев, Н. В. Максименко, О. М. Дерюжкова

КОВАРИАНТНЫЕ УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ ЧАСТИЦ СПИНА ½ С УЧЕТОМ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЕЙ

УО «Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины», ул. Советская, 102, 246019 Гомель, Беларусь vik.andreev@gsu.by, maksimenko@gsu.by, dom@gsu.by

В настоящее время известны многие электродинамические процессы, на основе которых можно получить экспериментальные данные о поляризуемостях адронов. В связи с этим возникает задача о последовательном ковариантном определении вкладов поляризуемостей в амплитуды и сечения электродинамических процессов на адронах [1]. Для определения ковариантных уравнений взаимодействия электромагнитного поля с нуклоном с учетом вкладов аномального магнитного момента и поляризуемостей воспользуемся эффективным лагранжианом вида [2]:

$$L = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \frac{i}{2}\bar{\Psi}\dot{\bar{\partial}}\Psi - m\bar{\Psi}\Psi - e\bar{\Psi}\dot{A}\Psi - \frac{e\kappa}{4m}\bar{\Psi}\sigma^{\mu\nu}\Psi F_{\mu\nu} + K_{\sigma\nu}\theta^{\sigma\nu}, \qquad (1)$$

где
$$K_{\sigma\nu} = \frac{2\pi}{m} \left[\alpha F_{\sigma\mu} F^{\mu}{}_{\nu} + \beta \widetilde{F}_{\sigma\mu} \widetilde{F}^{\mu}{}_{\nu} \right], \quad \theta^{\sigma\nu} = \frac{i}{2} \overline{\Psi} \gamma^{\sigma} \overline{\partial}^{\nu} \Psi, \qquad \overline{\partial}^{\nu} = \overline{\partial}^{\nu} - \overline{\partial}^{\nu}$$

Уравнения, полученные из лагранжиана (1), определяются следующим образом:

$$\partial_{\mu}F^{\mu\nu} = e\overline{\Psi}\gamma^{\nu}\Psi - \partial_{\mu}\left[\frac{e\kappa}{2m}\overline{\Psi}\sigma^{\mu\nu}\Psi + G^{\mu\nu}\right],$$

$$\left(i\hat{\vec{\partial}} - m\right)\Psi = e\hat{A}\Psi - \frac{i}{2}\left[\partial^{\nu}\left(K_{\sigma\nu}\gamma^{\sigma}\Psi\right) + K_{\sigma\nu}\gamma^{\sigma}\partial^{\nu}\Psi\right] + \frac{e\kappa}{4m}\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}\Psi, \qquad (2)$$

$$\overline{\Psi}\left(i\hat{\vec{\partial}} + m\right) = -\overline{\Psi}e\hat{A} - \frac{i}{2}\left[\partial^{\nu}\left(\overline{\Psi}\gamma^{\sigma}K_{\sigma\nu}\right) + \left(\partial^{\nu}\overline{\Psi}\right)\gamma^{\sigma}K_{\sigma\nu}\right] - \overline{\Psi}\frac{e\kappa}{4m}\sigma^{\mu\nu}F_{\mu\nu}.$$

Антисимметричный тензор $G^{\mu\nu}$ в (2) имеет вид:

$$G^{\mu\nu} = -\frac{\partial L^{(\alpha,\beta)}}{\partial (\partial_{\mu}A_{\nu})} = \frac{4\pi}{m} \Big[(\alpha + \beta) \Big(F^{\mu}{}_{\rho} \tilde{\theta}^{\rho\nu} - F^{\nu}{}_{\rho} \tilde{\theta}^{\rho\mu} \Big) - \beta \theta^{\rho}{}_{\rho} F^{\mu\nu} \Big], \text{ где } \tilde{\theta}^{\rho\nu} = \frac{1}{2} \Big(\theta^{\rho\nu} + \theta^{\nu\rho} \Big).$$

Если воспользуемся методом функции Грина [3], то получим вклад электрической и магнитной поляризуемостей в *S*-матричный элемент комптоновского рассеяния:

$$S_{fi} = \frac{2\pi i}{m} \int \left[(\alpha + \beta) \left(F_{\sigma\mu}^{(2)} F_{(1)}^{\mu\nu} + F_{\sigma\mu}^{(1)} F_{(2)}^{\mu\nu} \right) \theta^{\sigma}_{(21)\nu} + \beta \left(F_{\mu\nu}^{(2)} F_{(1)}^{\mu\nu} \right) \theta^{\rho}_{(21)\rho} \right] d^{4}x'.$$

Учитывая волновые функции нуклона и фотонов в начальном и конечном состояниях, то выражение для амплитуды *М* примет вид:

$$M = \frac{2\pi}{m} \overline{U}^{(r_{2})}(\vec{p}_{2}) \left\{ \left| \hat{k}_{2} e_{\mu}^{(\lambda_{2})} - k_{2\mu} e^{\hat{\lambda}^{(\lambda_{2})}} \right| \left[k_{1}^{\mu} \left(e^{(\lambda_{1})} P \right) - \left(k_{1} P \right) e^{(\lambda_{1})\mu} \right] + \left[k_{2}^{\mu} \left(e^{(\lambda_{2})} P \right) - \left(k_{2} P \right) e^{(\lambda_{2})\mu} \right] \times \left[\hat{k}_{1} e_{\mu}^{(\lambda_{1})} - k_{1\mu} e^{\hat{\lambda}^{(\lambda_{1})}} \right] \right\} (\alpha + \beta) + m\beta \left[k_{2\mu} e_{\nu}^{(\lambda_{2})} - k_{2\nu} e_{\mu}^{(\lambda_{2})} \right] \left[k_{1}^{\mu} e^{(\lambda_{1})\nu} - k_{1}^{\nu} e^{(\lambda_{1})\mu} \right] U^{(r_{1})}(\vec{p}_{1}).$$

$$(3)$$

В этом выражении $e_{\mu}^{(\lambda_1)}$ и $e_{\mu}^{(\lambda_2)}$ – векторы поляризации начального и конечного фотонов, $P = \frac{1}{2}(p_1 + p_2)$, k_1, p_1 и k_2, p_2 – импульсы начальных и конечных фотонов и нуклонов, $U^{(r_1)}(\vec{p}_1)$ и $\overline{U}^{(r_2)}(\vec{p}_2)$ – биспиноры начальных и конечных нуклонов. Если амплитуду (3) определим в системе покоя мишени и ограничимся членами не выше второго порядка по частоте излучения, то получим:

$$M = 4\pi\omega^2 \chi^{(r_2)+} \left[\alpha \left(\vec{e}^{(\lambda_2)} \vec{e}^{(\lambda_1)} \right) + \beta \left(\left[\vec{n}_2 \vec{e}^{(\lambda_2)} \right] \cdot \left[\vec{n}_1 \vec{e}^{(\lambda_1)} \right] \right) \right] \chi^{(r_1)},$$

где ω – частота излучения, \vec{n}_1 и \vec{n}_2 – единичные векторы, направленные по \vec{k}_1 и \vec{k}_2 , $\chi^{(r_2)+}$ и $\chi^{(r_1)}$ – спиноры начального и конечного нуклонов.

Поляризуемости элементарных частиц определяются вкладами не только сильных взаимодействий, но и вкладами, которые «индуцируются» высшими порядками теории возмущений КЭД. Эти поляризуемости принято называть квазистатическими поляризуемостями. Используя метод вычисления работы [4], определены и сделаны оценки квазиполяризуемостей для "дираковского" протона:

$$\alpha_E^{q-s} + \beta_M^{q-s} \approx -5.8 \times 10^{-7} \, \Phi \mathrm{M}^3 \,. \tag{4}$$

Сравнивая полученный результат с экспериментальными значениями [5]:

$$\alpha_E^{(p)} + \beta_E^{(p)} = (13,8\pm0,4) \times 10^{-4} \Phi M^3,$$
(5)

можно заметить, что вклад данных поправок мал и не превышает даже экспериментальных ошибок. Численные оценки (4) и (5) согласуются с оценками работы [6].

- [1] Carlson, C.E. Constraining off-shell effects using low-energy Compton scattering / C. E. Carlson, M. Vanderhaeghen // [Electronic resource]. 2011. Mode of access: http://physics.atom-ph/1109.3779. Date of access: 04.10.2011.
- [2] Максименко, Н.В. Феноменологическое описание поляризуемостей элементарных частиц в полевой теории / Н. В. Максименко, Л. Г. Мороз // Труды XI Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий и релятивистский ядерной физике. Д2-11707, ОИЯИ, Дубна. – 1979. – С. 533-543.
- [3] Богуш, А.А. Введение в теорию классических полей / А. А. Богуш, Л. Г. Мороз. Минск: Наука и техника, 1968. – 387 с.
- [4] Андреев, В. В. Инвариантные амплитуды комптоновского рассеяния в КЭД / В. В. Андреев, А. М. Сейтлиев // Весці НАН Беларуси. Сер.фіз.-мат. навук. – 2011. – № 3. – С. 60-65.
- [5] Review of Particle Physics / K. Nakamura [et al.] // Journal of Physics G. 2010. Vol. 37. – P. 075021.
- [6] Gerasimov, S. B. Scattering of light of low frequency and charged particle polarizability / S. B. Gerasimov, L. D. Soloviev // Nucl. Phys. – 1965. – Vol. C74. – P. 589-592.

УДК 621.396.96

И. А. Иващенко

ФИЗИЧЕСКИЕ МЕХАНИЗМЫ И МОДЕЛИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НИЗКОЛЕТЯЩЕГО ЛЕТАТЕЛЬНОГО АППАРАТА С ПОВЕРХНОСТЬЮ ЗЕМЛИ

Военная академия Республики Беларусь, пр. Независимости, 220, 220057 Минск, Беларусь inga291065@inbox.ru

Движущийся в атмосфере Земли летательный аппарат (ЛА) является объектом, обладающим электромагнитными свойствами. У низколетящих летательных аппаратов (НЛА) в силу их взаимодействия с поверхностью Земли (ПЗ) проявление этих свойств существенно усиливается и состоит в возникновении электромагнитных полей в окружающем ЛА пространстве. При этом НЛА может являться источником электромагнитного излучения, распространяющегося в окружающей среде.

В докладе рассмотрены возможные механизмы излучения электромагнитных волн (ЭМВ) системой «НЛА – ПЗ», физико-математические модели электромагнитного взаимодействия НЛА с ПЗ, а также возможности использования переизлучения системой «НЛА – ПЗ» падающих не нее ЭМВ для локации НЛА за горизонтом Земли.

Наличие на поверхности НЛА электрического заряда, как избыточного, так и свободного и связанного; движение ЛА аппарата в атмосфере; электромагнитное взаимодействие НЛА с подстилающей поверхностью – ПЗ, ее электрическим и магнитным полями, с неровностями ПЗ и объектами, расположенными на ней; наличие электромагнитного фона в окружающем пространстве, имеющего как естественное, так и искусственное происхождение, – основные факторы, которые могут приводить к излучению или переизлучению ЭМВ низколетящим ЛА, а точнее системой «НЛА – ПЗ». Естественно, указанные выше факторы действуют одновременно, и каждый из них вносит свой вклад в результирующее электромагнитное излучение НЛА.

Причиной возникновения электромагнитного излучения системы «НЛА – ПЗ» являются различные физические процессы и явления: непосредственно движение вместе с ЛА зарядов, расположенных его поверхности; перемещение заряда по корпусу ЛА, как в горизонтальном, так и в вертикальном направлении из-за наличия неровностей ПЗ; наведение ЭДС индукции внешним переменным электромагнитным полем; искажения электрического и магнитного полей Земли, возникающие при пересечении НЛА линий напряженности этих полей; поляризация диэлектрика, который может быть составной частью конструкции НЛА.

Особенности физических процессов, участвующих в формировании электромагнитного излучения системы «НЛА – ПЗ», дают основу для построения частных моделей, учитывающих существенные свойства рассматриваемых процессов и описывающих излучение или переизлучение ЭМВ системой «НЛА – ПЗ».

Электромагнитное взаимодействие НЛА с поверхностью Земли описывается с помощью эквивалентного колебательного контура (ЭКК) [1]. Модель ЭКК дополняется моделью эквивалентной двухпроводной линии (ЭДЛ) [2, 3]. Обобщенной моделью

является модель эквивалентного дипольного магнитного излучателя [4], учитывающая особенности и характеристики моделей ЭКК и ЭДЛ. В дополнение к разработанным моделям возможные механизмы возникновения электромагнитного излучения системы «НЛА – ПЗ» могут быть описаны посредством вертикального электрического дипольного излучателя, горизонтального одиночного дипольного излучателя при отсутствии избыточного заряда на поверхности НЛА, например, в процессе взлета или при малом времени полета, или двух горизонтальных диполей при наличии на НЛА нескомпенсированного заряда, образованного за счет взаимодействия корпуса ЛА с атмосферой, газовой струей двигателя.

Результаты теоретических исследований с использованием разработанных моделей показали, что предполагаемый диапазон частот ЭМВ, излучаемых системой «НЛА – ПЗ», лежит в области единиц мегагерц и ниже. Волны указанных диапазонов способны распространяться за горизонт Земли за счет отражения от ионосферы и явления дифракции. Это создает предпосылки для использования указанного излучения для локации НЛА на дальних расстояниях за пределами зоны прямой видимости. Конечно, практическое решение указанной задачи потребует новых технических решений. Хотя возможно рассматривать и вероятность использования существующих радиолокационных средств.

Два первоочередных взаимосвязанных вопроса, возникающих при изучении возможности использования излучения системы «НЛА – ПЗ» для локации НЛА, в том числе за горизонтом Земли, – каковы диапазон частот и мощность переизлучаемых рассматриваемой системой ЭМВ, что определяет практическую возможность локации и ее дальность с учетом современного уровня техники и технологий.

В силу одновременного действия механизмов переизлучения ЭМВ системой «НЛА – ПЗ» и особенностей формирования излучаемого сигнала его структура будет сложной, спектр излучения сравнительно широким, временная структура будет иметь случайный характер. Вероятнее всего сигнал окажется шумоподобным и выделение такого сигнала на фоне помех – отдельная задача, требующая своего решения.

- [1] Электродинамическая модель маловысотного летательного аппарата / В. В. Воинов [и др.] // Сб. науч. ст. Воен. акад. Респ. Беларусь. 2008. № 15. С. 62–66.
- [2] Воинов, В. В. Электромагнитное взаимодействие маловысотного летательного аппарата с поверхностью Земли / В. В. Воинов, И. А. Иващенко // III Конгресс физиков Беларуси: сб. тез. докл. и прогр. / НАНБ. Минск, 2011. С. 45.
- [3] Моделирование электродинамических процессов, возникающих при движении маловысотного летательного аппарата с использованием электрических параметров двухпроводной линии / В.В. Воинов [и др.] // Вестник Воен. акад. Респ. Беларусь. – 2012. – № 2 (35). – С. 22–32.
- [4] Воинов, В. В. Модель магнитного дипольного переизлучения электромагнитных волн маловысотным летательным аппаратом / В. В. Воинов, И. А. Иващенко, В. В. Мокринский, Е. Н. Сасим // Сб. науч. статей ВАРБ. 2012. № 22. С. 62–69.

УДК 530.1; 539.12

В.В.Андреев

ОБЛАСТЬ КОНСТАНТЫ КХД НИЖЕ 1 ГЭВ В ПУАНКАРЕ-КОВАРИАНТНОЙ МОДЕЛИ

¹Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины, ул. Советская, 104, 246019 Гомель, Беларусь vik.andreev@gsu.by

Бегущая константа сильного взаимодействия $\alpha_s(Q^2)$ является одной из центральных характеристик как квантовой хромодинамики. Эта константа в качестве параметра входит в модели адронов, основанных на КХД. Одним из важных вопросов при описании $\alpha_s(Q^2)$ является ее поведение в непертурбативной области (Q < 1 ГэВ). В рамках КХД, поведение $\alpha_s(Q^2)$ получают из решения ренорм-групповых уравнений. Наличие полюса Ландау приводит к резкому росту α_{0CD} при малых Q^2 .

Однако, существуют многочисленные подходы [1-9] (и др.) в которых поведение константы взаимодействия в непертурбативной области существенно отличается от общепринятого поведения.

При этом с точки зрения поведения константы КХД подходы можно разделить на три вида: 1) режим ``заморозки'': монотонно возрастающая функция без резкого роста, с конечным значением $\alpha_{crit.} = \alpha_s (Q^2 = 0)$; 2) режим с максимумом в непертурбативной области, причем $\alpha_s (Q^2) \rightarrow 0$, когда $Q^2 \rightarrow 0$; 3) константы у которых рост $\alpha_s (Q^2)$ более медленный, чем у константы, вычисленной в рамках пертурбативной КХД. Последнее поведение можно условно отнести к первому режиму поведения, только с очень больший $\alpha_{crit.} > 4-10$.

В данной работе на основе параметризации константы КХД,

$$\alpha_{s}(Q^{2}) = \sum_{k=1}^{n=7} \alpha_{k} \exp\left[-Q^{2} / \left(4\gamma_{k}^{2}\right)\right]$$
(1)

исследован вопрос о поведении $\alpha_s(Q^2)$ в непертурбативной области. Для этого было смоделировано 14 режимов, совпадающих в области больших $Q^2 > 1-2$ ГэВ, но отличающихся в инфракрасной области. Первые семь режимов относятся к режиму ``заморозки", а вторые режиму с максимумом. Для получения ответа на вопрос какой из режимов является наиболее предпочтительным, использовались экспериментальные данные по правилам сумм нуклонов и характеристики псевдоскалярных и векторных мезонов.

Методика нахождения ``оптимального" режима основана на использовании пуанкаре-ковариантной модели мезонов, как связанных состояний. Основным требованием ограничивающим возможное поведение $\alpha_s(Q^2)$ в данной методике, является условие соответствия модельных расчетов экспериментальным значением лептонных констант распадов и масс псевдоскалярных и векторных мезонов.

Далее режимы поведения, которые имели $\chi^2/d.o.f < 1$ были использованы в расчетах первого момента функции $g_1^{p,n}(x,Q^2)$:

$$\Gamma_1^{p,n}(Q^2) = \int_0^1 g_1^{p,n}(x,Q^2) dx, \qquad (2)$$

для которого в рамках пертурбативной КХД получены соотношения

$$\Gamma_{1}^{p,n}(Q^{2}) = \left\{ \frac{1}{12} \left(\pm g_{A} + \frac{a_{8}}{3} \right) C_{NS}(Q^{2}) + \frac{a_{0}^{inv}}{9} C_{SI}^{inv}(Q^{2}) \right\} + \Delta_{HT}^{p,n}(Q^{2}), \quad (3)$$

где $g_A = 1.2701 \pm 0.0025$, $a_8 = 0.585 \pm 0.025$ и $a_0^{inv} - Q^2$ -независимый ренормгрупповой инвариант. Коэффициенты C_{NS} и C_S^{inv} получены до третьего и четвертого порядка α_s (see [3, 6-8])

Итогом вычислений стало что наиболее предпочтительным режимом поведения является режим ``заморозки" для которого $\alpha_{\rm crit} = 0.60 \div 0.75$.

- Richardson, J.L. The Heavy quark potential and the Y, *I/ψ* systems/ J.L. Richardson~// Physics Letters. -1979. -Vol. 82B, №2. -P.272--274.
- [2] Godfrey, S. Mesons in a relativized quark model with chromodynamics/ S.Godfrey, N. Isgur// Phys. Rev. -1985. -Vol. D32. -P.189--231.
- [3] Dokshitzer, Y.L. Specific features of heavy quark production. LPHD approach to heavy particle spectra/ Y.L. Dokshitzer, V.A. Khoze, S. I. Troian// Phys. Rev. -1996. -Vol. D53.-P.89-119.
- [4] Badalian, A.M. Freezing of QCD coupling alpha(s) affects the short distance static
- potential/ A.M. Badalian, D.S. Kuzmenko// Phys. Rev. -2002.-Vol. D65. -P.016004.
- [5] Alekseev, A.I. Analyticity and minimality of nonperturbative contributions in perturbative region for alpha(s)-bar/ A.I. Alekseev, B.A. Arbuzov// Mod. Phys. Lett. -1998. -Vol. A13. -P.1747-1756.
- [6] Webber, B.R. QCD power corrections from a simple model for the running coupling/ B.R. Webber// JHEP. -1998. -Vol.10. -P.012.
- [7] Shirkov, D.V. Analytic model for the QCD running coupling with universal alpha(s)-bar(0) value/ D.V. Shirkov, I.L. Solovtsov//Phys. Rev. Lett. -1997. -Vol.79. -P.1209--1212.
- [8] Nesterenko, A.V. Analytic invariant charge in QCD/ A.V. Nesterenko// Int. J. Mod. Phys. -2003. -Vol. A18. -P.5475-5520.
- [9] Бакулев, А. Глобальная дробно-аналитическая теория возмущений в КХД и ее некоторые приложения/ А. Бакулев// ЭЧАЯ. -2009. -Vol.40, № 5.-Р.1351-1431.
- [10] Larin, S. The Next-to-leading QCD approximation to the Ellis-Jaffe sum rule/S.Larin//Phys.Lett.-1994. -Vol. B334. -P.192-198.
- [11] Kataev, A. The Ellis-Jaffe sum rule: The Estimates of the next to next-to-leading order QCD corrections/ A. Kataev// Phys.Rev.-1994. -Vol. D50. -P.5469-5472.
- [12] Larin, S. The Alpha-s**3 approximation of quantum chromodynamics to the Ellis-Jaffe sum rule/ S. Larin, T.van Ritbergen, J.Vermaseren//Phys.Lett.-1997.-Vol. B404.- P.153-160.
- [13] Baikov, P. Adler Function, Bjorken Sum Rule, and the Crewther Relation to alphas⁴ in a General Gauge Theory/ P. Baikov, K. Chetyrkin, J. Kuhn// Phys.Rev.Lett.-2010.-Vol. 104. -P.132004.

УДК 539.1.078

Г.Ю. Дробышев, М.В. Коржик, А.С. Лобко

ОСОБЕННОСТИ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЯ И ЛЕПТОНОВ В ЭКСПЕРИМЕНТАХ ПО ТЕСТИРОВАНИЮ СТАНДАРТНОЙ МОДЕЛИ

Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220030 Минск, Беларусь <u>lobko@inp.bsu.by</u>

Самоактивированные кристаллические сцинтилляторы большой плотности показали высокие параметры детектирования при использовании в электромагнитных калориметрах в экспериментальных установках физики высоких энергий. В частности, германат висмута $Bi_4Ge_3O_{12}$ (BGO) был успешно использован в эксперименте L3 на ускорителе LEP в CERN. Там же, на Большом адроном коллайдере LHC, вольфрамат свинца PbWO₄ (PWO) был использован в электромагнитном калориметре (ECAL) эксперимента CMS и Фотонном детекторе эксперимента ALICE [1].

Явления радиационного поражения кристаллов ВGO и РWO при воздействии гамма-излучения детально изучались при выполнении комплекса НИР возглавляемых CERN [2]. Благодаря построенной на результатах этих НИР оптимизации технологии производства кристаллов, чувствительности кристаллов BGO, а затем и PWO, к гаммадо индуцированному радиационному поражению были снижены уровня, обеспечивающего требования экспериментов по энергетическому разрешению. Калориметры на основе как BGO, так и РWO сыграли весьма заметную роль при открытии новых бозонов.

В августе 2012 года в публикации [3] коллаборации CMS в CERN об обнаружении на коллайдере LHC новой частицы – бозона массой 125 ГэВ было указано, что наиболее значительным превышением сигнала над фоном характеризуется процесс с лучшим разрешением по массе: распад бозона на два гамма-фотона. Указанный распад детектировался преимущественно гомогенным электромагнитным калориметром ECAL, созданным на основе сцинтилляционных кристаллов PWO. Кристалл PWO был предложен и доведен до массового производства международной группой исследователей, в составе которой основную роль сыграли сотрудники Института ядерных проблем БГУ. Таким образом, выбор эксперимента CMS в пользу гомогенного калориметра, основанного на кристаллах PWO, позволил добавить еще один важный «кирпичик» в конструкцию Стандартной модели.

Тестирование Стандартной модели и поиск новой физики возможны не только при сверхвысоких энергиях частиц. В рамках теории электрослабого взаимодействия известно несколько канонических примеров чисто лептонных электрослабых процессов с участием мюонов, электронов и соответствующих нейтрино. К ним относятся 1) распад мюона $\mu \rightarrow ev_{\mu}v_{e}$, 2) инверсия мюонного распада $v_{\mu}e \rightarrow \mu v_{e}$, и 3) аннигиляция мюона и электрона с образованием двух нейтрино $\mu e \rightarrow v_{\mu}v_{e}$.

Первый из перечисленных процессов впервые наблюдался в 1948 году и его исследование сыграло фундаментальную роль в создании современной теории электрослабого взаимодействия.

Второй процесс был экспериментально обнаружен в 1980-е гг. научными коллаборациями CHARMII, CCFR и NuTeV и его изучение также оказало существенное влияние на развитие теории электрослабого взаимодействия.

Аннигиляция мюона с электроном с образованием двух нейтрино (т.е. с «невидимым» конечным состоянием) никогда ранее не изучалась экспериментально вследствие очевидной технической сложности организации подобного эксперимента. В тоже время, экспериментальное исследование данного процесса может оказаться весьма существенным для развития ряда направлений научных исследований. Связанное атомное состояние мюона и электрона – мюоний [4] был экспериментально обнаружен достаточно давно, в 1960 году, однако до сих пор он рассматривается как идеальный тест-объект для изучения электрослабого взаимодействия. По современным представлениям, в системе мюония присутствуют только электромагнитные и слабые силы. Мюоний связывается электромагнитным взаимодействием, однако, может самоаннигилировать вследствие слабого взаимодействия. Изучение данного процесса позволит провести зондирование мюония на предмет обнаружения явлений, выходящих за пределы Стандартной модели частиц и взаимодействий.

В конце 2012 г. международная группа ученых из ОИЯИ (Дубна, Россия), Лионского института ядерной физики (Франция), Института ядерных исследований (Москва, Россия), Института физики частиц (Цюрих, Швейцария) сформировали научную коллаборацию MUTON («мюоний в нейтрино»), которая предложила провести в Институте имени Пауля Шерера (Швейцария) экспериментальные исследования по обнаружению аннигиляции мюона с электроном [5]. В настоящее время начаты подготовительные работы, в частности, завершена эскизная проработка схемы эксперимента и определены необходимые компоненты экспериментальной установки. В том числе, одним из критических элементов является пучковый детектор, с помощью которого будет возможно вести мониторирование и измерение времени пролета мюонного и электронного пучков относительно низких энергий (E_u~ 4 МэВ, E_e~5-50 МэВ). Он должен позволять проводить детектирование каждой частицы, при этом чувствительные элементы должны обеспечивать минимальное рассеяние пучка с целью минимизации его уширения. Предварительные моделирования показали, что толщина детектора должна быть менее 100 мкм при площади чувствительной поверхности несколько см². Такие механические параметры очень трудно обеспечить. Группа сотрудников НИИ ЯП БГУ в настоящее время разрабатывает предложения для разрешения этой, одной из ключевых, проблем важного эксперимента.

[1] The CERN Large Hadron Collider: Accelerator and Experiments, vol. 1-2, CERN, Geneva, 2009.

[2] Lecoq, P., Annenkov, A., Gektin, A., Korzhik, M., Pedrini, Inorganic Scintillators for Detector Systems // Springer. 2006. 251 P.

[3] The CMS Collaboration, Physics Letters B 716 (2012) 30

[4] K. Jungmann Past, present and future of muonium <u>http://arxiv.org/pdf/nucl-ex/0404013v1.pdf</u> (Extracted 30 March 2013)

[5] V. Duginov, K. Gritsaj, A. Korenchenko, N. Kravchuk, P. Nedelec, A. Belov, S. Gninenko, A. Ivashkin, A. Korneev, V. Matveev, P. Crivelli, A. Rubbia. Letter of Intent for an Experiment to Search for the Muonium Decay $\mu^+ e^- \rightarrow \overline{\nu}_{\mu} \nu_e$. December 17, 2012. 26 p.

УДК 539.12

С. М. Кучин¹, Н. В. Максименко²

ЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ ЗАРЯЖЕННЫХ ПИОНОВ В КВАРКОВОЙ МОДЕЛИ С ПОТЕНЦИАЛОМ, ПРЕДСТАВЛЯЮЩИМ СОБОЙ СУММУ КУЛОНОВСКОГО И ОСЦИЛЛЯТОРНОГО ПОТЕНЦИАЛОВ

¹ Филиал Брянского государственного университета им. академика И.Г. Петровского, ул. Советская, 9, 243020 Новозыбков, Россия

² Гомельский государственный университет имени Ф. Скорины, ул. Советская, 102, 246019 Гомель, Беларусь maksimenko@gsu.unibel.by

Данная работа посвящена вычислению электрической поляризуемости заряженных пионов в рамках нерелятивистской кварковой модели. Потенциал взаимодействия между кварком и антикварком выбирался в виде суммы кулоновского и осцилляторного потенциала.

Для решения уравнения Шредингера использовался метод Никифорова – Уварова [1] и приближение Пекериса, которое применялось в работе [2] для описания спектра масс кваркониев.

Параметры потенциала и массы кварков фиксировались по экспериментальным значениям масс основного и первого радиально возбужденного состояний заряженного пиона, среднеквадратичному радиусу и лептонной константе распада [3,4].

Оценка электрической поляризуемости проводилась с использованием методики, разработанной в [5] на основе квантово-механической теории возмущений и вариационного метода.

Получено следующее значение статической электрической поляризуемости зараженных пионов:

 $\alpha_0^{\pi^{\pm}} = (0,18 \pm 0,15) \cdot 10^{-4} \, \phi M^3.$

Экспериментально измеряемая комптоновская поляризуемость заряженных пионов в наших расчетах имеет следующее значение:

 $\alpha^{n} = (5,99 \pm 0,15) \cdot 10^{-4} \phi M^{3}.$

Полученный результат хорошо согласуется с экспериментальными данными [6,7].

Из расчетов следует, что статическая поляризуемость заряженных пионов несет только малую часть полной обобщенной поляризуемости и составляет приблизительно 3 % последней. Данная оценка косвенно говорит о том, что заряженные пионы обладают слабой способностью деформироваться во внешнем электрическом поле.

[1] A. F. Nikiforov and V. B. Uvarov. Special Functions of Mathematical Physics. Birkhauser, Basel (1988).

[2] Ahmed Al-Jamel. Heavy Quarkonium Mass Spectra in A Coulomb Field Plus Quadratic Potential Using Nikiforov-Uvarov Method / Ahmed Al-Jamel1 & Hatem Widyan // Applied Physics Research. – 2012. – Vol. 4, No. 3. – p. 94.

- [3] J. Beringer. Review of Particle Physics. / J. Beringer [et al.] // Phys. Rev. 2012. D 86,
 p. 010001.
- [4] I. Eschrich. Measurement of the Sigma charge radius by Sigma–electron elastic scattering / I. Eschrich [et al.] // Phys. Lett. – 2001. – Vol. B522. – P. 233.
- [5] V. V. Andreev. Static Polarizability of Relativistic Two Particle Bound System. / V. V. Andreev, N. V. Maksimenko // Proceedings of the International School-Seminar on Actual Problems of Particle Physics. Dubna. – 2002. – Vol. 2, - p. 128.
- [6] Y. M. Antipov. Measurement of pi-meson polarizability in pion compton effect. / Y. M. Antipov [et. al] // Phys. Lett. – 1983. - V. B121. – p. 445.
- [7] L.V. Fil'kov. Determination of pi+- meson polarizabilities from the gamma gamma ---> pi+ pi- process / L.V. Fil'kov, V.L. Kashevarov // Phys. Rev. – 2006. – V. C 73. – p. 035210.

УДК 539.12

И. С. Сацункевич¹, Д. В. Шёлковый¹

О ПОЛНЫХ СЕЧЕНИЯХ РОЖДЕНИЯ ПАРЫ МЮОНОВ ПОСРЕДСТВОМ ДВУХФОТОННОГО МЕХАНИЗМА В ПРОТОН-ПРОТОННЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ ПРИ ЭНЕРГИИ ПУЧКА 3,5 ТЭВ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь satsunk@dragon.bas-net.by

Расчеты необходимы для сопоставления их результатов с экспериментальными данными Большого адронного коллайдера. Недавно коллаборацией СМS было проведено измерение полного сечения эксклюзивного канала рождения пары заряженных мюонов [1]. Было получено, что велечина полного сечения эксклюзивного канала рождения пары заряженных мюонов равна $\sigma(pp \rightarrow p\mu\mu p) = 3.38 \pm 0.3$ пбн. В эксперименте были использованы следующие ограничения:

1.Инвариантная масса пары мюонов больше 11.5 ГэВ $(m(\mu \mu) > 11.5 \ \Gamma)B)$.

2. Поперечный импульс мюона больше $4 \Gamma \ni B (p_T(\mu) > 4 \Gamma \ni B).$

3. Область псевдобыстроны мюона ограничивалась областью $(|\eta(\mu)| < 2.1)$.

4. Разница поперечных импульсов между мюоном и антимюоном меньше 1 ГэВ $(| \Delta p_T(\mu \mu)| < 1 \Gamma \beta B)$.

5. Ограничение на разность азимутальных углов мюона и антимюона $(1 - |\Delta \varphi(\mu \mu) / \pi| < 0.1)$.

Вклад в полное сечение двухфотонного процесса рождения элементарных частиц дают упругая, неупругая и полуупругая компоненты. Неупругий процесс $pp \rightarrow \gamma\gamma X \rightarrow \mu\mu X$ (фотоны от кварков), упругий процесс $pp \rightarrow \gamma\gamma pp \rightarrow \mu\mu pp$ (фотоны от протонов) и полуупругий процесс $pp \rightarrow \gamma\gamma pX \rightarrow \mu\mu pX$ (один фотон от кварка, второй фотон от протона). Был проведен сравнительный анализ имеющихся Монте-Карло генераторов для протон-протонных и протон-антипротонных ускорителей. Установлено, что упругий случай можно расчитать с использованием Монте-Карло генератора МadGraph, а неупругий – с помощью Монте-Карло генератора Рythia.

В результате, нами было рассчитано сечение упругого рождения пары мюонов в протон-протонных столкновениях с энергий 7 ТэВ на пучок при ограничениях 1-3. Его численная величина составила 4,1 ±0.1 пбн. Полученное значение хорошо согласуется с экспериментальным, и при учете ограничений 4,5 как мы ожидаем они практически совпадут.

Полученная численная величина сечения неупругого процесса при ограничениях 1,2 равна $\sigma(pp \rightarrow \mu \mu X) = 42 \pm 0.4$ пбн. Таким образом, величина полного сечения рождения пары мюонов посредством двухфотоного механизма без учета полуупругого случая в протон-антипротонных столкновениях с энергией 7 ТэВ на пучок составляет 46,1±0.5 пбн.

Стоит отметить, что в эксперименте как раз измерено сечение упругого процесса $pp \rightarrow \gamma\gamma pp \rightarrow \mu\mu pp$.

- [1] CMS Collaboration Exclusive $\gamma \gamma \rightarrow \mu^+ \mu^-$ production in proton-proton collisionns at $\sqrt{s} = 7$ TeV // arXiv: 1111.5536v1.
- [4] Сацункевич, И.С., Хилькевич, А.Я., Шёлковый, Д.В. Рождение лептонных пар в адронных столкновениях за счёт двухфотонного обмена в приближении Вайцзеккера-Вильямса / И.С.Сацункевич, А.Я.Хилькевич, Д.В.Шёлковый // Весці НАНБ серыя фіз.-мат. навук 2011. №2 С. 61.
- [5] J. de Favereau de Jeneret et al. High energy photon interaction at the LHC / J. de Favereau de Jeneret, V. Lemeitre, Y. Liu, S. Ovyn, T.Pierzchala, K. Piotrzkowski, X. Rouby, N. Schul and M. Vander Donck // arXiv:0908.2020v1.

УДК 621.039.5

А. А. Хрущинский¹, С.А. Кутень¹, Л. Бабичев², К. Веренич¹

ОБ УЛУЧШЕНИИ ДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ДЕТЕКТОРА ПРЯМОЙ ЗАРЯДКИ

¹ НИИ ядерных проблем, ул. Бобруйская, 11, 220072 Минск, Беларусь <u>chr@inp.bsu.by</u>

³ Объединенный институт энергетических и ядерных исследований – Сосны, ул. академика А.К. Красина, 99, 220109 Минск, Беларусь

Для измерения плотности потока нейтронов в активной зоне реактора применяются детекторы нейтронов прямой зарядки (ДПЗ или SPND –Self Powered Neutron Detector в англо-язычной литературе). Впервые детектор был предложен и описан в работе [1]. Эти детекторы основаны на первичных эффектах: захвате нейтронов ядром и последующем β-распаде (эмиссионные ДРЗ), на выходе электронов отдачи и фотоэлектронов при поглощении внешнего γ-излучения (комтоновские ДПЗ). В ядерной энергетике наибольшее распространение получили эмиссионные родиевые ДПЗ. Собираемый на его коллекторе ток электронов бета-распада пропорционален плотности потока нейтронов. Основные преимущества ДПЗ - большой ресурс работы (несколько лет) при рабочей температуре до 700°С, малые габаритные размеры, слабая чувствительность к гамма-фону реактора, линейность показаний тока в зависимости от плотности потока нейтронов, простые вторичные электронные устройства, низкая стоимость изготовления. Кроме того, они не требуют предварительной градуировки

Однако, обладая довольно хорошими статическими характеристиками, родиевые ДПЗ имеют сравнительно большую инерционность. В основном она обусловлена временем жизни нуклида Rh¹⁰⁴, возникающего при захвате нейтрона ядром эмиттера (Rh¹⁰³). Постоянная времени прибора составляет ~ 40сек, что недостаточно в условиях переходных и аварийных режимов, когда процессы развиваются за времена порядка секунды и менее. Например, при выводе реактора на минимально контролируемый уровень мощности существует промежуток времени, когда нейтронный поток фактически не контролируется существующими приборами. Поэтому улучшение динамических характеристик ДПЗ является актуальной проблемой для ядерной энергетики, которой посвящено множество работ. В частности, в [2] предлагается улучшить динамические свойства прибора путем цифровой фильтрации его сигнала.

Ниже предложено решение проблемы, основанное на использовании кинетических уравнений, описывающих родиевый ДПЗ:

$$\frac{\partial N^{m}}{\partial t} = \int (\sigma^{m}(E)N^{103}(t,r)\varphi(t,r,E))dE - \lambda^{m}N^{m}(t,r)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \int (\sigma^{m}(E)N^{103}(t,r)\varphi(t,r,E))dE + \lambda^{m}N^{m}(t,r) - \lambda N(t,r)$$
(1),

где $\varphi(t, r, E)$ - пространственная спектральная плотность потока нейтронов (1/MeV cm²sec), $\sigma(E)$ и $\sigma^{m}(E)$ -сечения взаимодействия нейтронов с материалом

эмиттера с образованием основного ¹⁰⁴Rh и возбужденного ^{104m}Rh состояний, $N^{103}(t,r)$ и $N^m(t,r)$ -концентрации атомов ¹⁰³Rh и ^{104m}Rh в точке *r* эмиттера, λ и λ^m - постоянные распада основного и возбужденного состояний ядра ¹⁰⁴Rh, соответственно. Интеграл от концентрации возникающих вследствие захвата нейтрона атомов N(t,r) основного состояния ¹⁰⁴Rh по объему эмиттера пропорционален току детектора I(t).

Основываясь на решении уравнений (1) предложено измерять не обычный ток ДПЗ I(t), а обобщенный ток, состоящий из обычного тока и его производной $J(t) = \frac{d}{dt}I(t) + \lambda I(t)$ который содержит только мгновенную составляющую и ~ 5% составляющей с постоянной λ^m (период полураспада $T_{1/2}$ =4.34m). Для экспериментального измерения обобщенного тока необходим другой прибор (модернизированный ДПЗ), для которого предложена принципиальная схема.

Для демонстрации динамических свойств ДПЗ по обобщенному току использована модель точечной кинетики реактора [3] для создания быстро меняющего нейтронного однородного поля за счет изменения реактивности, в которое помещался ДПЗ. В этом поле рассчитывался отклик ДПЗ как функция времени и сравнивался с временной формой изменения нейтронного потока.

Исследованы различные режимы резкого изменения реактивности во времени, имеющие место в практике: одно- и двухступенчатое возрастание от нуля до некоторой конечной величины; линейный, экспоненциальный рост; синусоидальное изменение (первый вариант обычно отвечает выбросу регулирующего стержня, последний встречается при исследований нейтронных шумов). Исследован также сценарий нейтронной вспышки на мгновенных нейтронах для начала кампании пусковой топливной загрузки реактора ВВЭР-1000.

В отличие от обычного тока обобщенный ток реагирует практически мгновенно на изменение нейтронного потока. Во всех случаях временная форма отклика по обобщенному току следует временной форме нейтронного потока с точностью до долей секунды.

- [1] Мительман М.Г. Преобразование энергии короткоживущих радиоактивных изотопов. / М.Г.Мительман, Н.Д.Розенблюм, Р.С.Ерофеев // Атомная энергия. 1961.- Т. 10, № 1. С. 72.
- [2] Бурьян В.И.. Математическая модель родиевого детектора прямого заряда и алгоритмы коррекции их инерционности. / В.И.Бурьян, Л.В.Козлова, А.С.Кужиль, В.Ф. Шикалов // Ядерные измерительно-информационные технологии. -2005.- Т. 1, № 13.-С. 3.
- [3] В.А.Дементьев. Кинетика и регулирование ядерных реакторов. М. Энергоатомиздат.1986.

УДК 621.039.514+539.173.4

Т. Н. Корбут¹, Э. А. Рудак²

ОПИСАНИЕ ПЕРЕХОДНЫХ ПРОЦЕССОВ В РЕАКТОРЕ В РАМКАХ МОДЕЛИ РОЖДЕНИЯ И ГИБЕЛИ ЧАСТИЦ С УЧЁТОМ МГНОВЕННЫХ И ЗАПАЗДЫВАЮЩИХ НЕЙТРОНОВ

¹ ГНУ «Объединенный институт энергетических и ядерных исследований – Сосны» НАН Беларуси, ул. академика Красина, 99, 220109 Минск, Беларусь <u>tamara.korbut@gmail.com</u>

² Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь *e.rudak@dragon.bas-net.by*

Известно, что для многих вероятностных процессов, описываемых прямыми уравнениями Колмогорова, оценка средних значений случайных величин и их дисперсий сводится к моделированию так называемых мгновенных интенсивностей рождения $\lambda(t)$ и гибели $\mu(t)$. Зависимость от времени t может быть произвольной, а среднее число частиц в момент времени t даётся формулой

$$M(t) = \exp\{\int_0^t [\lambda(\tau) - \mu(\tau)] d\tau\}.$$
 (1)

В настоящей работе развитый в [1] формализм используется для описания взаимодействия нейтрона с размножающей средой и установления условий возникновения самоподдерживающейся реакции деления ядер топлива в реакторе.

Для этого в (1) необходимо сделать переход от непрерывного времени t к дискретизированному t_k по времени жизни поколения нейтронов с учётом как мгновенных, так и запаздывающих нейтронов [2]

$$\tau_{no\kappa}^{3}(t_{k}) = \tau_{M2} + \beta [1 - \exp(-t_{k}/\tau_{3})], \qquad (2)$$

где τ_{mr} – время жизни мгновенных нейтронов, β и τ_3 – суммарный выход и среднее время жизни запаздывающих нейтронов соответственно. Связь между числом поколений нейтронов n(t_k) и временем их появления t_k даётся формулой

$$t_k = c \cdot \ln\{[(a-b)e^{ak/c} + b]/a\},$$
(3)

где с = τ_3 , b = β c, a = $\tau_{M\Gamma}$ + b. Разность t_k и t_{k-1} даёт время жизни нейтронов τ_k .

С учётом этого обстоятельства среднее число нейтронов в реакторе в момент времени t_k (с нормировкой на единицу) даётся формулой

$$M(t_k)_p = \exp\left\{\frac{\left[(\rho + \beta - \beta \cdot \exp\left(-t/c\right)\right]t}{a - b \cdot \exp\left(-t/c\right)}\right\},\tag{4}$$

где $\rho = 1 - K_{eff}$ – реактивность. Сравнивая (1) и (4), можно найти выражение для разности мгновенных интенсивностей

$$[\lambda(t_k) - \mu(t_k)]\tau_k \approx \frac{\left[\rho + \beta - \beta \cdot \exp\left(-\frac{t_k}{c}\right)\right]t_k}{\tau_k^2} - \frac{\left[\rho + \beta - \beta \cdot \exp\left(-\frac{t_{k-1}}{c}\right)\right]t_{k-1}}{\tau_{k-1} \cdot \tau_k} \quad (5)$$

Это и есть основное соотношение, необходимое для описания переходных процессов в реакторе с учётом как мгновенных, так и запаздывающих нейтронов.

Условие возникновения самоподдерживающейся реакции в размножающей среде очевидно – в $M(t_k)_p$ (4) показатель экспоненты должен быть равен нулю. Это может быть только в том случае, если $\rho = -\beta$ и t $\rightarrow \infty$. В этом случае

$$\lambda(t_k) - \mu(t_k) \approx -\beta \cdot \frac{\exp\left(-\frac{t_k}{c}\right)t_k}{\tau_k^2} + \frac{\beta \cdot \exp\left(-\frac{t_{k-1}}{c}\right)t_{k-1}}{\tau_{k-1} \cdot \tau_k} .$$
(6)

С учётом исходного уравнения (1), условие возникновения самоподдерживающейся реакции деления ядер в момент времени t_n будет иметь вид

$$\gamma(t_n) = \sum_{k=1}^n \int_{t_{k-1}}^{t_k} [\lambda(s) - \mu(s)] \, ds \approx 0 \,. \tag{7}$$

Функция $\gamma(t_n)$ (7) будет равна нулю только в том случае, если разность мгновенных интенсивностей рождения и гибели $\lambda(t) - \mu(t)$ на интервале времени $0 \div t_n$ меняет знак и при этом отрицательная часть суммы в $\gamma(t_n)$ (7) должна быть скомпенсирована до нуля положительной частью суммы. В качестве примера на рис.1 представлен график зависимости функции $\sum [\lambda(t_k) - \mu(t_k)] \tau_k$ от k для ²³⁵U.



Рис. 1 - График зависимости функции $\gamma(t_n)$ для ²³⁵U

Как и следовало ожидать, на первом этапе до 550 поколений нейтронов идет процесс гибели исходного нейтрона и $\sum [\lambda(t_k) - \mu(t_k)]\tau_k \rightarrow -1$. На втором этапе от k = 550 до $k \approx 2700$ идёт процесс компенсации погибшего исходного нейтрона запаздывающими нейтронами и $\sum [\lambda(t_k) - \mu(t_k)]\tau_k \rightarrow +1$.

В общем, это ожидаемый результат. Отрицательная часть суммы в (7) соответствует поглощению средой исходного мгновенного нейтрона. На это отрезке времени реактор работает как подкритическая сборка с испусканием порядка 1/β мгновенных нейтронов и наработкой соответствующей энергии порядка 200/β МэВ.

Испущенный вслед за этим запаздывающий нейтрон будет играть роль своего предшественника – исходного мгновенного нейтрона деления. Процесс будет повторяться вновь и вновь – возникает самоподдерживающаяся реакция деления ядер топлива.

[1] Рудак Э.А. Взаимодействие нейтрона с размножающей средой в модели рождения и гибели с дискретным временем жизни поколения нейтронов /Э.А. Рудак, О.И. Ячник // Известия НАН Б. Сер. физ.-мат., −2012, № 4. –С.84–88.

УДК 532.546.6::621.039.542.84

В. В. Сорокин

ГИДРОДИНАМИКА ВРАЩАЮЩЕГОСЯ ПЛОТНОГО СЛОЯ МИКРОТВЭЛЬНОГО ЯДЕРНОГО ТОПЛИВА С ВОДЯНЫМ ТЕПЛОНОСИТЕЛЕМ

Объединенный институт энергетических и ядерных исследований – Сосны НАН Беларуси, ул. акад. А. К. Красина, 99, 220109, Минск, Беларусь sorokin.npp@gmail.com

Шаровой тепловыделяющий элемент или микротвэл представляет собой шарик, состоящий из топливного ядра покрытого защитной оболочкой. Оболочки разделяют топливо и теплоноситель и обеспечивают удержание продуктов деления ядер. Перспективный микротвэл диаметром 1,8 мм состоит из топливного зерна из двуокиси урана диаметром 1,5 мм и трехслойной оболочки толщиной 0,15 мм, последовательно: пористый углерод, плотный углерод, карбид кремния. Микротвэлы непосредственно охлаждаемые водой могут быть использованы как в классической реакторной технике, например для повышения надежности BBЭP или в исследовательских реакторах, так и в новой, например, для переработки ядерных материалов (трансмутации), создания активных зон под управлением ускорителя, мишеней с интенсивным охлаждением.

Использование микротвэлов в составе неподвижной засыпки не полностью раскрывает потенциал этого вида ядерного топлива. Представляет интерес подвижная засыпка, с возможностью несложной перегрузки на ходу и быстрого рассыпания в гарантированно подкритическую структуру при аварии. Одним из вариантов является устойчивый плотный вращающийся слой микротвэлов в радиально-окружном потоке капельной жидкости внутри вихревой камеры [1–3].

Схема устройства и фотографии слоя приведены на рисунке. Стенки устройства неподвижны. Вращающийся слой 1 размещен между боковой 2 и торцевыми 3 стенками, и имеет четкую внутреннюю границу 4. Жидкость поступает в камеру через направляющий аппарат 5, размещенный на боковой стенке, приобретая радиальную и окружную составляющие скорости. Далее, обтекая частицы, проходит через слой, его внутреннюю границу 4 и покидает камеру через центральное отверстие в торцевой крышке 6. Радиус границы слоя может лишь незначительно превышать радиус центрального отверстия.

При пористости около 0,5 слой демонстрирует высокую устойчивость в широком диапазоне толщин: существует десятки часов без потерь частиц, нечувствителен к ориентации относительно вертикали и различным возмущениям (удары, вибрация, переменность расхода жидкости, внедрение предметов в слой), допускает догрузку или выгрузку частиц на ходу. По основным свойствам данная система отличается от известных центробежных реакторов кипящего слоя с корпусом в форме вращающегося проницаемого барабана [4] и центробежных реакторов с рыхлыми слоями частиц [5]. Несмотря на то, что частицы опираются на стенки камеры и вращаются с постоянной угловой скоростью, слой в целом похож на жидкость: способен обтекать препятствия, тела в нем могут тонуть, всплывать или диффундировать. На свободной границе

частица прижата к слою аналогом силы тяжести 3–10 g, что и является причиной отсутствия уноса частиц из слоя. Давление частиц друг на друга и на стенку мало вследствие разгружающего действия силы сопротивления возникающей при движении жидкости. Этим объясняется низкий уровень износа частиц (сотые процента потери массы слоя за сутки вращения).



Рис. 1. Схема и фотография устройства с подвижной засыпкой микротвэлов

При моделировании динамика слоя до границы 4 определяется балансом моментов трения о стенки и импульса переданного от жидкости [1], течение жидкости после границы описывается по [6]. Квазижидкое состояние слоя обусловлено колебаниями частиц. Источником колебаний являются частицы, прижатые и огибающие рельеф направляющего аппарата размещенного на боковой стенке вихревой камеры. Результаты моделирования: скорости вращения слоя, пористости, перепадов давления, свойства устойчивости, скорости износа хорошо соответствуют имеющимся качественным и количественным экспериментальным данным и данным визуализации.

- [1] Гольдштик М. А. Процессы переноса в зернистом слое / М. А. Гольдштик. Новосибирск: изд-во Института теплофизики СО РАН. 2005. 358 с.
- [2] Сорокин В. В. Моделирование процесса удержания толстого вращающегося слоя частиц в вихревой камере / В. В. Сорокин // ДАН Беларуси. 2009. Т.53, № 5. С. 100.
- [3] Вихревая камера: патент ВҮ 2008/10594 С1 В 04С 1/00 / Сорокин В. В., Сорокин В. Н. ОИЭЯИ–Сосны НАН Беларуси. Заявл. 2006.05.11. Опубл. 2008.01.28.
- [4] Jones O. C. Thermal Design Concepts for the Rotation Fluidized Bed Reactor / O. C. Jones // Nuclear Science and Engineering. – 1984. – V. 87. – P.13.
- [5] De Wilde J. Rotating fluidized beds in a static geometry: experimental proof of concept / J. De Wilde, A. de Broqueville //AIChE J. – 2007. – Vol. 53. – P. 793.
- [6] Сорокин В. В. Несжимаемое течение в короткой вихревой камере с гиперболическими стенками / В. В. Сорокин // Теплофизика и аэромеханика. – 2005. – Т.12, № 4. – С. 615.
УДК 52-43;524.85:531.51

В. В. Тихомиров¹, Ю. А. Целков²

РЕЛЯТИВИСТСКАЯ АККРЕЦИЯ ЯДЕРНОГО ВЕЩЕСТВА НА МНОГОМЕРНУЮ ПЕРВИЧНУЮ ЧЕРНУЮ ДЫРУ

НИИ ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220030 Минск, Беларусь <u>vvtikh@mail.ru¹</u>, <u>skytec@mail.ru²</u>

В связи с прогрессом моделей мира на бране, значительное внимание привлекает поиск проявлений дополнительных пространственных измерений, как в наземных экспериментах, так и астрофизическими и космологическими средствами. Поглощение компактных объектов как микро черными дырами (ЧД) из ускорителей и космических лучей, так и первичными ЧД (ПЧД), может являться чувствительным индикатором многомерной гравитации, поднимая, вместе с тем, вопрос о стабильности небесных тел. Взаимодействие различных объектов с многомерной ЧД рассмотрено в [1] в нерелятивистском приближении. Для анализа поглощения нейтронной звезды (НЗ) рассмотрим релятивистское обобщение аккреции на *D*-мерную ПЧД.

Исходя из ковариантного сохранения $\nabla_{\nu}T^{\mu\nu} = 0$ тензора энергии-импульса $T^{\mu\nu}$ идеальной жидкости с политропным уравнением состояния $p = Kn^{\Gamma}$, где p,n - давление и плотность числа барионов, Γ - индекс политропы, а также из $\nabla_{\mu}(nu^{\mu}) = 0$, где u^{μ} -4-скорость, можно получить уравнения аккреции на *D*-мерную невращающуюся и незаряженную ЧД с метрикой Шварцшильда-Тангерлини, спроецированную на 4брану:

$$v'v = -\frac{D-3}{2r} \left(\frac{r_g}{r}\right)^{D-3} - \frac{p'}{p+\rho} \left(1 - \left(\frac{r_g}{r}\right)^{D-3} + v^2\right), \quad \frac{2}{r} + \frac{v'}{v} + \frac{n'}{n} = 0, \tag{1}$$

где *v* - радиальная компонента u^{μ} , $\partial x / \partial r \equiv x', r_g$ - гравитационный радиус ЧД. Эта система уравнений имеет особую («звуковую») точку, которая характеризует существование единственного возможного для ЧД режима аккреции – трансзвукового. Используя скорость звука $a_s^2 = dp / d\rho$, можно найти расстояние r_s до звуковой точки и скорость вещества v_s в ней:

$$r_s^{D-3} = \frac{D-3-a_s^2(D-7)}{4a_s^2} r_g^{D-3}, \quad v_s^2 = \frac{a_s^2(D-3)}{(D-3)+a_s^2(7-D)}.$$
 (2)

Интегрирование второго уравнения из (1) элементарно и приводит к скорости аккреции на ПЧД массой *M*:

$$\frac{dM}{dt} = 4\pi v(r)r^2 mn(r) = const,$$
(3)

где *m*-масса частиц среды. Интегрируя первое уравнение из (1) и учитывая (2), получим *D*-мерное обобщение релятивистского уравнения Бернулли для адиабатической аккреции

$$\left(1 - \frac{a_s(r_s)^2}{\Gamma - 1}\right)^2 \left(1 - \frac{D - 7}{D - 3}a_s(r_s)^2\right) = \left(1 - \frac{a_{\infty}^2}{\Gamma - 1}\right)^2,$$
(4)

которое позволяет связать параметры в звуковой точке $a_s(r_s)$ и на бесконечности a_{∞} . Видно, что при $a_s \ll 1$ соотношения (2) и (4) переходят в *D*- мерные нерелятивистские [1], а при D = 4 в 4-мерные релятивистские [2].

Применим полученные уравнения для аккреции ядерной материи H3 на многомерную ПЧД. Рассмотрим 6-мерную гравитацию, как первый экспериментально разрешенный случай мира на бране с плоскими дополнительными измерениями. В качестве уравнения состояния возьмем политропу Бете-Джонсона с жестким индексом $\Gamma = 2.54$, хорошо описывающую состояние H3 при плотностях числа нейтронов $0.1\phi m^{-3} \le n \le 3\phi m^{-3}$. Можно показать, что сжатие вещества на звуковом радиусе составляет не более 20% и т.о. недостаточно для образования кварк-глюонной плазмы в аккреционном потоке. Интегрируя (3) можно получить характерное время роста ПЧД до выхода из режима 6-мерной аккреции, когда $r_s \simeq L$, где L- масштаб макроскопических дополнительных измерений. Дальнейший рост массы ПЧД проходит в 4-мерном режиме. Можно показать, что продолжительность 6-мерной аккреции ~ минуты, а 4-мерной, вплоть до полного поглощения H3 ~ часы.

Т.о. факт стабильности существования НЗ позволяет наложить ограничения на масштаб дополнительных измерений. Для этого рассмотрим захват и торможение ПЧД в веществе НЗ. Получим, что торможение в НЗ 6-мерных ПЧД позволяют исследовать гораздо больший по сравнению с белыми карликами (БК) [3] интервал 6-мерной массы Планка $1TeV \le M_6 \le 10^6 TeV$. В интервале $M_6 \le 10^2 TeV$ ПЧД способна полностью затормозиться при однократном прохождении через НЗ. Учитывая релятивистские поправки в законах сохранения при захвате ПЧД и распространенность НЗ получим ограничения на плотность 6-мерных ПЧД, изображенные на рисунке. Видно, что они близки к ограничениям по поглощению БК, однако при $M_6 > 10^4 TeV$ превосходят плотность скрытой массы (пунктир) и т.о. такие значения M_6 недопустимы.



 Giddings, S. B. Astrophysical implications of hypothetical stable TeV-scale black holes / S. B. Giddings, M. L. Mangano // Phys. Rev. 2008. - Vol. D78. P. 035009.

- [2] Shapiro, S. L. Black holes, white dwarfs, and neutron stars: The physics of compact objects / S. L. Shapiro, S. A. Teukolsky.— New York, USA: Wiley, 1983.— P. 645.
- [3] Тихомиров, В. В. Об ускорении аккреции на первичные черные дыры в присутствии дополнительных измерений / В. В. Тихомиров, Ю. А. Целков // Весці НАН Беларусі. Сер. физ.-мат. навук. 2012. № 2. —С. 75–83.

УДК 539.12.01

Ю.П. Выблый¹, А.А. Леонович², А.Н. Тарасенко³

СКАЛЯРНО-ТЕНЗОРНАЯ ТЕОРИЯ ГРАВИТАЦИИ В ПРОСТРАНСТВЕ МИНКОВСКОГО

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

Vyblyi@gmail.com

²Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, П.Бровки, 6, 220013, Минск, Беларусь ³Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь <u>tarasenk@tut.by</u>

Современные астрофизические наблюдательные данные, интерпретируемые в рамках общей теории относительности (ОТО), однозначно указывают на то, что в современную эпоху Вселенная расширяется с ускорением. Это противоречит обычному космологическому сценарию ОТО и приводит к необходимости вводить в рассмотрение темную энергию - вид материи, однородной и изотропной, взаимодействующей только гравитационно, и обладающей отрицательным давлением, если моделировать ее с помощью идеальной жидкости. Роль темной энергии может играть постоянный Л-член, которым могут быть дополнены уравнения Эйнштейна. Он позволяет хорошо описывать имеющиеся наблюдательные данные, однако не имеет интерпретации и приводит к физически неудовлетворительному однозначной сценарию бесконечного ускорения расширения и, в частности, гравитационного уничтожения вещества в будущем - так называемому Большому Разрыву (Big Rip). Более реалистичным кандидатом на роль темной энергии является нейтральное скалярное поле, различные уравнения движения которого широко обсуждаются в литературе. В рамках ОТО не существует какого-либо критерия выбора этих уравнений, более того, как было показано в [1], скалярное поле с любыми уравнениями движения в определенном режиме может приводить к удовлетворительному космологическому сценарию в современную эпоху.

К проблеме определения лагранжиана скалярного поля может быть применен подход к описанию гравитации как нелинейной теории симметричного тензорного поля ψ_{ik} (i,k = 0,1,2,3) в пространстве Минковского [2]. В этом подходе уравнения Эйнштейна можно получить, если рассматривать в качестве источника гравитационного поля полный симметричный тензор энергии-импульса Гильберта возникает эффективная риманова метрика материи и самого поля. При этом пространства-времени g_{ik} , которая определенным образом связана с метрикой Минковского и тензорным потенциалом. Четыре дополнительных условия, которые могут быть присоединены к уравнениям Эйнштейна в силу их калибровочной инвариантности, могут быть выбраны в этом подходе в качестве условий, ограничивающих спиновые состояния тензорного потенциала, и имеют вид $D_{n}\psi^{nk} = 0$, где D_n - ковариантная производная по метрике Минковского.

Полагая, что скалярное поле является компонентой гравитационного взаимодействия, аналогично потребуем, чтобы его источником был полный след тензора энергии-импульса Гильберта материи и самого скалярного поля. Уравнение скалярного поля ϕ , минимальным образом взаимодействующего с тензорным, должно иметь вид ($\Box - m^2$) $\phi = k(T^{\phi} + T^M)$, где даламбертиан определяется через ковариантные производные по эффективной метрике как $\Box = -\nabla^i \nabla_i$, постоянная т имеет смысл массы скалярного поля, k - константа взаимодействия, T - след тензора энергии-импульса Гильберта в эффективном пространстве-времени.

Структура уравнения скалярного поля позволяет определить общий вид соответствующего лагранжиана:

$$L = 1/2[\varphi_i \varphi^i / (1+2k\varphi) - m^2 \varphi^2 - C(1+2k\varphi)^2] \sqrt{-g} + L^M((1+2k\varphi)g_{ik}), \qquad (1)$$

где *С* - произвольная константа. Находя из (1) уравнение скалярного поля в явном виде, получим

$$(\Box - m^2)\varphi = k(-\varphi^i \varphi_i / (1 + 2k\varphi) + 2m^2 \varphi^2 + 2C(1 + 2k\varphi)^2 + T^M) .$$
⁽²⁾

При $C > -m^2/4k^2$ потенциал $V(\varphi) = 1/2[m^2\varphi^2 + C(1+2k\varphi)^2]$ в лагранжиане (1) имеет минимум в точке

$$\varphi_0 = -2kC/(m^2 + 4k^2C), \quad V(\varphi_0) = m^2C/2(m^2 + 4k^2C)$$
(3)

При C > 0 потенциал в точке минимума положителен и может играть роль Λ -члена в лагранжиане взаимодействующих тензорного и скалярного полей и, следовательно, в уравнениях Эйнштейна.

При рассмотрении космологического сценария в скалярно-тензорной теории используется метрика Фридмана – Робертсона - Уолкера, причем дополнительные условия ограничения тензорного поля по спину приводят к пространственно плоской метрике. Численное решение полной системы полевых уравнений показывает, что при определенных ограничениях на параметры скалярное поле моделирует темную энергию в согласии с современными наблюдательными данными и допускает сценарий циклического расширения и сжатия Вселенной, при этом отсутствует начальная космологическая сингулярность [3].

- Scherrer J. Slow-Roll Freezing Quintessence / J.Scherrer and A.A. Sen // Phys. Rev. D.-2008 - 77 - 083515.
- [2] Логунов А.А. Теория гравитационного поля / А.А. Логунов Наука, 2001. 240 С.
- [3] Выблый Ю.П. Скалярное поле с источником в виде следа тензора энергииимпульса как модель темной энергии / Ю.П. Выблый, А.А. Леонович, А.Н. Тарасенко // Ковариантные методы в теоретической физике. Физика элементарных частиц и теория относительности. Минск, 2011. – Вып. 7. - С.36.

УДК 53

С. Л. Черкас¹, В. Л. Калашников²

МОЖЕТ ЛИ МАСШТАБНЫЙ ФАКТОР ОСЦИЛЛИРОВАТЬ

¹ НИИ ядерных проблем при БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220050 Минск, Беларусь <u>cherkas@inp.bsu.by</u>

² Венский технический университет, Gusshausstrasse, 27/387, A-1040 Вена, Австрия <u>v.kalashnikov@tuwien.ac.at</u>

В данной работе мы рассматриваем на основе двух классических одномерных моделей проблему существования осцилляций космологического масштабного фактора. Данный вопрос возникает в связи с попытками решения проблемы так называемой вакуумной энергии, являющейся, по последним данным, определяющим фактором в эволюции Вселенной.

Известно, что стандартный подход к вычислению корреляторов полей в какомнибудь состоянии (например в вакуумном) в квантовой теории поля приводит к функциям, обращающиеся в бесконечность в одной и той же пространственной точке

$$\lim_{t \to \infty} \langle 0 | \phi(t, r) \phi(t, r') | 0 \rangle \rightarrow \infty.$$
(1)

В квантовой теории поля обычно требуется вычислять только амплитуды рассеяния, так что вычисление корреляторов в одной точке не требуется, и возникающие в процессе вычислений бесконечности устраняются перенормировкой.

В квантовой космологии ситуация существенно изменяется: возникает необходимость вычислить плотность энергии полей, которая также оказывается бесконечной, поскольку квадратична по полям. Получить конечные величины можно, если в импульсном представлении ограничить максимально возможные передаваемые импульсы в системе. Считается, что естественным ограничителем может служить масса Планка. Для плотности энергии полей из соображений размерности получается $\rho \sim M_p^4$. Такая плотность энергии должна была бы вызывать очень быстрое расширение вселенной, которое в реальности не наблюдается. Что касается флуктуаций других полей, то для электромагнитного поля будем иметь

$$<0|E_i(t,r)E_i(t,r)|0>\sim \delta_{ij}M_p^4$$
, где δ_{ij} - символ Кронекера. (2)

Метрический тензор трехмерного пространства γ_{ij} является безразмерной величиной, что дает следующую оценку его флуктуаций

$$<0|\gamma_{ij}(t,r)\gamma_{kl}(t,r)|0>\sim\frac{1}{2}\left(\delta_{ik}\delta_{jl}+\delta_{il}\delta_{jk}\right).$$
(3)

Таким образом, флуктуации метрического тензора оказываются такого же порядка как невозмущенный тензор, соответствующий евклидовому пространству. Поскольку гравитационное поле существенно нелинейно по своей природе, эта нелинейность должна играть существенную роль в квантовой теории. Если предположить, что масштабный фактор $a = (\det \gamma_{ij})^{1/6}$ также является осциллирующей величиной, то можно предложить следующее решение проблемы вакуумной энергии: поскольку энергия, соответствующая масштабному фактору входит в гамильтониан со знаком противоположным знаку полей материи и гравитационных волн, то вакуумные

масштабного фактора могли бы компенсировать флуктуации флуктуации гравитационных волн и полей материи и, таким образом, удалось бы решить проблему несуществующего аномально быстрого расширения Вселенной. За отсутствием квантовой теории гравитации, можно исследовать возможность локальных осцилляций масштабного фактора в классике. В работе [1] мы рассмотрели две одномерные модели, в которых возможно глобальное расширение Вселенной, и, одновременно, существование осцилляций масштабного фактора. Для модели струны в фоновом пространстве [1, 2] гамильтониан может быть представлен в виде:

$$H = \frac{1}{2} \int e^{2\alpha} \left(-M_p^2 \alpha'^2 - M_p^2 (\partial_x \alpha)^2 + \varphi'^2 + (\partial_x \varphi)^2 \right) dx,$$
(4)

где штрих означает дифференцирование по конформному времени τ . Здесь $\alpha(\tau, x) = \ln \alpha(\tau, x)$ представляет собой логарифм масштабного фактора, $\phi(\tau, x) = \{\phi_1(\tau, x), \phi_2(\tau, x)...\phi_N(\tau, x)\}$ - набор скалярных полей.

Для модели Бианки I, интервал записывается как [1]

$$ds^{2} = e^{2\alpha} (d\tau^{2} - e^{-4B} dx^{2} - e^{2B + 2\sqrt{3}V} dy^{2} - e^{2B - 2\sqrt{3}V} dz^{2}),$$
(5)

где функции α, V, B зависят от времени τ и одной пространственной координаты x.

Гамильтониан модели Бианки I имеет вид

$$H = \frac{M_{p}^{2}}{2} \int \left(e^{2\alpha} \left(-\alpha^{'2} + B^{'2} + V^{'2} \right) + e^{2\alpha + 4B} \left(\frac{1}{6} (\partial_{x} \alpha)^{2} + \frac{1}{3} \partial_{xx} \alpha + \frac{7}{6} (\partial_{x} B)^{2} + \frac{1}{3} \partial_{xx} B + \frac{4}{3} \partial_{x} \alpha \partial_{x} B + \frac{1}{2} (\partial_{x} V)^{2} \right) \right) dx,$$
(6)

где V - амплитуда гравитационной волны. Для обоих моделей были найдены начальные условия при которых масштабный фактор осциллирует во времени и пространстве. Это не означает, что масштабный фактор является осциллирующим для всех начальных условий: существуют решения, в которых он ведет себя гладко. Для модели струны в найденных решениях энергия осциллирующих скалярных полей компенсируется энергией осциллирующего масштабного фактора, так что имеется медленная (усредненная) эволюция на фоне быстрых осцилляций. Для неоднородной модели Бианки I энергия осцилляций масштабного фактора компенсирует энергию осцилляций В - "поля", так что средняя эволюция определяется энергией "чистой" Можно α, B образуют гравитационной волны. сказать, что нелинейную калибровочную волну, которая не влияет на среднюю эволюцию. Однако, можно предположить, что в квантовом случае ситуация изменится. Калибровочная волна может "перемешаться" с гравитационной, так что осцилляции масштабного фактора будут компенсировать не только осцилляции В - "поля", но и осцилляции гравитационной волны. Таким образом, вопрос о возможности компенсации энергии нулевых колебаний флуктуациями масштабного фактора невозможно решить в рамках классической теории, в классике можно только показать существование решений с осциллирующим масштабным фактором.

- [1] Cherkas S. L., Kalashnikov V. L. Can the scale factor be rippled? // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. 2012. V. 15. P. 315.
- [2] Cherkas S. L., Kalashnikov V. L. An inhomogeneous toy model of the quantum gravity with the explicitly evolvable observables. // Gen. Rel. & Grav. 2012. V. 44. P. 3081.

УДК 523.21

А. М. Крот

ОБЪЯСНЕНИЕ ФОРМ ПЛАНЕТАРНЫХ ОРБИТ С УЧЕТОМ ОСЦИЛЛИРУЮЩЕЙ СИЛЫ АЛЬВЕНА И ОЦЕНКА УГЛОВОГО СМЕЩЕНИЯ ПЕРИГЕЛИЯ МЕРКУРИЯ НА ОСНОВЕ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ГРАВИТИРУЮЩИХ КОСМОГОНИЧЕСКИХ ТЕЛ

Объединенный институт проблем информатики НАН Беларуси, ул. Сурганова, 6, 220012 Минск, Беларусь alxkrot@newman.bas-net.by

Настоящая работа посвящена применению статистической теории формирования гравитирующих космогонических тел к расчету планетарных орбит и объяснению их форм (с учетом осциллирующей силы Альвена [1]) в Солнечной системе и других экзопланетарных системах. Статистическая теория формирования гравитирующих космогонических тел предложена в работах [2]–[4], в рамках которой

 – решена известная проблема теории гравитационной конденсации газо-пылевого протопланетного облака (в частности, гравитационной неустойчивости Джинса) на основе разработанной статистической модели антидиффузионного процесса гравитационной конденсации;

– предложен новый закон распределения планетарных расстояний в Солнечной системе в зависимости от среднего значения удельного момента импульса сплошной среды в допланетном облаке, обобщающий знаменитый закон академика О.Ю.Шмидта и по сравнению с другими дающий достаточно хорошую оценку наблюдаемых планетарных расстояний в Солнечной системе и некоторых экзопланетарных системах;

 на основе эволюционных уравнений антидиффузионного процесса выведено нелинейное время-зависимое Шредингер-подобное волновое уравнение, описывающее возникающие нелинейные явления (в частности, гравитационной неустойчивости) вследствие процессов самоорганизации в формирующемся космогоническом теле.

Данная работа объясняет возникновение осциллирующей силы Альвена [1], видоизменяющей изначально круговые формы планетарных орбит в Солнечной системе, с точки зрения статистической теории формирования гравитирующих космогонических тел [2]–[4]. Вследствие присутствия осциллирующей силы Альвена [1], движущиеся твёрдые тела в дальней зоне вращающегося сфероидального тела имеют эллиптические траектории с началом в фокусе и с небольшими эксцентриситетами. Более сложную траекторию демонстрирует близлежащая к Солнцу планета Меркурий, поскольку в этом случае наблюдается угловое перемещение ньютоновского эллипса за время одного оборота его по орбите, т.е. систематическое (вековое) смещение перигелия орбиты Меркурия [5].

Как известно, именно на пути уточнения закона Ньютона было получено решение проблемы Меркурия, опирающееся на общую теорию относительности (ОТО) [5]. Однако заметим, что с позиции статистической теории гравитирующих космогонических тел [4] точки зрения как Леверье (о существовании неизвестной материи), так и Эйнштейна (о недостаточности теории Ньютона) практически ничем не отличаются. Действительно, вокруг ядра вращающегося сфероидального тела реально существует плазменная и газо-пылевая материя (в данном случае – солнечная корона), а учет того обстоятельства, что формируемые космогонические тела

имеют нечеткие очертания и представляются посредством сфероидальных форм, требует некоторого уточнения закона Ньютона применительно к гравитирующему сфероидальному телу [2]–[4].

Как показано в [4], гравитационный потенциал в дальней зоне равномерно вращающегося сфероидального тела зависит как от радиальной координаты r, так и от угловой координаты θ , причём в первом приближении эта формула имеет вид:

$$\varphi_g(r,\theta)\Big|_{r>r_*} = -\frac{\gamma M}{r\sqrt{1-\varepsilon_0^2\sin^2\theta}},\tag{1}$$

где $r_* = 1/\sqrt{\alpha}$, α – параметр гравитационного сжатия сфероидального тела, M – масса сфероидального тела, γ – гравитационная постоянная Ньютона, ε_0 – геометрический эксцентриситет ($\varepsilon_0^2 <<1$) [2]–[4]. Отмеченная особенность сильно вытянутой эллиптической орбиты Меркурия приводит к тому, что в перигелии своей орбиты Меркурий более чем в полтора раза ближе к Солнцу, чем в афелии. А с учетом его наибольшей близости по расстоянию к Солнцу и существенной наклоненности его орбиты, заключаем, что проекция точки перигелия орбиты Меркурия непосредственно попадает в близлежащую окрестность Солнца – видимую часть солнечной короны.

С использованием формулы (1) и уравнения Бине в работе выполнен расчет орбиты Меркурия с целью нахождения оценки углового смещения его перигелия на основе статистической теории гравитирующих сфероидальных тел [4]. Показано, что планета Меркурий движется по *прецессирующей* эллиптической орбите, поскольку в выведенном уравнении возмущенной орбиты присутствует модулирующий множитель фазы (азимутального угла). В рамках статистической теории гравитирующих сфероидальных тел получена формула вычисления смещения перигелия орбиты планеты Меркурий за 1 период:

$$\delta \varepsilon = \frac{2\pi (3+e) \cdot \varepsilon_0^2}{\alpha \cdot a^2 (1-e^2)^2},\tag{2}$$

где *а* – большая полуось, *е* – эксцентриситет орбиты планеты Меркурий, а *α* – параметр гравитационного сжатия и ε_0 – геометрический эксцентриситет Солнечного диска. Вычисления по формуле (2) показывают, что согласно статистической теории гравитирующих сфероидальных тел для планеты Меркурий поворот перигелия орбиты равен 43,93" (угловым секундам) в столетие [4], что хорошо согласуется с выводами ОТО Эйнштейна (аналогичная оценка составляет 43,03") и астрономическими наблюдениями (43,11±0,45") [5].

- [1] Альвен Х. Эволюция солнечной системы / Х. Альвен, Г. Аррениус; под ред. Г.И. Петрова. Москва: Мир, 1979. 511с.
- [2] Krot A.M. A statistical approach to investigate the formation of the solar system / A.M. Krot // Chaos, Solitons & Fractals. – 2009. – Vol. 41. – No.3. – P. 1481-1500 (Elsevier Publ. Co.).
- [3] Krot A.M. On the principal difficulties and ways to their solution in the theory of gravitational condensation of infinitely distributed dust substance / A.M. Krot // In the book "Observing our Changing Earth". – Vol.133. – Berlin: Springer, 2009. – P. 283-292.
- [4] Крот А. М. Статистическая теория формирования гравитирующих космогонических тел / А.М. Крот Минск: Беларус. навука, 2012. 448 с. ISBN 978-985-08-1442-5.
- [5] Альберт Эйнштейн и теория гравитации / Сб. статей. Москва: Мир, 1979. 591с.

УДК 539.12

Е. М. Овсиюк¹, О. В. Веко¹, К. В. Казмерчук¹, А. И. Шелест², В. М. Редьков³

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА ЧАСТИЦЫ СО СПИНОМ 1 В ПОТЕНЦИАЛЕ МАГНИТНОГО МОНОПОЛЯ, НЕРЕЛЯТИВИСТСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

¹ Мозырский государственный педагогический университет им. И. П Шамякина, ул. Студенческая, 28, 247760 Мозырь, Беларусь <u>e.ovsiyuk@mail.ru, vekoolga@mail.ru</u> ² Брестский государственный университет им. А. С. Пушкина <u>afanasie@tut.by</u> ³ Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси <u>redkov@dragon.bas-net.by</u>

Известно, что спин очень существенно влияет на поведение квантовомеханической частицы в поле дираковского монополя [1]. В частности, для частицы со спином 1/2 обнаруживается существование особого класса решений, которые можно сопоставлять связанным состояниям в системе «частица в потенциале монополя» (см., например, [2]). В [2] было показано, что такие простые и выделенные состояния возможны и для частицы со спином 1 в поле монополя. Однако до настоящего времени других точных решений в этой системе найти не удалось. В настоящей работе мы обращаемся к исследованию нерелятивистского приближения в системе «векторная частица в поле монополя». Оказалось, что в таком подходе можно построить точные решения для всех значений обобщенного полного момента j. Удается также учесть дополнительное присутствие внешних сферически-симметричных потенциалов, тем самым получить спектры для частицы со спином 1, модифицированные присутствием внешнего монопольного потенциала.

Применяя развитую в [2–4] методику, можно получить систему радиальных уравнений, описывающих частицу со спином 1 в поле магнитного монополя Дирака. С использованием обозначения

$$\frac{1}{2}r^{2}\left(\frac{d^{2}}{dr^{2}} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + 2EM\right) = \overline{\Delta}$$

ее можно представить в краткой матричной форме:

С

$$\overline{\Delta} \Psi = A\Psi, \qquad A = \begin{vmatrix} 2c^2 & \sqrt{2}c & 0\\ \sqrt{2}c & (c^2 + d^2 + 1) & \sqrt{2}d\\ 0 & \sqrt{2}d & 2d^2 \end{vmatrix}, \qquad \Psi = \begin{vmatrix} \Psi_1\\ \Psi_2\\ \Psi_3 \end{vmatrix}, \qquad (1)$$
$$= \frac{1}{2}\sqrt{(j+k)(j-k+1)}, \qquad d = \frac{1}{2}\sqrt{(j-k)(j+k+1)}, \qquad k = eg/\hbar c.$$

Выполняя преобразование, диагонализирующее матрицу смешивания *A*, приводим систему (1) к виду:

$$\overline{\Delta} \begin{vmatrix} \Psi'_{1} \\ \Psi'_{2} \\ \Psi'_{3} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} A_{1} & 0 & 0 \\ 0 & A_{2} & 0 \\ 0 & 0 & A_{3} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \Psi'_{1} \\ \Psi'_{2} \\ \Psi'_{3} \end{vmatrix}.$$
(2)

Для нахождения диагональных элементов нужно решить кубическое уравнение:

$$A^{3} + rA^{2} + sA + t = 0, \quad r = -(3M + 1), \quad s = (N + 2M^{2}), \quad t = -(M - 1)N, \quad (3)$$
$$M = c^{2} + d^{2} = \frac{j(j+1) - k^{2}}{2}, \qquad N = 4c^{2}d^{2} = \frac{j^{2} - k^{2}}{2}\frac{(j+1)^{2} - k^{2}}{2}.$$

Все корни вещественные и положительные. Их можно описать аналитически. Для этого с помощью замены переменных

$$B = A + \frac{r}{3}$$
, $A = B + (M + \frac{1}{3})$

представим кубическое уравнение в приведенной форме:

$$B^{3} + pB + q = 0,$$

$$p = -\left(j(j+1) - \frac{3}{4}k^{2} + \frac{1}{3}\right) < 0, \qquad q = -\left(\frac{1}{3}j(j+1) + \frac{2}{27}\right) < 0.$$
 (4)

Корни задаются соотношениями:

$$\rho = \sqrt{-\frac{p^3}{27}}, \qquad \cos \phi = -\frac{q}{2\rho};$$

$$B_1 = 2\sqrt{-\frac{p}{3}} \cos \frac{\phi}{3}, \quad B_2 = 2\sqrt{-\frac{p}{3}} \cos(\frac{\phi}{3} + \frac{2\pi}{3}), \quad B_3 = 2\sqrt{-\frac{p}{3}} \cos(\frac{\phi}{3} - \frac{2\pi}{3}). \tag{5}$$

Таким образом, система зацепляющихся радиальных уравнений разделяется, и задача сводится к исследованию трех уравнений одинаковой структуры:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr} + 2EM - \frac{L(L+1)}{r^2}\right)f(r) = 0, \quad L = -\frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + 2A}, \quad (6)$$

каждое из которых содержит в качестве параметра свой корень A_k (k = 1, 2, 3) кубического уравнения, возникающий при решении задачи приведения смешиваюшей матрицы в системе уравнений к диагональному виду. Положительность корней $A = A_1, A_2, A_3$ обеспечивает существование положительного параметра L.

В уравнение (6) можно ввести любой известный сферически-симметричный потенциал U(r) (например, кулоновский или осцилляторный) и получить заведомо решаемую квантово-механическую задачу с известной структурой спектра энергии.

- [1] Стражев В. И. Электродинамика с магнитным зарядом / В. И. Стражев, Л. М. Томильчик. Минск: Наука и техника, 1975.
- [2] Редьков В. М. Тетрадный формализм, сферическая симметрия и базис Шредингера / В. М. Редьков. Минск: Белорусская наука, 2009.
- [3] Нерелятивистский предел в общековариантной теории векторной частицы / А. А. Богуш, В. В. Кисель, Н. Г. Токаревская, В. М. Редьков // Весці НАНБ. Сер. фіз.-мат. навук. 2002. № 2. С. 61–66.
- [4] Квантовая механика в однородном магнитом поле: новые задачи / Е. М. Овсиюк, В. В. Кисель, Г. Г. Крылов, В. М. Редьков. – Мозырь: МГПУ им. И. П. Шамякина, 2011.

УДК 539.12

А. В. Остапенко

КЛАССИФИКАЦИЯ РЕШЕНИЙ РЕЛЯТИВИСТСКОГО УРАВНЕНИЯ ТИПА БЕТЕ-СОЛПИТЕРА ДЛЯ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ ДВУХ ЧАСТИЦ

Институт бизнеса и менеджмента технологий БГУ, ул.Октябрьская 4, 220030 Минск, Беларусь astap_2004@tut.by

В течение ряда лет релятивистское фермион-антифермионное уравнение типа Бете-Солпитера является одним из основных средств изучения свойств кваркантикварковых систем. Оно успешно применено автором для описания спектра масс различных семейств мезонов. В зависимости от выбора эффективного потенциала связанных состояний все имеющиеся решения можно поделить на две группы, допускающие как точные, так и приближенные решения.

1. Случай 1. Нормальный делитель M= +1. Уравнение было исследовано в работах [1,2]. Радиальная часть уравнения имеет вид:

$$\left[\frac{d^{2}}{dr^{2}} - \frac{J(J+1)}{r^{2}} + \omega^{2}\right] \Phi(r) = 0$$
(1)

$$\Phi_{2} = \frac{1}{a} \left(\frac{d}{dr} - \frac{\beta_{+}}{r} + \frac{i}{2r} \right) \Phi$$

$$\Phi_{4} = \frac{1}{a} \left(\frac{d}{dr} - \frac{\beta_{-}}{r} - \frac{i}{2r} \right) \Phi$$
(2)

где

$$\gamma = \frac{E^2 - 8k^2 l^2 - \lambda_1^2 - \lambda_2^2}{2iE}, \beta^{\pm} = \frac{1}{2} \pm \frac{i(\lambda_1 - \lambda_2)}{E},$$

$$\sigma = -\frac{4k^2 l^2}{iE}, \lambda_s = m_s + V(r), i = \sqrt{J(J+1)}$$

(s = 1,2; J = 0,1,2,...).
(3)

I. Точные решения для уравнений (1-2) существуют для двух видов потенциалов:

А) Потенциал V = $-V_0$ (V₀ = const) (потенциальная яма). Точное решение есть комбинация функций Неймана и Бесселя [3].

Б). Кулоновский потенциал $V(r) = -\alpha/r$. (4)

Точное решение выражается через вырожденную гипергеометрическую функцию [1,2]:

$$\Phi = Cr^{\lambda} e^{-\varepsilon r} F\left(\lambda_{\pm} - \frac{d^2}{\varepsilon}, 2\lambda_{\pm}, 2\varepsilon r\right)$$
(5)

В) Линейный потенциал V(r) = C + βr. Точное решение существует только для J = 0 и сводится к решению уравнения Куммера.

II. Приближенные решения. Уравнения вида (1) – (2) исследовались для реалистичного корнельского потенциала

$$V(r) = -\frac{k}{r} + \frac{r}{a} \tag{6}$$

Предложено два пути решения проблемы:

А) Метод ВКБ. ВКП-приближения для потенцила (6) позволило свести исходное уравнение к полным эллиптическим интегралам [2].

Б) Приближенное решение исходной системы 4-х дифференциальных уравнений первого порядка находится с помощью системы компьютерной математики MathCad и решается методом Рунге-Кутта [4].

2. Случай 2. Нормальный делитель M= – 1. В этом случае мы имеем систему 4-х дифференциальных уравнений следующего вида:

$$\begin{cases} \partial \Pi_{1} - \varepsilon \Pi_{2} + (1/2r)\Pi_{1} - (i/2r)\Pi_{3} = 0, \\ \partial \Pi_{2} - (\varepsilon - 2p)\Pi_{1} - (1/2r)\Pi_{2} - (i/2r)\Pi_{4} = 0, \\ \partial \Pi_{3} - \varepsilon \Pi_{4} + (1/2r)\Pi_{3} - (i/2r)\Pi_{1} = 0, \\ \partial \Pi_{4} - (\varepsilon - 2p)\Pi_{3} - (1/2r)\Pi_{3} - (i/2r)\Pi_{2} = 0, \end{cases}$$

$$(7)$$

А). В работах [5,6] показано, что система (7) может быть точно решена для потенциала кулоновского типа с помощью матричного метода. Получены точные решения в виде вырожденной гипергеометрической функции с матричным аргументом. Получен также дискретный спектр энергий, который существенно расширяет класс решений системы уравнений, полученных при M = +1.

Б). Корнельский потенциал вида (6). Получены приближенные решения методом ВКБ, которые выражаются через эллиптические интегралы 1-го, 2-го и 3-го рода.

Полученные результаты дают возможность широкого исследования кваркантикварковых систем (мезонов) с использованием релятивистского фермионантифермионного уравнения типа Бете-Солпитера и могут быть использованы в различных экспериментах по изучению сильных взаимодействий элементарных частиц.

[1]. Остапенко А. В. Релятивистское фермион-антифермионное уравнение и спектр чармония // Известия АН БССР. – 1979. – Сер.ф.-м. н., № 3. – С. 99 – 105.

[2]. Ostapenko A. V.. Relativistic fermion-antifermion equation and mass spectrum of mesons / A. A Bogush., A. V.Ostapenko //Acta Physica Polonica. – 1986. – V. B17, № 11. – P. 971 – 984.

[3]. Остапенко А.В. Дискретный спектр энергий связанной двухфермионной системы и массы векторных мезонов./ Богуш А.А., Остапенко А.В.// Весці АН БССР. – Сер. Фіз.мат. н., 1971, № 3. – С. 79 – 85.

[4]. Остапенко А.В. Об использовании пакета MathCad в решении уравнений типа Бете-Солпитера. // Человек. Цивилизация. Культура. Тезисы докладов XII межвузовской конференции. Минск, 20 апреля 2007 г. Мн., 2007. – С. 230 – 232.

[5]. Астапенка А.У. А6 матрычных рашэннях дыферэнцыяльнага ўраўнення другога парадку тыпу Шрэдзінгера / Астапенка А.У. // Весці АН БССР. – 1991– Сер.фіз.-мат.нав. №1, – С. 33 – 41.

[6]. Остапенко А.В. Матричный подход к решению релятивистского уравнения типа Бете-Солпитера» // Сб. материал. междунар. научной конфю «Актуальные проблемы теоретической физики, физики конденсированных сред и астрофизики, посвященной памяти М.А.Иванова. Брест 23-24 сентября 2010 г.». Брест. 2011 г., – С. 105 – 109.

УДК 539.12

Е. М. Овсиюк, О. В. Веко

О РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ ЧАСТИЦЫ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ В СФЕРИЧЕСКОМ ПРОСТРАНСТВЕ РИМАНА

Мозырский государственный педагогический университет им. И. П Шамякина, ул. Студенческая, 28, 247760 Мозырь, Беларусь <u>e.ovsiyuk@mail.ru, vekoolga@mail.ru</u>

В работе [1] были найдены точные решения уравнения Шредингера для частицы в магнитном и электрическом полях на фоне гиперболического пространства Лобачевского. В настоящей работе будут найдены точные решения уравнения Шредингера в пространстве постоянной положительной кривизны, сферической модели Римана, в присутствии внешнего электрического поля. Отметим, что использованное в [1] электрическое поле не являлось решением уравнений Максвелла. Этот недостаток устранен в настоящей работе: в пространстве Римана дано другое обобщение однородного электрического поля, которое является решением уравнений Максвелла.

В сферическом пространстве Римана известна следующая система цилиндрических координат:

$$ds^{2} = dt^{2} - \cos^{2} z \left(dr^{2} + \sin^{2} r d\phi^{2} \right) - dz^{2},$$

$$z \in [-\pi/2, +\pi/2], \quad r \in [0, \pi], \quad \phi \in [0, 2\pi].$$
(1)

Внешнее электрическое поле задается согласно

$$A_0 = E_0 \, \frac{\sin z}{\cos z} \,. \tag{2}$$

Уравнение Шредингера в координатах (1) примет вид:

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t} + eE_0\frac{\sin z}{\cos z}\right)\Psi = -\frac{1}{2}\left[\frac{1}{\cos^2 z}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\cos r}{\cos^2 z\sin r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{\cos^2 z\sin^2 r}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - 2\frac{\sin z}{\cos z}\frac{\partial}{\partial z}\right]\Psi$$

Переменные разделяются подстановкой $\Psi = e^{-i\varepsilon t} e^{im\phi} Z(z) R(r)$, в результате приходим к уравнениям (λ – постоянная разделения):

$$\cos^{2} z \frac{d^{2} Z}{dz^{2}} - 2\cos z \, \sin z \frac{dZ}{dz} + 2\cos^{2} z \left(\varepsilon + v \frac{\sin z}{\cos z}\right) Z = \lambda Z, \tag{3}$$

$$\frac{d^2R}{dr^2} - \frac{\cos r}{\sin r} \frac{dR}{dr} + \frac{m^2}{\sin^2 r} R = \lambda R.$$
 (4)

В уравнении (4) перейдем к новой переменной: $1 - \cos r = 2x$, $r = \arccos(1 - 2x)$ и введем подстановку $R = x^a (1 - x)^b F$. При *a* и *b*, выбранных согласно a = +|m|/2, b = +|m|/2, приходим к уравнению

$$x(1-x)\frac{d^2F}{dx^2} + [a(1-x)-bx+a(1-x)-bx+(1-2x)]\frac{dF}{dx} - [a(a+1)+2ab+b(b+1)-\lambda]F = 0,$$

которое является уравнением гипергеометрического типа с параметрами:

$$\alpha = a + b + \frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} + \lambda}$$
, $\beta = a + b + \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \lambda}$, $\gamma = 2a + 1$.

Условие обрыва ряда до полинома $\alpha = -n = 0, -1, -2, ...$ приводит к квантованию параметра λ и соответствующим функциям *R* :

$$l + \frac{1}{4} = (a + b + \frac{1}{2} + n)^2,$$
(5)

$$R = \left(\sin\frac{r}{2}\right)^{+|m|} \left(\cos\frac{r}{2}\right)^{+|m|} F(-n, 2|m|+1+n, |m|+1; -\sin^2\frac{r}{2}).$$
(6)

Рассмотрим уравнение (3); вводим переменную y = 1/2 - (1/2)i tg z и подстановку $Z = y^c (1-y)^d F$. При c, d, выбранных согласно

$$c = \frac{1 - \sqrt{1 + 2\varepsilon - 2iv}}{2}, \quad d = \frac{1 - \sqrt{1 + 2\varepsilon + 2iv}}{2},$$

приходим к уравнению гипергеометрического типа

$$y(1-y)\frac{d^{2}F}{dy^{2}} + \left[2c - 2y(c+d)\right]\frac{dF}{dy} - \left[(c+d)(c+d-1) - \lambda\right]F = 0$$
(7)

с параметрами:

$$\alpha = -\frac{1}{2} + c + d + \sqrt{\frac{1}{4} + \lambda}, \quad \beta = -\frac{1}{2} + c + d - \sqrt{\frac{1}{4} + \lambda}, \quad \gamma = 2c.$$

Комбинация *c* + *d*, входящая в выражение для параметров гипергеометрической функции, может быть отрицательной, и выполнимо условие квантования:

$$\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{1 + 2\varepsilon - 2i\nu} + \sqrt{1 + 2\varepsilon + 2i\nu}}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1 + 4\lambda} = -n.$$
(8)

Для краткости введем обозначение $N = 1 + 2n + \sqrt{1 + 4\lambda}$. Из (8) находим формулу для спектра энергий и соответствующие функции Z :

$$2\varepsilon + 1 = \frac{N^2}{4} - \frac{4\nu^2}{N^2}, \quad Z = y^c (1 - y)^d F(\alpha, \beta, \gamma; y),$$
$$c = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{N}{2} + \frac{2i\nu}{N} \right), \quad d = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{N}{2} - \frac{2i\nu}{N} \right). \tag{9}$$

Полученный спектр энергии частицы в электрическом поле на сфере очень похож на спектр энергии для задачи Кеплера на сфере [2]. Это позволяет предполагать существование и других связей между этими системами.

Авторы благодарны В.М. Редькову за советы и помощь в работе.

- [1] Bogush A. A. Schrödinger particle in magnetic and electric fields in Lobachevsky andRiemann spaces / A. A. Bogush, V. M. Red'kov, G. G. Krylov // NPCS. – 2008. – Vol. 11. – P. 403–416.
- [2] Богуш А. А. О квантовомеханической задаче Кеплера в трехмерном пространстве Лобачевского / А. А. Богуш, Ю. А. Курочкин, В. С. Отчик // Доклады АН БССР. – 1980. – Т. 24. – С. 19–22.

УДК 539.182

В.В.Тригук¹, И.Д.Феранчук², А.В.Леонов², А.Л.Толстик²

РЕГУЛЯРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ УЧЕТА ОБМЕННЫХ И КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ В МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМАХ

¹Брестский государственный университет им. А.С. Пушкина, б.Космонавтов 21, 224016, Брест, Беларусь

<u>triguk_vv@tut.by</u>

² Белорусский государственный университет, пр.Независимости 4, 220030, Минск, Беларусь

Задача об описании многоэлектронного атома в рамках нерелятивистской квантовой теории является базовой для микроскопических расчетов в физике конденсированных сред. В настоящее время основными подходами в этой области являются метод Хартри — Фока и метод функционала плотности, в которых рассматривается движение электрона в самосогласованном поле других частиц (одноэлектронное приближение). Однако разработка эффективных методов учета корреляционных и обменных поправок при вычислении физических характеристик многоэлектронных атомов остается актуальной проблемой для многих практических приложений.

Нами была предложена аналитическая теория возмущений (АТВ) [1], в которой одноэлектронное состояние каждой оболочки с достаточно высокой точностью аппроксимируется водородоподобной волновой функцией с единственным параметром - парциальным эффективным зарядом. Аналитическая форма волновых функций нулевого приближения позволяет учитывать корреляционные поправки путем прямого вычисления бесконечных сумм, возникающих в высших порядках стандартной теории возмущений, с помощью аппарата двухчастичной кулоновской функции Грина. Дополнительные проблемы в этом подходе связаны с учетом обменного взаимодействия, возникающего при симметризации волновой функции. В частности, в работе [1] был проведен расчет энергии возбужденного состояния $(1s^{1}2s^{1})$ орто- и парагелия, в котором симметрия системы задавалась при выборе нулевого приближения. Было показано, что уже во втором порядке АТВ достигается точность, вариационных расчетов сопоставимая с результатами с использованием многопараметрических пробных волновых функций.

В настоящей работе предлагается другой подход, в котором волновая функция нулевого приближения не симметризуется, а корректная симметрия системы восстанавливается при вычислении поправок высших порядков за счет выбора соответствующего потенциала возмущения. Таким образом, обменные и корреляционные поправки к одноэлектронному приближению в рамках АТВ рассматриваются единым образом, что является существенным для обобщения АТВ для атомов с большим числом электронов.

Рассмотрим основную идею этого подхода на примере двухэлектронной задачи (например, атом гелия). В этом случае волновая функция произвольного состояния атома является собственной для двух коммутирующих операторов:

$$\begin{cases} \hat{H}(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2})\Psi_{s}(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2}) = E_{s}\Psi_{s}(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2}) \\ \hat{P}(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2})\Psi_{s}(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2}) = s\Psi_{s}(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2}) \end{cases}$$
(1)

Здесь $\hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ — гамильтониан системы, $\Psi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ — симметризованная волновая функция состояния, соответствующего энергии E_s , $\hat{P}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ — оператор перестановки координат, $s = \pm 1$ — его собственные значения.

Эти два уравнения можно свести к одному с помощью оператора проектирования

$$\hat{T}_{s} = \frac{1}{\sqrt{2}} [1 + s\hat{P}(1, 2)]; \hat{T}_{s}^{2} = \hat{T}_{s}$$
⁽²⁾

По определению, произвольная (несимметризованная) волновая функция при действии данного оператора становится собственной для оператора перестановки. В итоге задача сводится к решению одного уравнения для функции $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, на которую уже не накладывается дополнительных условий:

$$\left[\hat{H}(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2})-E_{s}\right]\vec{T}_{s}\Psi(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2})=0$$
(3)

$$\Psi_{s}(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2}) = \vec{T}_{s}\Psi(\vec{r}_{1},\vec{r}_{2}).$$
(4)

При решении этого уравнения для гамильтониана нулевого приближения \hat{H}_0 можно, как и в работе [1], выбрать сумму водородоподобных гамильтонианов с эффективными зарядами, а волновую функцию представить в виде произведения кулоновских волновых функций. Тогда использование АТВ по оператору

$$\hat{V} = \left[\hat{H}\hat{T}_s - \hat{H}_0\right] - \left[E_s\hat{T}_s - E_0\right],\tag{5}$$

позволяет учитывать обменные поправки в рамках АТВ.

В работе проведены расчеты, позволяющие оценить точность и эффективность предложенного подхода.

[1] Тригук, В.В. Расчет характеристик атомов и ионов на основе аналитической теории возмущений / В.В. Тригук, И.Д. Феранчук // Журнал прикладной спектроскопии. — 2010. – Том 77, № 6. — С. 813 – 820.

УДК 539.12.01

V. Kapshai¹, K. Shilyaeva², Y. Grishechkin¹

RESONANCE STATES SPECTRUM AND QUANTUM FIELD THEORY EQUATIONS FOR THE TWO-PARTICLE SYSTEMS

¹Gomel State University, Sovetskaya Str., 102, Gomel, 246019, Belarus <u>kapshai@rambler.ru</u>, <u>ygrishechkin@rambler.ru</u> ²Belorussian State University of Transport, Kirova Str., 34, Gomel, 246653, Belarus <u>kssh@tut.by</u>

A method for resonance finding of relativistic two-particle systems, described by covariant three dimensional integral equations [1,2] in the relativistic configurational representation (RCR) [2] is proposed. The method is applied for a model potential and analysis of the relativistic cross sections behaviour is carried out. Partial equations for the scattering states in the RCR for the s-waves have the form [3]

$$\psi^{(j)}(\chi_q, r) = \sin \chi_q m r + \int_0^\infty dr' g^{(j)}(\chi_q, r, r') V(r') \psi^{(j)}(\chi_q, r'), \qquad (1)$$

where j = 1, 2, 3, 4 corresponds to the kind of the quasipotential type equation. The value χ_q is the rapidity, connected with the energy of the two-particle system by $2E_q = 2m\cosh\chi_q$. The RCR partial Green functions are $g^{(j)}(\chi_q, r, r') = g^{(j)}(\chi_q, r - r') - g^{(j)}(\chi_q, r + r')$, where for example at j = 2 [3]

$$g^{(2)}(\chi_q, r) = \frac{(4m\cosh\chi_q)^{-1}}{\cosh\left[\pi mr/2\right]} - \frac{i}{m\sinh 2\chi_q} \frac{\sinh\left[\left(\pi + i\chi_q\right)mr\right]}{\sinh\left[\pi mr\right]}.$$
(2)

Relativistic integral equations for the resonance states have to be homogeneous. In this equation Green functions (GF) for the states with complex energy ($\chi_q = \xi_q + iw_q$) have to be used. It is expected that solutions of such equations will exist only for the discreet complex energy values. One is able to solve such integral equations numerically only for the sufficiently fast decreasing analytical potentials. Numerical solution of these homogeneous equations is possible only in the band $w_{\min} \le w_q \le w_{\max}$, which is dependent on the properties of the potential. However, resonant rapidities may be found beyond this band. In order to solve equation in other domain of complex χ_q , we will make use of the well-known in the non-relativistic theory complex scaling method [4]. After transformation of the real variables r, r' to the complex variables $z = r \exp(i\theta)$, $z' = r' \exp(i\theta)$, $0 \le \theta \le \theta_{\max}$ equations (1) are modified to the resonance states equations:

$$\psi_{\theta}^{(j)}(\xi_{q} + iw_{q}, r) = \int_{0}^{\infty} dr' g_{\theta}^{(j)}(\xi_{q} + iw_{q}, r, r') V_{\theta}(r') \psi_{\theta}^{(j)}(\xi_{q} + iw_{q}, r') .$$
(3)

Partial s-wave cross section is defined as $\sigma_{(j)}(\chi_q) = 4\pi f_{(j)}(\chi_q)^2$, where scattering amplitude $f(\chi_q)$ is the coefficient in front of the scattered wave, when asymptotic form of the wave function at $r \to \infty$ is considered. In order to study the influence of the resonances on the scattering amplitude (or cross section) let us define the contribution of the *R*-th resonance to the scattering amplitude by analogy with the non-relativistic case [5] through the residue:

$$\operatorname{Res}[f_{(j)}(\chi_q^R)]/(\chi_q-\chi_q^R).$$

The residue of the scattering amplitude can be found using the Cauchy's theorem. Defining the reduced scattering amplitude and reduced cross section as follows

$$\tilde{f}_{(j)}(\chi_q, \chi_q^R) = f_{(j)}(\chi_q) - \text{Res}[f_{(j)}(\chi_q^R)] / (\chi_q - \chi_q^R), \quad \tilde{\sigma}_{(j)}(\chi_q, \chi_q^R) = 4\pi \left| \tilde{f}_{(j)}(\chi_q, \chi_q^R) \right|^2$$

and then computing and comparing $\sigma_{(j)}$ and $\tilde{\sigma}_{(j)}$, it is possible to identify a feature in the cross section and investigate the influence of the desired resonance.



To illustrate the method presented above we consider equation (3) for the model potential $V(r) = 30r^2 \cosh(\pi - \beta)mr/\cosh \pi mr$, $\beta = \pi/4$. Figure (a) displays cross section (full line) and reduced cross section (dashed line), (b,c) - scattering amplitude (full line), contributions of the first resonance into the scattering amplitude (dash-dotted line) and reduced amplitudes, when the contribution of the first resonance is omitted (dashed line) for this potential. For j = 2 first and second resonances lie very close to the real axis. In figure for $\sigma_{(2)}$ and for $f_{(2)}$ one can see narrow peak and narrow trough at the corresponding rapidity values. For the reduced cross sections and amplitudes these structures completely disappear. Third resonance has lager imaginary part and has influence on the wider area of the cross section. For the all four GF we can clearly see that the closer is the resonance to the real axis the narrower is peak in the corresponding area of the cross section. For wider resonances contribution to the cross section is more delocalized but can still be assigned to this resonance.

- [1] Logunov A.A. Quasi-Optical Approach in Quantum Field Theory / A.A. Logunov, A.N. Tavkhelidze // Nuovo Cimento. 1963. V. 29, № 2. P. 380–399.
- [2] Кадышевский В.Г. Трёхмерная формулировка релятивистской проблемы двух тел / В.Г. Кадышевский, Р.М. Мир-Касимов, Н.Б. Скачков // ЭЧАЯ. – 1972. – Т. 2, № 3. – С. 635–690.
- [3] Kapshai V.N. Relativistic two-particle one-dimensional scattering problem for superposition of δ-potentials / V.N. Kapshai, T.A. Alferova // J. Phys. A: Math. Gen. – 1999. – V. 32. – P. 5329.
- [4] Nuttal J.. Method of Complex Coordinates for Three-Body Calculations above the Breakup Threshold / J. Nuttal, H.L. Cohen // Phys. Rev. – 1969.- V. 188. – P.1542.
- [5] Shilyaeva, K. Role of Resonances in Building Cross Sections: Comparison Between the Mittag–Leffler and the T-matrix Green Function Expansion Approaches / K. Shilyaeva; N. Elander, E. Yarevsky // Int J QuantumChem. – 2007. - V.107. – P.1301.

УДК 539.12.01

Ю. А. Гришечкин¹, В. Н. Капшай²

РЕЛЯТИВИСТСКИЙ СПЕКТР ОРТОПОЗИТРОНИЯ В КВАНТОВОПОЛЕВОЙ МОДЕЛИ С ПОТЕНЦИАЛОМ ОДНОБОЗОННОГО ОБМЕНА

УО «Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины», ул. Советская, 104, 226019 Гомель, Беларусь ¹ ygrishechkin@rambler.ru² kapshai@rambler.ru

В работе численно исследуются спектры двухчастичных систем типа ортопозитрония как решения ковариантных трёхмерных уравнений квантовой теории поля для связанных *s*-состояний [1-2] в случае потенциала Кулона в релятивистском конфигурационном представлении (РКП) [2], потенциала однобозонного обмена [2] и им аналогичных потенциалов [3]. Двухчастичные интегральные уравнения в РКП имеют следующий вид [4]:

$$\psi^{(j)}(w,r) = -\lambda \int_{0}^{\infty} dr' g^{(j)}(w,r,r') V(r') \psi^{(j)}(w,r'), \qquad r \ge 0, \qquad (1)$$

где индекс j = 1, 2, 3, 4 соответствует четырём вариантам квазипотенциального подхода в квантовой теории поля [1-2], $\psi^{(j)}(w, r)$ – волновая функция, $g^{(j)}(w, r, r')$ – функция Грина, V(r) – потенциал, параметр $w \in [0; \pi/2)$ связан с энергией системы 2Eсоотношением $2E = 2m \cos w$ (m – масса каждой частицы) [4], $\lambda > 0$ – константа связи. Функции Грина имеют вид $g^{(j)}(w, r, r') = g^{(j)}(w, r - r')g^{(j)}(w, r + r')$ где [4]

$$g^{(1)}(w,r) = \frac{-1}{m\sin 2w} \frac{\sinh[(\pi/2 - w)mr]}{\sinh[\pi mr/2]}; \quad g^{(3)}(w,r) = \frac{-1}{2m\sin w} \frac{\cosh[(\pi/2 - w)mr]}{\cosh[\pi mr/2]}; \quad (2)$$

$$g^{(2)}(w,r) = \frac{(4m\cos w)^{-1}}{\cosh[\pi mr/2]} - \frac{1}{m\sin 2w} \frac{\sinh[(\pi - w)mr]}{\sinh[\pi mr]}; g^{(4)}(w,r) = \frac{-1}{2m\sin w} \frac{\sinh[(\pi - w)mr]}{\sinh[\pi mr]}$$

Решения уравнений (1) найдены методом составных квадратур Гаусса [5]. При этом для соответствующих алгебраических систем уравнений возникает необходимость решения нелинейной задачи на собственные значения w (энергии 2*E*), для решения которой был использован метод итераций [6].

Потенциал однобозонного обмена [2] и суперпозиция двух таких потенциалов (массы бозонов обмена равны нулю и 2*m*) [3] имеют вид:

$$V(r) = r^{-1} \coth(\pi m r) \ \bowtie \ V(r) = r^{-1} \tanh(\pi m r/2), \tag{3}$$

соответственно. При решении константа связи λ была выбрана равной постоянной тонкой структуры: $\lambda = 7.2973525698 \times 10^{-3}$. В таблице приведены полученные из найденных спектров значения частоты перехода между первым (основным) и вторым уровнями энергии, полученными при решении уравнений (1) с потенциалами (3) и потенциалом Кулона r^{-1} .

Таблица. Частота перехода между основным и вторым состоянием, МГц							
		$r^{-1} \tanh\left(\pi m r/2 ight)$	$r^{-1} \coth(\pi m r)$	r^{-1}			
<i>j</i> = 1	N = 400	1233673256	12336956443	12336886274			
	N = 800	1233673569	12336954153	12336880641			
<i>j</i> = 2	<i>N</i> = 400	1233651095	12336734637	12336664665			
	N = 800	1233651664	12336735112	12336661596			
<i>j</i> = 3	<i>N</i> = 400	1233708292	12337306742	12337236596			
	N = 800	1233701226	12337230675	12337157181			
<i>j</i> = 4	N = 400	1233682565	12337049503	12336979345			
	N = 800	1233679188	12337010316	12336936813			

Сравнение приведенных результатов с экспериментально измеренным значением для ортопозитрония [7] 1233607216.4(3.2) *МГ* μ показывает, что наилучшее совпадение даёт результат, полученный при решении уравнения j = 2 с потенциалом $r^{-1} \tanh(\pi m r/2)$.

- [1] Logunov A.A. Quasi-Optical Approach in Quantum Field Theory / A.A. Logunov, A.N. Tavkhelidze // Nuovo Cimento. 1963. V. 29, № 2. P. 380–399.
- [2] Кадышевский В.Г. Трёхмерная формулировка релятивистской проблемы двух тел / В.Г. Кадышевский, Р.М. Мир-Касимов, Н.Б. Скачков // ЭЧАЯ. – 1972. – Т. 2, № 3. – С. 635–690.
- [3] Дей Е.А. Точные решения класса квазипотенциальных уравнений для суперпозиции квазипотенциалов однобозонного обмена / Е.А. Дей, В.Н. Капшай, Н.Б. Скачков // ТМФ. – 1990. – Т.82, № 2. – С. 188-198.
- [4] Alferova T.A. Expansion in terms of matrix elements of the Lorentz group unitary irreducible representations and integral equations for scattering states relativistic wave functions / T.A. Alferova, V.N. Kapshai // Nonlinear phenomena in complex systems: Proced. of the Sixth Annual Seminar NPCS'97 / Academy of Sciences of Belarus. Inst. of Phys.– Minsk, 1998.– P.78-85.
- [5] Бахвалов Н.С. Численные методы / Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков. 6-е изд. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. – 636с.
- [6] Solov'eva T.M. Iteration method of solving the integral equation with nonlinear dependence on spectral parameter / T.M. Solov'eva, E.P. Zhidkov // Comp. Phys. Comm. - 2000.- V.126. - P. 168-177.
- [7] Fee M.S. Measurement of the Positronium $1^{3}S_{1} 2^{3}S_{1}$ Interval by Continuous-Wave Two-Photon Excitation / M.S. Fee, A.P. Mills, Jr.S. Chu, E.D. Shaw, K. Danzmann, R.J. Chichester, D.M. Zuckerman // Phys. Rev. Lett. – 1993. – V. 70, No 10. – P. 1397-1400.

УДК 539.12.01

V. N. Kapshai, S. I. Fialka

NUMERICAL SOLUTION OF RELATIVISTIC EQUATIONS FOR BOUND *p*-STATES OF TWO-PARTICLE SYSTEMS

Francisk Skorina Gomel State University, Sovietskaja str., 104, 246019 Gomel, Belarus <u>kapshai@rambler.ru_fialka.sergey@gmail.com</u>

In this paper numerical solutions are found for quantum field theory integral equations, describing the bound *p*-states of a system of two relativistic spinless particles of mass m each. Considered covariant equations are three-dimensional and have the form [1]

$$G_{0,j}^{-1}(E,E_p)\psi_j(\vec{p}) = \int \frac{-\lambda m \exp(-am\chi_{\Delta})}{4\pi\sqrt{(E_p E_k - \vec{p}\,\vec{k})^2 - m^4}}\,\psi_j(\vec{k})\,m\frac{dk}{E_k},\tag{1}$$

where $\chi_{\Delta} = \operatorname{Arch}(m^{-2}(E_p E_k - \vec{p} \cdot \vec{k}))$ is the rapidity, corresponding to the momentum transfer $\vec{\Delta}$, $\psi_j(\vec{p})$ are the relative motion wave functions, $E_p = \sqrt{\vec{p}^2 + m^2}$ and $E_k = \sqrt{\vec{k}^2 + m^2}$ are the initial and final energies of the particles respectively, $2E \in [0; 2m]$ is the two-particle system's energy, $G_{0,j}^{-1}$ are the inverse Green functions of the Logunov-Tavkhelidze (j = 1) and Kadyshevsky (j = 2) equations and of their modified versions (j = 3, j = 4):

$$G_{0,1}^{-1}(E, E_p) = E^2 - E_p^2; \qquad G_{0,2}^{-1}(E, E_p) = E_p(E - E_p); G_{0,3}^{-1}(E, E_p) = m(E^2 - E_p^2) / E_p; \qquad G_{0,4}^{-1}(E, E_p) = m(E - E_p).$$
(2)

Representing the wave functions in the form $\psi_j(\vec{p}) = \psi_{j,l}(p)Y_l^{\mu}(\theta_p,\varphi_p)$, introducing the parameterizations $E = m\cos w$, $p = m \operatorname{sh}\chi_p$, $k = m\operatorname{sh}\chi_k(\chi_p, \chi_k$ are the rapidities) and denoting $F_{j,l}(\chi_p) = G_{0,j}^{-1}(E, E_p) p \psi_{j,l}(p)$, one can obtain partial integral equations

$$F_{j,l}(\chi_p) = -\lambda m^2 \int_0^\infty I_l(\chi_p, \chi_k) G_{0,j}(E, m \operatorname{ch} \chi_k) F_{j,l}(\chi_k) d\chi_k.$$
(3)

For the case l=1 (*p*-states), using the denotations $P(\chi_p) = (1-a^2m^2)^{-1}e^{-am\chi_p}(\operatorname{cth}\chi_p + am)$, $Q(\chi_p) = (am)^{-1}\operatorname{sh}(am\chi_p)\operatorname{cth}\chi_p - \operatorname{ch}(am\chi_p)$, the quantity $I_1(\chi_p,\chi_k)$ can be written in the form

$$I_1(\chi_p, \chi_k) = \begin{cases} P(\chi_k)Q(\chi_p), & \chi_k \ge \chi_p; \\ P(\chi_p)Q(\chi_k), & \chi_k \le \chi_p. \end{cases}$$
(4)

Exact analytical solutions of equations (3), can be obtained for j = 1, 2 in the zero mass case of the bound state ($w = \pi/2$), this yields the quantization condition for the coupling constant λ in the form

$$\lambda = (a m + 2n + 2)(a m + 2n + 3).$$
(5)

For other values of parameter w solutions were obtained numerically (taking m = 1). Equation (3) was reduced to a matrix eigenvalue problem after applying the composite trapezium quadrature formula. Accuracy of the solution was enhanced using the Richardson extrapolation [2]. The obtained numerical values of the coupling constant λ have up to six correct significant digits and are in a very good agreement with exact solution (5). Figure 1 illustrates

the dependence of the coupling constant λ on parameter $w \in [0; \pi/2]$ with a = 1, 2, 3 for the ground state (n = 0).



Fig. 1. The coupling constant λ spectrum for j = 1, 2 (a) and j = 3, 4 (b)

- [1] Капшай В. Н. Об одном классе точных решений квазипотенциальных уравнений. / В. Н. Капшай, С. П. Кулешов, Н.Б. Скачков // ТМФ 1983. 55. 3. С. 349-360.
- [2] William H. P. Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing, Third Edition. / H. P. William, T. V. William, A. T. Saul, P. F. Brian // Cambridge University Press. 2007. 1256 p.

УДК 539.12

О. В. Веко¹, Е. М. Овсиюк¹, В. В. Кисель², В. М. Редьков³

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА ЧАСТИЦЫ СО СПИНОМ 1 В НЕРЕЛЯТИВИСТСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ НА ФОНЕ ПРОСТРАНСТВА ЛОБАЧЕВСКОГО

¹ Мозырский государственный педагогический университет им. И. П Шамякина, ул. Студенческая, 28, 247760 Мозырь, Беларусь <u>vekoolga@mail.ru, e.ovsiyuk@mail.ru</u>

² Белорусский государственный педагогический университет им. М. Танка ³ Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси <u>redkov@dragon.bas-net.by</u>

Известно, что спин очень существенно влияет на поведение квантовомеханической частицы в поле дираковского монополя [1]. В частности, для частицы со спином 1/2 обнаруживается существование особого класса решений, которые можно сопоставлять связанным состояниям в системе «частица в потенциале монополя» (см., например, [2]). В [2] было показано, что такие простые и выделенные состояния возможны и для частицы со спином 1 в поле монополя. Однако до настоящего времени других точных решений в этой системе найти не удалось. В настоящей работе мы обращаемся к исследованию нерелятивистского приближения в системе «векторная частица в поле монополя» на фоне пространства с геометрией Лобачевского.

Применяя развитую в [2–4] методику, можно получить систему радиальных уравнений, описывающих частицу со спином 1 в поле магнитного монополя Дирака. Система радиальных уравнений в приближении Паули имеет следующий явный вид:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + 2EM - \frac{4c^2}{\mathrm{sh}^2 r}\right) F_1 = \frac{1 + \mathrm{ch} r}{\mathrm{sh}^2 r} \left(\sqrt{2}c \ F_2 \right),$$

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + 2EM - \frac{2(c^2 + d^2)}{\mathrm{sh}^2 r}\right) F_2 = \frac{(1 + \mathrm{ch} r)}{\mathrm{sh}^2 r} \left(\sqrt{2}c \ F_1 + F_2 + \sqrt{2}d \ F_3\right),$$

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + 2EM - \frac{4d^2}{\mathrm{sh}^2 r}\right) F_3 = \frac{1 + \mathrm{ch} r}{\mathrm{sh}^2 r} \left(\sqrt{2}d \ F_2 \right),$$

$$(1)$$

$$c = \frac{1}{2}\sqrt{(j+k)(j-k+1)}, \quad d = \frac{1}{2}\sqrt{(j-k)(j+k+1)}, \quad k = eg/\hbar c.$$
(2)

Система (1) оказывается достаточно сложной. Использованный в аналогичной ситуации в случае плоского пространства метод диагонализации смешивающей матрицы здесь не применим. Поэтому упростим задачу и рассмотрим дальше ситуацию минимального значения квантового числа j. Для нее вместо системы (1) можно получить единственное и достаточно простое дифференциальное радиальное уравнение Шредингера. Мы учтем в нем сразу же дополнительно присутствие кулоновского поля, а затем – осцилляторного, обобщенных на случай пространства Лобачевского.

Рассмотрим уравнение, описывающее состояния векторной частицы с минимальным значением квантового числа *j* в присутствии монополя, добавив кулоновский потенциал (здесь можно решить более общую релятивистскую задачу):

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \left(\varepsilon + \frac{\alpha}{\operatorname{th} r}\right)^2 - M^2\right)F_2 = 0.$$
(3)

Это уравнение может быть решено в гипергеометрических функциях. Возникающий спектр энергии имеет вид:

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \alpha^2/\nu^2}} \sqrt{1 - \frac{\hbar^2}{m^2 c^2 R^2}} (\alpha^2 + \nu^2)$$
(4)

и в пределе плоского пространства совпадает с известным результатом.

Теперь на фоне присутствия монополя в состояниях минимального значения *j* учтем внешний осцилляторный потенциал. Если обратиться к релятивистской частице, то возникающее уравнение не решается в гипергеометрических функциях. Поэтому рассматриваем здесь только нерелятивистскую задачу – она описывается уравнением:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + 2M(E - \frac{K \, \text{th}^2 r}{2})\right) F_2 = 0.$$
(5)

Это уравнение может быть решено в гипергеометрических функциях. Возникает следующий спектр энергии:

$$\varepsilon = \hbar \left(N \sqrt{\frac{k}{m} + \frac{\hbar^2}{4m^2 R^4}} - \frac{\hbar}{2mR^2} (N^2 + \frac{1}{4}) \right), \qquad N = 2n + \frac{3}{2}; \tag{6}$$

в пределе плоского пространства ($R \rightarrow \infty$) совпадает с известным результатом.

Можно легко найти явный вид неравенства, обеспечивающего стремление к нулю решений на бесконечности:

$$2n + \frac{3}{2} < \frac{1}{2}\sqrt{1 + \frac{4km}{\hbar^2}R^4} .$$
 (7)

Неравенство означает, что число дискретных уровней в пространстве Лобачевского обязательно конечно, и верхняя граница задается, в частности, радиусом кривизны. Это свойство имеет место и в кулоновской задаче, являясь характерным признаком проявления геометрии пространства Лобачевского в квантовомеханических системах.

- [1] Стражев В. И. Электродинамика с магнитным зарядом / В. И. Стражев, Л. М. Томильчик. Минск: Наука и техника, 1975.
- [2] Редьков В. М. Тетрадный формализм, сферическая симметрия и базис Шредингера / В. М. Редьков. Минск: Белорусская наука, 2009.
- [3] Нерелятивистский предел в общековариантной теории векторной частицы / А. А. Богуш, В. В. Кисель, Н. Г. Токаревская, В. М. Редьков // Весці НАНБ. Сер. фіз.-мат. навук. – 2002. – № 2. – С. 61–66.
- [4] Квантовая механика в однородном магнитом поле: новые задачи / Е. М. Овсиюк, В. В. Кисель, Г. Г. Крылов, В. М. Редьков. – Мозырь: МГПУ им. И. П. Шамякина, 2011.

УДК 530.1; 539.12

В.В.Андреев¹, К.С.Бабич¹, Е.С.Чеботарева²

КРИТИЧЕСКОЕ ЗНАЧЕНИЕ КУЛОНОВСКОГО ПАРАМЕТРА В РЕЛЯТИВИСТСКОЙ СВЯЗАННОЙ СИСТЕМЕ

¹Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины, ул. Советская, 104, 246019 Гомель, Беларусь

<u>vik.andreev@gsu.by</u>

² ГОУ ВПО Брянский государственный университет им. акад. И.Г. Петровского, филиал в г. Новозыбкове, РФ

В квантовых системах с кулоновским потенциалом $V(r) = -\alpha/r$, $(\alpha > 0)$ имеется критическое значение параметра α , при котором не существует дискретного энергетического спектра. В работе [1] (см. также ссылки в [2]) было показано, что и релятивистское обобщение уравнения Шредингера – бесспиновое уравнение Солпитера

$$H\Phi_{n} = \left[\sqrt{\vec{k}^{2} + m_{1}^{2}} + \sqrt{\vec{k}^{2} + m_{2}^{2}} + V(r)\right]\Phi_{n} = E_{n}\Phi_{n}, \qquad (1)$$

будет также иметь критическое значение. В данной работе предложена методика оценки критических значений на основе решения уравнения (1) вариационным и численным методом.

В вариационном подходе решение уравнения (1) сводится к задаче на собственные значения (C3) с использованием разложения исходной волновой функции (ВФ) Φ по некоторому полному набору состояний пробных ВФ Ψ_k :

$$\sum_{k=0}^{n-1} a_k \left\langle \Psi_k \mid \hat{H} \mid \Psi_{k'} \right\rangle \equiv \sum_k a_k \left\langle H \right\rangle_{k,k'} = \hat{E}_n a_{k'}$$
(2)

Элементы матрицы $\langle H \rangle_{n,n'}$, после вычисления угловой части с помощью пробных ВФ представляют интегралы вида

$$\langle H \rangle_{nn'} = \int_{0}^{\infty} \tilde{\psi}_{n\ell}^{*}(k) [\sqrt{k^{2} + m_{1}^{2}} + \sqrt{k^{2} + m_{2}^{2}}] \tilde{\psi}_{n\ell}(k) k^{2} dk +$$

$$+ \int_{0}^{\infty} \psi_{n\ell}^{*}(r) V(r) \psi_{n\ell}(r) r^{2} dr, \qquad r = |\vec{r}|, k = |\vec{k}|.$$

$$(3)$$

Здесь $\widetilde{\psi}_{nl}(k)$ – фурье-образ ВФ $\psi_{nl}(r)$.

Решение уравнения (1) также можно проводить численным методом. Применяя разработанную нами методику численных расчетов, можно, используя квадратурные формулы для полуспектрального метода Чебышева [3], свести интегральное уравнение (1) к задаче на СЗ: $H_{ii}\tilde{\psi}_i(k) = \varepsilon \tilde{\psi}_i(k)$. Матрица в левой части при этом имеет вид

$$H_{ji} = \sum_{i=1}^{N} \left(W_{ji} + \left[\sqrt{k_j^2 + m_1^2} + \sqrt{k_j^2 + m_2^2} \right] \delta_{ji} \right), \tag{4}$$

где W_{ii} — матрица, связанная с потенциальной частью в (1).

Используя вариационный либо численный метод для уравнения (1) с кулоновским потенциалом приходим к задаче на C3

$$Det \|H(\alpha,\beta) - I \times E\| = 0, \qquad (5)$$

Производя переход к безразмерным переменным посредством соотношений: $\langle H \rangle \rightarrow \beta \langle \widetilde{H} \rangle$ и $E \rightarrow \beta \widetilde{E}$ задача (5) переходит в решение уравнения

$$Det \left\| \left\langle \widetilde{H}(\alpha, m/\beta) \right\rangle - I \times \widetilde{E} \right\| = 0, \qquad (6)$$

поскольку $\beta \neq 0$.

Критическому значению кулоновского параметра $\alpha = \alpha_{crit.}$ соответствует предельный переход при $\beta \to \infty$ [2]. Выполняя предельный переход $\beta \to \infty$ в (6) приходим к уравнению

$$Det\left\|\left\langle \widetilde{H}(\alpha_{crit.},0)\right\rangle\right\| = Det\left\|\left\langle \widetilde{T}((m/\beta)=0) + \widetilde{V}(\alpha_{crit.})\right\rangle\right\| = 0,$$
(7)

где

$$\left\langle \widetilde{H} \right\rangle_{n,n'} = 2 \int_{0}^{\infty} \widetilde{\psi}_{n\ell}^{C} \left(\widetilde{k} \right) \widetilde{\psi}_{n'\ell}^{C} \left(\widetilde{k} \right) \widetilde{k}^{3} d\widetilde{k} - \alpha_{crit} \int_{0}^{\infty} \psi_{nl}^{C} \left(\widetilde{r} \right) \psi_{n'\ell}^{C} \left(\widetilde{r} \right) \widetilde{r} d\widetilde{r}$$

$$\tag{8}$$

с безразмерными волновыми функциями

$$\psi_{n\ell}^{C}(\tilde{r}) = \sqrt{\frac{8n!}{(n+2\ell+2)!}} (2\tilde{r})^{\ell} e^{-\tilde{r}} L_{n}^{2\ell+2}(2\tilde{r}) .$$

В итоге, уравнение (7) с матричными элементами (8) определяет набор n критических значений α_{crit} для n уровней энергии E.

Для простейшего случая $n = \ell = 0$, n' = 0 верхняя граница α_{crit} может быть легко рассчитана аналитически. Полученное значение $\alpha_{crit} = 16/(3\pi)$ совпадает с результатом работы [2], что косвенно подтверждает правильность методики.

Численное решение системы (7) для n = n' = 30 приводят к тому, что оценка для критического значения при этом равна

$$\alpha_{crit} \leq 1,09$$
,

что согласуется с оценкой $\alpha_{crit} \leq 1$, полученной в работе [4].

- [1] Herbst, I. Spectral Theory of the operator / I.Herbst // Commun.Math.Phys. 1977. Vol. 53. P. 285-294.
- [2] Lucha, W. Relativistic Coulomb problem: Energy levels at the critical coupling constant analytically / W.Lucha, F.F.Schoberl // Phys.Lett. 1996. Vol. B387. P. 573-576.
- [3] Андреев, В. В. Решение интегральных уравнений для квантовых двухчастичных систем с корнельским потенциалом в импульсном пространстве/ В. В. Андреев, К. С.Бабич// Весці НАН Б. Сер.фіз.-мат. навук. 2011.-№ 3, С.54-59.
- [4] Martin, A. Semirelativistic stability and critical mass of a system of spinless bosons in gravitational interaction/A.Martin, S.M.Roy //Phys.Lett.- 1989. Vol. B233.-P.407-412.

УДК 530.145

В. В. Кудряшов, А. В. Баран

РЕШЕНИЕ РАДИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛА МОРСА В МОДИФИЦИРОВАННОМ ВАРИАЦИОННО-КВАЗИКЛАССИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь kudryash@dragon.bas-net.by, a.baran@dragon.bas-net.by

Рассматривается радиальное уравнение Шредингера, приведенное в безразмерных величинах x = r/R, $e = (2mR^2/\hbar^2)E$ к виду $H\psi(x) = e\psi(x)$ с гамильтонианом $H = -d^2/dx^2 + V(x) + l(l+1)/x^2$ для хорошо известного [1] потенциала Морса $V(x) = \gamma^2 \exp(-x) - 1^2$, который может быть использован для адекватного моделирования сферической квантовой точки. Этот потенциал быстро стремится к константе и приводит к конечному числу связанных состояний. Уравнение Шредингера для потенциала Морса не имеет точного решения при $l \neq 0$, что делает необходимым применение приближенных методов. В данной работе используется объединение модифицированного квазиклассического метода [2] и усовершенствованного вариационного подхода [3]. Возможность такого объединения возникает, если решение уравнения Шредингера ищется с помощью варьируемой подстановки.

Применяется степенная подстановка $q(x) = x^{1/s}$, $\psi(x) = x^{(s-1)/2s}\Psi(q,s)$. Функция $\Psi(q,s)$ выражается через логарифмическую производную Y(q,s) следующим образом $\Psi(q,s) = \exp \int Y(q,s) dq$. ВКБ-ряды являются асимптотическими разложениями логарифмических производных. Обычное ВКБ-приближение содержит конечное число членов из полного разложения. Это приближение не пригодно в точках поворота. В [2] полные ВКБ-ряды аппроксимируются конечным числом парциальных ВКБ-рядов. Явное суммирование двух лидирующих парциальных рядов дает новую аналитическую приближенную логарифмическую производную $Y_a(q,s)$, которая выражается через функции Эйри. С помощью $Y_a(q,s)$ строится непрерывная приближенная радиальная волновая функция $\psi_a(x,s)$.

Далее параметр *s* рассматривается как варьируемый, а функция $\Psi_a(x,s)$ выступает в роли пробной функции в вариационном подходе. В соответствии с [4] $d(s) = \langle \psi_a(s) | H^2 | \psi_a(s) \rangle / \langle \psi_a(s) | H | \psi_a(s) \rangle^2 - 1$ интегральную невязку ввелем лля нормированной функции. Величина d(s) характеризует качество пробной приближения и равна нулю для точных решений. Определим оптимальное значение *s* вариационного параметра из условия минимальности интегральной невязки. Заметим, что ищется абсолютный минимум функции d(s). Как результат применения приближенные предложенного метола представим значения энергии $e_a(s) = \langle \psi_a(s) | H | \psi_a(s) \rangle$, которые вычисляются в соответствии с вариационным подходом.

В таблице показаны величины $d = d(s_o)$ и $e_a = e_a(s_o)$ для $\gamma = 5$, когда реализуется десять связанных состояний. В случае нулевого углового момента (l = 0) можно сравнить полученные значения e_a с точными значениями энергии, которые для $\gamma = 5$

равны 10,1916; 18,4428; 23,0109; 24,8772, что демонстрирует достаточно высокую точность предложенного приближения.

Модифицированный квазиклассический метод при использовании достаточно широкого класса степенных подстановок дает удовлетворительное качественное описание радиальных волновых функций для потенциала Морса. Существенное улучшение количественных характеристик приближения достигается с помощью оптимального выбора подстановки.

l	п	S _o	d	e_a
0	0	1	8,537.10-4	10,1930
	1	1	1,426.10-5	18.4429
	2	1	$2,070 \cdot 10^{-6}$	23,0109
	3	1	5,305.10-7	24,8773
1	0	1,838	8,228 · 10 ⁻³	15,3541
	1	2,686	3,942 · 10 ⁻⁵	21,3990
	2	4,043	5,436.10-6	24,4034
2	0	2,302	$2,907 \cdot 10^{-3}$	19,4795
	1	2,327	1,133.10-5	23,6531
3	0	3,379	1,039.10-3	22,6892

Таблица. Числовые характеристики предложенного приближения в случае $\gamma = 5$.

[1] Флюгге З. Задачи по квантовой механике. Т. 1. М., 1974.

- [2] Kudryashov V. V., Vanne Yu. V. // J. Appl. Math. 2002. Vol. 2. P. 265-275.
- [3] Kudryashov V. V., Reshetnyak V. I. // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. 2008. Vol. 11. P. 385-389.

УДК 539.12

Е. А. Ушаков

ДВИЖЕНИЕ ВЕКТОРА, АССОЦИИРОВАННОЕ С ГЛОБАЛЬНЫМ ЦИКЛОМ

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

<u>ushakovea@bsu.by</u>

Традиционно движение вектора, ассоциированное с циклом, возникает при параллельном переносе этого вектора по бесконечно малой петле. Предлагается метод экстраполяции обычных инфинитезимальных соотношений на конечные и бесконечно большие петли, что дает возможность интерпретировать физических эффекты как движения, ассоциированных с циклом [1].

На основании леммы о возможности комбинаторного разбиения гомотопной нулю петли на бесконечно малые лассо для замкнутого контура (при выполнении для пропа-

гатора по инфинитезимальному контуру соотношения $\Pi_{u} = \exp\left(-\frac{1}{2} \left(R^{i}_{jkl}\right)_{*} x^{kl}_{*}\right)$, где

 x_*^{kl} – некоторая точка на кривой u) имеет место решение в виде мультипликативного интеграла по бесконечно малым площадкам

$$a^{i} = P \exp\left(-\frac{1}{2} \iint_{\text{6.M.}} R^{i}_{jkl} \mathrm{d}x^{k} \, \mathrm{A}\mathrm{d}x^{l}\right) a_{0}^{j}. \tag{1}$$

Мультипликативный интеграл (1) затруднительно применять к решению задач в силу принципиальной сложности вычислений.

С целью конструктивного упрощения предлагается формула для движения вектора, ассоциированного с циклом, в которой мультипликативный интеграл моделируется обычными аддитивными интегралами:

$$a^{i} = \overline{P} \exp\left(-\frac{1}{2} \iint_{D} R^{i}_{jkl} dx^{k} \Lambda dx^{l}\right) a^{j}_{0} = a^{i}_{0} - \frac{1}{2} \iint_{D} R^{i}_{jkl} dx^{k} \Lambda dx^{l} a^{j}_{0} + \frac{1}{8} \iint_{D} R^{i}_{jkl} dx^{k} \Lambda dx^{l} a^{j}_{0} \iint_{D} R^{p}_{jmn} dx^{m} \Lambda dx^{n} a^{j}_{0} - \dots$$

$$(2)$$

где \overline{P} означает упорядочение по площадкам интегрирования [2]. Приложения метода даны в работе [3].

[1] Левашев, А.Е. Движение и двойственность в релятивисткой электродинамике / А.Е. Левашев. – Минск: БГУ, 1979. – 320 с.

[2] Ушаков Е.А. Метод движений, ассоциированных с циклом, как теория возмущений / Е.А.Ушаков // Тезисы докладов 8-ой Российской гравитационной конференции «Теоретические и экспериментальные проблемы гравитации». – Москва, 1993. – С. 85.

[3] Ушаков Е.А. Движения, ассоциированные с циклом, в физических задачах / Е.А. Ушаков // Сб, научных трудов 2-ого конгресса физиков Беларуси, 3–5 ноября 2008. – Минск, 2008. – С. 23.

УДК 53.01, 539.182, 53.023

А.М.Ильянок

ФЕМТОТЕХНОЛОГИИ. ІЕРВЫЙ ШАГ – АТОМ ВОДОРОДА...

ЗАО КЦ «Нанобиология», ул. Кирова, 1-50, 220006 Минск, Беларусь <u>amilyanok@gmail.com</u>

В работе рассмотрена фемтообласть атома водорода. Показано, что электрон в атоме водорода имеет сложную пространственную структуру в виде равномерно заряженной замкнутой спиральной линии, образующей полый тор с большим радиусом r_B и орбитальной скоростью вращения в нижнем энергетическом состоянии $\alpha^4 c$. Количество витков этой линии равно $N_{\alpha} = 861$, т.е., естественным путем вводится целочисленная безразмерная константа. Она однозначно связана с постоянной тонкой структуры $\alpha^{-1} = \sqrt{(N_{\alpha}/2\pi)^2 + 1} = 137.0360547255...$ [1]. Из этого представления однозначно вытекает объяснение аномального магнитного момента электрона $\mu_e = \mu_B \left[1 + N_{\alpha}^{-1} \right]$, связанного с сегментацией полей внутри электрона и его внутренней структурой, а не с абстрактным физическим вакуумом КЭД.

Показано, что в современных измерениях μ_e и α возникает методическая ошибка, связанная с постановкой экспериментов на свободных электронах, а не в атомах.

В 1983 г. СОДАТА приняла решение об обрезании значения скорости света и присвоения ей статуса абсолютно точного значения c=299792458 м/с, обрезав детерминированную добавку ± 1.2 м/с. В результате эксперименты в этой области были прекращены, что привело к катастрофическому застою науки в целом. Мы показали, что эта добавка связана с фундаментальной квантовой скоростью движения электрона в атоме на нижнем энергетическом уровне и равна $\alpha^4 c / \sqrt{2}$. Такой подход позволяет увеличить точность измерения *c* на 8 порядков c=299792458.00112875...м/с.

Таким образом, учет пространственной структуры атома водорода позволяет увеличить точность мировых констант, таких, как α , *c*, r_B и соотношение \hbar/m_e , по крайней мере, на 8 порядков по сравнению с данными, принятыми CODATA.

Показано, что на основе этих констант можно построить фундаментальные шкалы, масштабирующие как внутренние так и внешние поля атомов, по фундаментальным скоростям $c\alpha^n$, или по фундаментальным интервалам $r_B\alpha^n$, где n=0, $\pm 1,\pm 2...,$ и т.д. Эти шкалы пригодны для измерения, как параметров атома, так и параметров галактик, Метагалактики и Мультивселенной.

Еще в 1998 г. нами была предложена модель Метагалактики в виде полой сферы с оболочкой из твердого водорода при температуре около 3К. и радиусом $R_M = c / H_0 = r_B \alpha^{-17} = 1.1214 \times 10^{26}$ м или 11,8535·10⁹ св. лет (H_0 -пост. Хаббла) [2]. Такой размер Метагалактики был подтвержден экспериментами со спутника WMAP в 2003г по реликтовому излучению. Расчеты J.Weeks показали, что Вселенная конечна, сферична, с радиусом около 11 млрд. световых лет [3].

Мы установили, что угловая скорость вращения экватора Метагалактики $\Omega_M = \alpha c / R_M \sqrt{8\pi} = 1.2285 \cdot 10^{-13}$ рад/год, эксперимент дает ~ 10^{-13} рад/год [4].

Отсюда находится и скорость вращения стенки Метагалактики на экваторе $\alpha c / \sqrt{8\pi} = 436.381$ км/с. Она совпадает с первой космической скоростью на

поверхности Солнца и близка к скорости движения солнечной системы относительно реликтового излучения. При превышении этой скорости в $\sqrt{2}$ раз гравитационное ньютоновское взаимодействие прекращается. Начинают преобладать силы отталкивания, определяемые «темной» энергией. Действие этой силы мы описываем $a_p = cH_0 = \alpha^{17}c^2r_B^{-1} = 8.026\cdot 10^{-10}$ м/с². Экспериментально она подтверждается аномальным ускорением «Пионера», (8.74±1.33)·10⁻¹⁰ м/с² [5].

Было показано, что красное смещения спектров дальних галактик связано не с расширением пространства-времени, а как результат взаимодействия фотонов с гравитационным полем, заполняющим Метагалактику, т.е., с «темной энергией». При этом скорость движения галактик относительно этого поля не может превышать 436.381 км/с. Т.е., Метагалактика стационарна, а квантовые масштабы неизменны.

Было показано [6], что скорости движения объекта v_l и скорость распространения его гравитационного поля v_a связаны с гравитационным инвариантом $v_l v_a = c^2$. В $v_{I} = \alpha^{4} c$. Тогда скорость вращения электрона атоме водорода скорость гравитационного взаимодействия равна $v_i = \alpha^{-4}c = 3.53 \cdot 10^8 c$. Эти выводы полностью совпадают с экспериментальными результатами Лапласа по скоростям гравитационного взаимодействия между Солнцем и Землей более 10⁸ с [7]. Прямым доказательством существования гравитационных волн Лапласа является существование аналога дифракционных колец Ньютона на поверхности стенки Метагалактики [8]. Отметим, что доказательств, подтверждающих существование гравитационных волн Эйнштейна, распространяющихся со скоростью с, так до сих пор и не найдено.

Таким образом, показано, что наша модель атома водорода устраняет ряд теоретических противоречий и прекрасно подтверждается последними астрофизическими экспериментами, а также открывает нам принципиальную возможность поднять точность измерений до $\alpha^{-17} = 2.12 \cdot 10^{36}$. При таких точностях мы сможем измерять гравитационные взаимодействия между отдельными атомами! Это открывает путь к построению единой теории электромагнитных и гравитационных полей.

[1] Ильянок А.М. ЕА патент №003164. Квантоворазмерные электронные устройства.

[2] Ильянок A.M. Quantum Astronomy. Part II. arXiv:astro-ph/0001059

[3] Jean-Pierre L., Weeks J. at.al. Dodecahedral space topology// Nature-2003.-V.425.-P.593.

[4] Birch R. Is the Universe rotating? // Nature. — 1982. — V. 298. — P. 451.

[5] Anderson J. D., at.al. Study of the anomalous acceleration of Pioneer 10 and 11 // Phys. Rev. D. -2002. -V. 65. -N 8. -P. 082004.

[6] Ильянок А.М. Манифест. Галактический интернет

http://metagalactic.net/galanet/galanet_rus.pdf

[7] Laplace, P., Mechanique Celeste, volumes published from 1799-1825, English translation reprinted by Chelsea Publ., New York.-1966.

[8] Gurzadyan V.G., Penrose R. Concentric circles in WMAP data may provide evidence of violent pre-Big-Bang activity ArXiv: 1011.3706

УДК 539.12

Ю. А. Курочкин¹, Д. В. Шёлковый¹, И. П. Боярина²

О ЧАСТНОМ СЛУЧАЕ РАЗДЕЛЕНИЯ ПЕРЕМЕННЫХ ЦЕНТРА МАСС И ОТНОСИТЕЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ В ЗАДАЧЕ ДВУХ ТЕЛ НА СФЕРЕ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

y.kurochkin@ifanbel.bas-net.by

² Белорусский государственный аграрный технический университет, пр. Независимости, 99, 220023 Минск, Беларусь

Уравнение трехмерной сферы S_3 на которой реализуется риманово пространство постоянной положительной кривизны $1/R^2$, где R-радиус сферы с помощью бикватернионов запишется как

$$X \,\overline{X} = R^2,$$

где $\overline{X} = jX_0 - \underline{X}$, $j^2 = 1$ – бикватернион, кватернионно сопряженный бикватерниону *X*. Для для удобства в дальнейшем будем полагать *R* = 1.

Действие для задачи двух материальных точек на сфере S_3 , взаимодействующих с силами, зависящими только от относительной переменной запишем в виде

$$W = \int \left[\frac{1}{2} \left(m_1 \dot{X}^{(1)} \dot{\overline{X}}^{(1)} + m_2 \dot{X}^{(2)} \dot{\overline{X}}^{(2)} \right) - V(Y_{12}) \right] dt,$$
(1)

выражение (1) записано в терминах четырехмерных бикватернионных переменных с учетом дополнительных условий $X^{(1)}\overline{X}^{(1)} = 1$, $X^{(2)}\overline{X}^{(2)} = 1$.

В работе [1] действие (1) преобразовано с помощью четырехмерных Y_1, Y_2 координат точек относительно центра масс $X^{(1)} = Y_1 X_c, \overline{X}^{(1)} = \overline{X}_c \overline{Y}_1, X^{(2)} = Y_2 X_c, \overline{X}^{(2)} = \overline{X}_c \overline{Y}_2, \quad для \qquad X^{(1)}, \qquad X^{(2)}$ и с учётом условий $X_C \overline{X}_C = 1, \ Y_{12} \overline{Y}_{12} = 1, \ Y_1 \overline{Y}_1 = 1, \ Y_2 \overline{Y}_2 = 1$ имеет вид

$$W = \int \left[m_1 \left(\dot{Y}_1 \dot{\overline{Y}}_1 + \dot{X}_c \dot{\overline{X}}_c \right) + m_2 \left(\dot{Y}_2 \dot{\overline{Y}}_2 + \dot{X}_c \dot{\overline{X}}_c \right) + m_1 \left(Y_1 \dot{X}_c \overline{\overline{X}}_c \dot{\overline{Y}}_1 + \dot{Y}_1 X_c \dot{\overline{X}}_c \overline{\overline{Y}}_1 \right) + m_2 \left(Y_2 \dot{X}_c \overline{\overline{X}}_c \dot{\overline{Y}}_2 + \dot{Y}_2 X_c \dot{\overline{X}}_c \overline{\overline{Y}}_2 \right) + V(Y_{12}) \right] dt,$$
(2)

В первых двух членах выражения кинетической части (2) переменные центра масс и относительного движения разделены. В двух следующих членах содержатся переменные как относительного движения так центра масс. В силу некоммутативности бикватернионов разделение переменных в этих членах в общем случае невозможно. Таким образом, природа неразделемости переменных центра масс и относительного движения в алгебраическом смысле объясняется некоммутативностью бикватернионов. Тем не менее, выражение (2) удобно для поиска частных случаев, в которых такое разделение происходит.

Бикватернионным аналогом относительной переменной для двух данных частиц является оператор

$$Y_{12} = X^{(2)} \overline{X}^{(1)}, \tag{3}$$

определенный из

 $X^{(2)}=Y_{12}\ X^{(1)},$ Очевидно так же, что $\ Y_{12}=Y_2\ \overline{Y}_1,\ \overline{Y}_{12}=X^{(1)}\overline{X}^{(2)}.$

Для двух частиц масс *m*₁ и *m*₂ соответственно координаты их центра масс в четырехмерной (бикватернионной) форме определим как

$$X_{c} = \frac{m_{1}X^{(1)} + m_{2}X^{(2)}}{\sqrt{\left(m_{1}X^{(1)} + m_{2}X^{(2)}\right)\left(m_{1}\bar{X}^{(1)} + m_{2}\bar{X}^{(2)}\right)}}.$$
(4)

Выразим подынтегральную функцию (2) через оператор $Y_{12} = X^{(2)} \overline{X}^{(1)}$, где мы учли, что $Y_1 = X^{(1)} \overline{X}_c$, $Y_2 = X^{(2)} \overline{X}_c$, $\overline{Y}_{12} = X^{(1)} \overline{X}^{(2)}$ получим

$$L = \frac{m_{1}m_{2}\dot{Y}_{12}\dot{\bar{Y}}_{12}(m_{1}+m_{2})}{m_{1}^{2}+m_{2}^{2}+2m_{1}m_{2}Y_{12(0)}} - \frac{m_{1}^{2}m_{2}^{2}\dot{Y}_{12(0)}^{2}(m_{1}+m_{2})}{\left(m_{1}^{2}+m_{2}^{2}+2m_{1}m_{2}Y_{12(0)}\right)^{2}} + \left(m_{1}+m_{2}\right)\dot{X}_{C}\dot{\bar{X}}_{C} + \frac{m_{1}m_{2}}{m_{1}^{2}+m_{2}^{2}+2m_{1}m_{2}Y_{12(0)}} \left[m_{1}\left(Y_{12}\dot{X}_{C}\bar{X}_{C}\dot{\bar{Y}}_{12}+\dot{Y}_{12}X_{C}\dot{\bar{X}}_{C}\bar{Y}_{12}\right) + m_{2}\left(\bar{Y}_{12}\dot{X}_{C}\bar{X}_{C}\dot{Y}_{12}+\dot{\bar{Y}}_{12}X_{C}\dot{\bar{X}}_{C}Y_{12}\right)\right] + (5)$$

$$\frac{m_{1}m_{2}}{m_{1}^{2}+m_{2}^{2}+2m_{1}m_{2}Y_{12(0)}} \left[m_{1}\left(\dot{X}_{C}\bar{X}_{C}\dot{Y}_{12}+\dot{\bar{Y}}_{12}X_{C}\dot{\bar{X}}_{C}\right) + m_{2}\left(\dot{X}_{C}\bar{X}_{C}\dot{\bar{Y}}_{12}+\dot{Y}_{12}X_{C}\dot{\bar{X}}_{C}\right)\right].$$

Подставим в формулу (5) $Y_{12} = Y$ в виде $Y = \cos r + \underline{n} \sin r$. Тогда данное выражение принимает вид

Переходя к пределу когда относительное расстояние много меньше радиуса кривизны, что в принятых обозначениях есть $r \ll 1$, при этом $\cos r \approx 1$, a $\sin r \approx r$ и пренебрегая членами содержащими r^2 получаем

$$\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \dot{r}^2 + (m_1 + m_2) \dot{X}_C \dot{\bar{X}}_C.$$
⁽⁷⁾

Таким образом, в данном приближении возможно разделение переменных центра масс и относительного движения двух тел на сфере.

[1] Курочкин Ю.А., Шёлковый Д.В. Бикватернионы в задаче разделения переменных центра масс и относительного движения для двух тел в трехмерных пространствах постоянной кривизны / Ю.А. Курочкин, Д.В. Шёлковый // В сб. «Ковариантные методы в теоретической физике», Минск, 2011. – вып. 7. – С. 106–112. УДК 621.384.6

В. Ф. Миненко¹, К. А. Веренич¹, С. А. Кутень¹, А. А. Хрущинский¹, С. В. Корнеев², И. Г. Тарутин³

ПОСТРОЕНИЕ МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИ ЛИНЕЙНОГО УСКОРИТЕЛЯ ЭЛЕКТРОНОВ ТИПА CLINAC ДЛЯ ОЦЕНКИ ЭФФЕКТИВНОСТИ ЗАЩИТЫ ОТ ФОТОНЕЙТРОНОВ

¹ Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220030 Минск, Беларусь vminenko@list.ru

² Объединенный институт энергетических и ядерных исследований - Сосны, ул. Академика Красина, 99, 220109, Минск, Беларусь

s.korneyev777@gmail.com

³ РНПЦ онкологии и медицинской радиологии, Минской р-н, аг. Лесной, Беларусь <u>itarutin@tut.by</u>

В последние годы в Беларуси, также как в развитых странах мира, в практику лучевой терапии больных успешно внедряются медицинские линейные ускорители электронов на 15-18 МэВ вместо гамма-аппаратов с источником кобальта-60. Широкие возможности новых линейных ускорителей в формировании оптимальных полей облучения обеспечивают им бесспорные преимущества над устаревшими гамматерапевтическими аппаратами. Однако успешное использование высокоэнергетического тормозного излучения линейных ускорителей осложняется появлением нежелательного нейтронного излучения в поле облучения. При формировании пучка фотонов с энергией более 10 МэВ на мишени, фильтрах и других элементах выходного устройства ускорителя возникает нейтронное излучение [1] с изотропным угловым распределением [2]. Нейтроны образуются в результате фотоядерных реакций, когда энергия падающего фотона выше пороговой энергии (у,n) реакции. Порог и сечение реакции зависят от атомного номера материала. Поэтому основными источниками образования фотонейтронов являются элементы выходной головки из вольфрама, свинца, железа и меди. Особая опасность возникающего нейтронного излучения состоит в том, что тяжесть биологического воздействия нейтронов низких энергий в 20 раз выше по сравнению с фотонным излучением [3]. Поскольку в лучевой терапии различных новообразований все шире начинают применяться новые методики модулированного облучения такие, как IMRT и VMAT, которые создают более значимые потоки нейтронов по сравнению с обычными методиками облучения, то задача оценки доз, создаваемых нейтронами в пространстве вокруг ускорителя, приобретает реальную значимость [4],[5].

Кроме того, возможность установки линейного ускорителя в бункер вместо старого терапевтического аппарата привела к появлению задачи о достаточности существующей бетонной защиты для обеспечения радиационной безопасности персонала и пациентов от дополнительного нейтронного излучения. Обычно бетонная защита при проектировании и строительстве бункеров под гамма-аппараты и ускорители электронов ориентируется, прежде всего, на защиту от фотонного Поэтому требуется дополнительная проверка излучения. такой защиты на экранирования нейтронного излучения. Экспериментальные достаточность исследования нейтронных полей в рабочей зоне ускорителя затруднены в связи с тем, что практически вся аппаратура для регистрации нейтронов чувствительна также и к

гамма-излучению, которое является превалирующим в рабочей зоне. Кроме того, исследования последних десятилетий показывают, что экспериментальные методы не способны дать анализ спектра нейтронов, попадающих на дозиметр [6]. В то же время знание нейтронного спектра необходимо в силу сильной спектральной зависимости коэффициента качества нейтронного излучения. Поэтому нейтронные поля линейных ускорителей исследуют преимущественно расчетным путем с помощью метода Монте-Карло [7].

Названная задача возникла в РНПЦ онкологии и медицинской радиологии им. Н.Н.Александрова Минздрава РБ в связи с введением в эксплуатацию медицинского линейного ускорителя электронов на 18 МэВ Clinac 2300 C/D фирмы Varian. Ускоритель помещен в бункер, в котором ранее размещался бетатрон фирмы Сименс. В связи с этим возникла необходимость переоценить расчетными методами эффективность существующей защиты в отношении фотонейтронов, создаваемых во время работы ускорителя, поскольку имеющееся дозиметрическое оборудование не позволяет дать надежную инструментальную оценку доз нейтронного облучения пациентов и персонала.

С использованием данных [8] разработана Монте-Карло модель выходной головки ускорителя с формирующими устройствами и помещения, в котором размещен ускоритель. Рассчитано распределение поля тормозного излучения, создаваемого за защитой при разном положении головки ускорителя. Исследована возможность получения фотонейтронов от распределенного в пространстве источника тормозного излучения. Обсуждаются реперные точки в ближайшем окружении головки ускорителя, в которых следует рассчитывать поток фотонейтронов для оценки эффективности защиты и безопасности персонала.

- McGinley P. H. Evaluation of neutron dose equivalent levels at the maze entrance of medical accelerator treatment rooms. // P. H. McGinley, E. K. Butker // Med. Phys. – 1991. – Vol. 18. – P. 279.
- [2] Akkurt I. Photoneutron yields from tungsten in the energy range of the giant dipole resonance / I. Akkurt, J. O. Adler, J. R. Annand, et al. //Phys. Med. Biol. – 2003. – Vol. 48. – P. 3345.
- [3] Petoussi-Henss N. Conversion Coefficients for Radiological Protection Quantities for External Radiation Exposures. ICRP Publication 116 / N. Petoussi-Henss, W. E. Bolch, K. F. Eckerman et al. // Ann. ICRP. – 2010. – Vol. 40 (2–5).
- [4] Stokkevåg, C. Photonuclear neutron yields from CRT and IMRT. / C. Stokkevåg // Radiotherapy and Oncology. 2012: Vol. 103. S326.
- [5] Leon, J. Impact on biological ranking plan strategy of the neutron secondary cancer probability. / J. T. Leon, B. Sánchez-Nieto, M. R. Expósito, et al. // Radiotherapy and Oncology. – 2012. – Vol. 103. - S571.
- [6] Kase K. R. Measurements of accelerator-produced leakage neutron and photon transmission through concrete// K. R. Kase et al. / Health Phys. – 2003. – Vol. 84. - P. 180-187.
- [7] Facure A. Monte Carlo simulation of scattered and thermal photoneutron fluences inside a radiotherapy room / A. Facure et.al. //Radiat. Prot. Dosim. 2007. Vol. 123. P. 56-61.
- [8] Bednarz B. P. Detailed Varian Clinac accelerator modeling for calculating intermediateand low-level non-target organ doses from radiation treatment. / B. P. Bednarz //ProQuest, 2008.

Лазерная физика
УДК 535.65.5+535.36

И. А.Ходасевич¹, А. А. Корниенко², Е. Б. Дунина², А. С. Грабчиков¹

НЕЛИНЕЙНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В КРИСТАЛЛЕ KGW ПРИ ВОЗБУЖДЕНИИ НЕПРЕРЫВНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

i.khodasevich@dragon.bas-net.by

² Витебский Государственный технологический университет, Витебск, Беларусь

Недавно созданные непрерывные твердотельные ВКР лазеры притягивают значительный интерес исследователей и находят применения как источники излучения в инфракрасном (ИК) и видимом диапазонах спектра. Для эффективной работы ВКР лазеров требуется тщательный учет факторов, приводящих к потерям. Так как значение ВКР усиления невелико, то получение ВКР генерации требует реализации максимально низкого уровня внутрирезонаторных потерь. Как правило, внутрирезонаторные потери в ВКР лазерах рассматриваются как пассивные потери при отражении, поглощении и рассеянии на комбинационно-активной среде и зеркалах. Однако, в среде могут возникать и активные потери при развитии разных нелинейных процессов. Известно, что при импульсном возбуждении в кристалле KGW доминирующим нелинейнооптическим эффектом является ВКР, для непрерывного возбуждения вопрос о доминировании ВКР не рассматривался.

В нашем докладе приводятся данные о развитии явлений в кристалле KGW, зависящих от мощности лазерного излучения, таких как возникновение апконверсионного свечения и изменение пропускания, при воздействии непрерывного лазерного излучения ИК диапазона, в результате которых могут создаваться активные потери.

При возбуждении ИК излучением с длинами волн около 808 и 970 нм с плотностью мощности превышающей 100 Вт/см² в перетяжке пучка излучения диодного лазера в кристалле KGW возникает зеленое свечение, которое доминирует в диапазоне 350-750 нм и имеет структурированный двух полосный спектр.

Принципиально важно, что мощность лазерного излучения играет особую роль в явлении ап-конверсионного испускания в недопированном кристалле. Экспериментальные данные зависимости интенсивности зеленого свечения от мощности диодного лазера, представленные в двойном логарифмическом масштабе, аппроксимируются линейной функцией с показателем наклона прямой 1.6, что свидетельствует о двух фотонном возбуждении свечения.

Кроме того, наблюдаемый эффект сильно зависит от длительности лазерного воздействия на кристалл. На рисунке 1а представлены зависимости интенсивности полос 544 и 533 зеленого свечения от длительности импульсов при фиксированной частоте их следования. Важным является то, что с увеличением длительности воздействия интенсивность свечения продолжает возрастать во всем временном диапазоне измерений (до 100 мс), и этот рост происходит нелинейно. Эти данные

свидетельствуют о том, что механизм, ответственный за развитие зеленого свечения, отличается от традиционных нелинейных эффектов, возникающих мгновенно вследствие высокой интенсивности коротких лазерных импульсов. Именно сочетание мощности и долговременности воздействия лазерного излучения приводит к возникновению и росту интенсивности видимого свечения при ИК возбуждении.

Поскольку причины наблюдаемого зеленого свечения могут быть обусловлены спецификой процесса производства, мы протестировали 5 кристаллов, изготовленных разными производителями. Зеленое свечения наблюдалось в каждом из пяти кристаллов, но отличалось по интенсивности. Анализ положения и формы спектра показал его связь с наличием в кристалле ионов эрбия. Поэтому различие в интенсивности может объясняться концентрацией примесных ионов Ег в кристаллах KGW. Проведенные приближенные оценки концентрации ионов Ег по измерению интенсивности однофотонно возбуждаемой люминесценции в сравнение с сигналом в 1% Er:KGW, показали, что эти концентрации соответствуют микроуровню в 10⁻⁴-10⁻⁶ %.

Существование потерь, создаваемых в кристалле ИК лазерным излучением, было проверено по измерению пропускания кристалла методом, подобным Z-scan. Для измерения потерь использовался диодный лазер, работающий в импульсном режиме с длительностью импульсов 20 мс и частотой их следования 10 Гц. Осциллограммы сигнала излучения, прошедшего через кристалл, помещенный в перетяжку пучка и выдвинутый из нее, приведены на рисунке 16. Разность в суммарных потерях для обоих случаев составляет 1-3 % на протяжении импульса.



Рисунок 1. – Проявление нелинейных явлений в кристалле KGW при возбуждении ИК излучением (808 нм): а) зависимость интенсивности полос 544 и 533 нм зеленого свечения от длительности импульсов возбуждающего излучения; б) осциллограммы прошедшего через кристалл лазерного излучения мощностью 300 мВт.

Таким образом, полученные результаты показывают что, при длительном воздействии достаточно мощного ИК излучения в недопированных кристаллах KGW развиваются нелинейные эффекты, такие как ап-конверсионные процессы на микроскопических концентрациях примесных ионов редкоземельных элементов, сопровождаемые макроскопическим изменением пропускания среды, что может оказывать значительное влияние на лазерную генерацию и развитие BKP. УДК 535.37;621.371.378

В. В. Кабанов, Г. И. Рябцев

СОВРЕМЕННЫЕ ЛАЗЕРНЫЕ СИСТЕМЫ С ДИОДНОЙ НАКАЧКОЙ: ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ И ПРИМЕНЕНИЯ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь v.kabanov@ifanbel.bas-net.by

Широкое применение диодно-накачиваемых лазерных источников (ДНЛИ) излучения в перспективных оптоэлектронных устройствах обусловлено как внедрением новых лазерных сред и компонентов резонатора, так и совершенствованием лазерных диодных линеек и матриц – базовых элементов блоков оптической накачки.

Действующие лазерные системы можно подразделить на два больших класса: 1) системы для условно безопасного спектрального диапазона (1,5 – 2,0 мкм) и 2) системы для УФ, видимого и ближнего ИК диапазонов (0,2 – 1,1 мкм). Диодная накачка таких источников излучения осуществляется в соответствии с продольной или поперечной схемой. Последний вариант накачки используется преимущественно для получения мощных выходных импульсов при относительно более низкой, по сравнению с первым вариантом, степени однородности распределения излучения в поперечном сечении лазерного пучка.

При частотах повторения не выше 5–10 Гц и энергии световых импульсов E до 10–15 мДж в ДНЛИ первого класса, как правило, используются активные элементы (АЭ) на основе эрбий–содержащих кристаллов или стекол. Более мощные источники условно безопасного излучения и/или работающие при более высоких частотах повторения импульсов создаются по схеме параметрического преобразования задающего излучения (с длиной волны, например, 1,064 мкм). Активные элементы ДНЛИ второго класса – это кристаллы, допированные ионами неодима или иттербия. Накачка таких АЭ осуществляется мощными лазерными диодными линейками (ЛДЛ) или матрицами лазерных диодов. В большинстве случаев при E не более 1 Дж диодно–накачиваемые лазерные источники излучения охлаждаются прокачкой потока воздуха, без использования водных растворов.

В Институте физики НАН Беларуси проводятся экспериментальные и теоретические исследования, направленные на дальнейшее улучшение пространственных и энергетических характеристик ДНЛИ различного назначения. В частности, для InGaAs/AlGaAs ЛДЛ блоков накачки эрбиевых лазеров, показано, что оптимальное значение фактора заполнения излучением ближнего поля генерации ЛДЛ составляет 0,65–0,85 [1] при коэффициенте отражения выходного зеркала 20 % [2]. Разработанные образцы компактных эрбиевых лазеров, рис. 1, способны работать в широком интервале температур окружающей среды при минимальном уровне потребления электрической энергии [3].

В работах, относящихся к ДНЛИ второго класса, основное внимание уделяется поиску способов повышения величины *E* (до уровней, превышающих 1 Дж) при обеспечении максимальной степени однородности выходного пучка (минимального

значения параметра качества M^2).

Для лазеров на основе Nd:YAG АЭ предложена оригинальная конструкция квантрона с воздушным охлаждением [4], позволяющая формировать пучки с энергиями до 400 мДж при относительно высоких частотах повторения импульсов.



Рис. 1. Образцы компактных ДНЛИ с энергиями импульсов 2–8 мДж для условно безопасного для органов зрения спектрального диапазона (длина волны 1,54 мкм)

Разработанные образцы ДНЛИ находят применение в научных и производственных организациях Беларуси (НТЦ "ЛЭМТ" БелОМО), России (ООО "Квантово–оптические системы", г. Москва; ООО "Спектралазер", г. Москва), Индии, Китая, США. Двухимпульсный ДНЛИ успешно прошел испытания в составе мобильного лазерного спектрометра.

Важно отметить, что сферы применения мощных ДНЛИ находятся в постоянном развитии. Все более актуальными становятся исследования, направленные на создание высокоэффективных / высокоэкономичных лазеров для лазерного термоядерного синтеза, а также систем поджига топлива ракет и двигателей внутреннего сгорания.

- [1] Optimal fill factor for laser diode arrays applied to transversally pumped erbium laser. / T.V. Bezyazychnaya, M.V. Bogdanovich, A.V. Grigor'ev et al. // Optics Communications. - 2012. - V. 285. - P. 2397-2401.
- [2] Optimal output mirror reflection coefficient for powerful InGaAs/AlGaAs laser diode arrays. / M.V. Bogdanovich, V.V. Kabanov, Y.V. Lebiadok et al. // Optics & Laser Technology. – 2013. – V. 45. – P. 177–180.
- [3] Optimized diode-pumped passive Q-switched ytterbium-erbium glass laser. / G.I. Ryabtsev, T.V. Bezyazychnaya, M.V. Bogdanovich et al. // Applied Physics B. – 2012. – V. 108. – P. 283–288.
- [4] High-performance LD-pumped solid-state lasers for range finding and spectroscopy. / M.V. Bogdanovich, V.V. Kabanov, G.I. Ryabtsev et al. // Proc. of SPIE. - 2013. -V. 8677. - P. 8677OX-1-8677OX-3.

UDC 53.082.52

Н. В. Баковец¹, В. А. Длугунович², С. В. Никоненко², Д. В. Скумс¹, О. Б. Тарасова¹

ЭТАЛОННАЯ БАЗА РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ В ОБЛАСТИ ФОТОМЕТРИИ

¹ Белорусский государственный институт метрологии, Старовиленский тракт, 93, 220030 Минск, Беларусь

ортіс@belgim.by ² Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь s.nikonenko@dragon.bas-net.by

Оптоэлектронная техника – базовый элемент систем связи и телекоммуникаций, информационных технологий, микроэлектроники, фотоники, широко используется при контроле продукции отраслей машиностроения и приборостроения, нарастающими темпами осваивается в медицине, открывая новые возможности диагностики и лечения, светотехнике, экологическом мониторинге и т.д. Быстро растущий рынок изделий фотоники не может развиваться без современной эталонной базы, обеспечивающей единство измерений характеристик оптоэлектронной техники, разрабатываемой, создаваемой и используемой в Республике Беларусь.

В Республике Беларусь приступили к формированию эталонной базы в области фотометрии в середине 1990-х гг. Ведущая роль в этой работе принадлежит Белорусскому государственному институту метрологии (БелГИМ), на который, в соответствии с Законом Республики Беларусь «Об обеспечении единства измерений», Госстандартом Республики Беларусь возложены функции главного центра национальных эталонов. В работах по созданию эталонной базы в области фотометрии БелГИМ тесно сотрудничает с Институтом физики НАН Беларуси, являющимся ведущим научным учреждением в области лазерной физики и оптики.

В настоящее время эталонная база Республики Беларусь в области фотометрии включает: Национальный эталон единиц цвета и спектральных коэффициентов направленного пропускания и диффузного отражения в диапазоне длин волн (0,2–2,5) мкм (НЭ РБ 3-00); Национальный эталон единиц силы света и освещенности (НЭ РБ 8-02); Национальный эталон единицы спектральной чувствительности приемников излучения (НЭ РБ 17-10) и Исходный эталон единиц белизны (ИЭ РБ 13-08).

Национальный эталон единиц цвета И спектральных коэффициентов направленного пропускания и диффузного отражения в диапазоне длин волн (0,2–2,5) мкм разработан и введен в действие в 2000 г. Эталон базируется на прецизионном спектрофотометре «Cary-500 Scan». Воспроизведение, хранение и передача размера единиц нижестоящим по рангу эталонам и рабочим средствам измерений (СИ) осуществляется с помощью: мер цвета, выполненных из прозрачного и опалового цветного стекла; мер спектральных коэффициентов направленного пропускания в ультрафиолетовой, видимой и инфракрасной областях спектра, выполненных из кварцевого стекла и стекла типа НС; мер спектральных коэффициентов диффузного отражения в ультрафиолетовой, видимой и инфракрасной областях спектра,

выполненных из молочного стекла типа MC и прессованного порошка политетрафторэтилена (PTFE). Точность воспроизведения единиц цвета, спектральных коэффициентов направленного пропускания и диффузного отражения подтверждена результатами международных сличений с аналогичными эталонами Польши, Словакии, России, Франции и Украины.

Национальный эталон единиц силы света и освещенности разработан и введен в действие в 2002 г. Он воспроизводит, хранит и передает нижестоящим по рангу эталонам и рабочим СИ единицы силы света, освещенности, коррелированной цветовой температуры и цветности. В состав эталона входят: оптическая скамья, группы светоизмерительных ламп переменного состава, группа прецизионных приемников оптического излучения, системы измерения расстояния, питания светоизмерительных ламп и регистрации информации. В период с 2007 по 2010 г. была проведена модернизация, в результате которой состав эталона дополнился блоком малых уровней освещенностей и существенно расширены функциональные возможности колориметрического блока. Точность воспроизведения единиц силы света и освещенности подтверждена результатами ключевых сличений в рамках Европейской ассоциации национальных метрологических институтов (EBPAMET).

В 2010 г. эталонная база Республики Беларусь в области фотометрии пополнилась национальным эталоном, который воспроизводит, хранит и передает единицу спектральной чувствительности приемников оптического излучения в спектральной области от 350 до 1100 нм. В состав эталона входят: монохроматор уникальной разработки со встроенным в его корпус приемником-свидетелем для минимизации влияния флуктуаций излучения осветителя; группа трап-детекторов, изготовленных на основе фотодиодов S1337 (Нататаtsu, Япония); передвижная механизированная платформа с размещенными на ней калибруемыми и эталонными приемниками оптического излучения; видеокамера для юстировки приемников излучения.

Исходный эталон единиц белизны разработан и введен в действие в 2008 г. Он предназначен для хранения и передачи единиц белизны светоотражающих материалов нижестоящим по рангу эталонам и рабочим СИ. Эталон базируется на группе прецизионных спектроколориметров с различной геометрией освещения/наблюдения: «Elrepho», «X-Rite 8400», «Color-Eye 2145» и мерах белизны, изготовленных из молочного стекла MC-20 и бумаги, содержащей флуоресцирующие оптические вещества. Эталон получает единицы белизны от шведского института «INNVENTIA», который имеет ранг уполномоченной лаборатории Технического комитета ИСО/ТК6 «Бумага, картон и целлюлоза».

Созданные эталоны единиц фотометрических величин почти полностью удовлетворяют текущие запросы потребителей и отвечают требованиям мировых стандартов. В настоящее время БелГИМ совместно с Институтом физики НАН Беларуси ведут работы по созданию Национального эталона единицы светового потока непрерывного излучения. Эталон предназначен для воспроизведения, хранения и передачи нижестоящим по рангу эталонам и рабочим СИ единицы светового потока в диапазоне от 500 до 1500 Лм. После введения его в эксплуатации БелГИМ сможет полностью обеспечить потребности организаций и предприятий Республики Беларусь в обеспечении единства измерений фото- и колориметрических величин. УДК 621.373.826

В. Н. Чижевский,

УПРАВЛЕНИЕ ОПТИЧЕСКИМИ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯМИ В БИСТАБИЛЬНОМ ВЕРТИКАЛЬНО ИЗЛУЧАЮЩЕМ ЛАЗЕРЕ ТОКОВОЙ МОДУЛЯЦИЕЙ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь vnc@dragon.bas-net.by

Недавно, экспериментально было показано, что отклик бистабильного лазера с вертикальным резонатором (ЛВР) на действие периодически модулированной оптической обратной связи может быть значительно увеличен дополнительной токовой модуляцией за счет явления вибрационного резонанса (ВР) [1]. В отличие от этих исследований здесь экспериментально демонстрируется, что аналогичный эффект наблюдается и на действие модулированного излучения инжекционного ЛВР. Впервые, явление ВР, проявляющееся в виде резонансной зависимости низкочастотного (НЧ) отклика бистабильной системы от амплитуды дополнительной высокочастотной (ВЧ) модуляции, было теоретически рассмотрено в работе [2]. Экспериментально, ВР был обнаружен в аналоговых электрических цепях [3] и в бистабильном ЛВР [4].

Эксперименты были выполнены с двумя ЛВР, генерирующими в области 852 нм. Первый ЛВР работал в режиме поляризационной бистабильности, динамика переключений которого исследовалась на выбранной поляризации. Второй ЛВР использовался для оптической инжекции на ортогональной поляризации. Температура стабилизировалась с точностью 0.01°С. Инжекционный лазер работал в лазеров режиме периодической модуляции интенсивности излучения с частотой f_L=1 кГц. Для управления переключениями периодический сигнал на частоте f_H =25 кГц с различными амплитудами А_Н добавлялся к постоянному току накачки І_{dc} бистабильного лазера. Для характеризации ВР использовались коэффициент усиления отклика G_{VR} и отношение сигнал-шум SNR, определяемые как $G_{VR}=R_L(f_L)/R_0(f_L)$ и SNR=20log₁₀[$R_L(f_L)/R_N(f_L)$], где $R_L(f_L)$, $R_0(f_L)$ – НЧ отклики при наличии и отсутствии ВЧ модуляции, $R_N(f_L)$ – интерполированный уровень шума, соответственно. На рис.1(а) показан коэффициент усиления G_{VR} в зависимости от амплитуды токовой модуляции A_H, который имеет характерный резонансный характер. При оптимальном значении A_H величина $G_{VR} > 100$, при этом наблюдается существенный рост SNR [Рис.1(b)].



Рис.1. (а) G_{VR} , (b) SNR, и (c) C_{IO} как функция амплитуды токовой модуляции A_H .

В этих условий при оптимальном значении A_H наблюдалась противофазная синхронизация между входным сигналом оптической инжекции I_I и откликом лазера на ортогональной поляризации I_O . Это можно увидеть на рис.1(с), на котором показан нормированный коэффициент C_{IO} , определяемый следующим образом

$$C_{IO} = \frac{\langle I_I I_O \rangle - \langle I_I \rangle \langle I_O \rangle}{\left[\left(\langle I_I^2 \rangle - \langle I_O \rangle^2 \right) \left(\langle I_I^2 \rangle - \langle I_O \rangle^2 \right) \right]^{1/2}},$$

где <...> означает усреднение по времени.

Результаты на рис. 1 соответствуют почти симметричной конфигурации бистабильного квазипотенциала. Влияние асимметрии показано на рис. 2, где представлены контурные графики для G_{VR} и C_{IO} в зависимости от A_H и постоянного тока смещения I_{dc} . В этих измерениях I_{dc} менялся с шагом 0,005 мА, приводя к изменению асимметрии квазипотенциала. Видно, что максимальная эффективность действия оптической модуляции наблюдается в узких диапазонах A_H и I_{dc} .



Рис.2. Зависимость (а) G_{VR} и (b) C_{IO} от A_H и I_{dc} .

Рисунок 3 дает представление о временном поведении в режиме управляемого переключения поляризационных состояний в бистабильном лазере при оптимальных значениях A_H для разных значений постоянного тока I_{dc} , которые соответствуют симметричной и асимметричной конфигурации бистабильного квазипотенциала.



Рис.2. Временные отклики бистабильного лазера для (а) симметричного и (b) сильно асимметричного квазипотенциала, (c) и (d) входной оптический сигнал от инжекционного лазера.

- Chizhevsky V.N. Enhancement of response of a bistable VCSEL to modulated orthogonal optical feedback by vibrational resonance. / V. N. Chizhevsky // Optics Letters. - 2012. -V.37. – P.4386.
- [2] Landa P. S. Vibrational resonance. / P. S. Landa, P. V. E. McClintock // J Phys. A: Math. Gen. - 2000. - V.33. - P.L433.
- [3] Baltanas J.P. Experimental evidence, numerics, and theory of vibrational resonance in bistable systems. / J.P. Baltanas, L. Lopez, I. I. Blechman, P. S. Landa, A. Zaikin, J. Kurths, M. A. F. Sanjuan // Phys. Rev. E. - 2003. – V.67. – P.066119.
- [4] Chizhevsky V.N. Experimental Evidence of Vibrational Resonance in an Optical System. / V. N. Chizhevsky, E Smeu, G Giacomelli // Phys. Rev. Lett. -2003. V.91 P.220602.

УДК 621.375.88

А.Л. Уласевич, А.В. Горелик, А.А. Кузьмук, В.С. Старовойтов

ПРИМЕНЕНИЕ ДИОДНЫХ ЛАЗЕРОВ, ГЕНЕРИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЕ В БЛИЖНЕЙ ИК-ОБЛАСТИ СПЕКТРА, И КОМПАКТНЫХ РЕЗОНАНСНЫХ ОПТИКО-АКУСТИЧЕСКИХ КАМЕР ДЛЯ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ ИЗМЕРЕНИЙ В ГАЗАХ.

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь a.ulasevich@dragon.bas-net.by

Лазерная оптико-акустическая (OA) спектроскопия является одним из наиболее методов бесконтактного чувствительных локального анализа микроколичеств химических соединений в газовой среде. Последние достижения в этой области связаны с «миниатюризированными» резонансными ОА камерами [1-2]. Внутренний объем таких камер может достигать нескольких кубических миллиметров. При этом камеры обладают чувствительностью не хуже, чем камеры традиционных размеров. Создание спектроскопического газоанализатора, который включает в себя описанные ОА камеры и диодные лазеры с токовой модуляцией излучения, представляет большой интерес для коммерческого применения. Очевидными преимуществами таких лазеров является невысокая стоимость, небольшие размеры, непрерывная перестройка длины волны генерации и возможность отказаться от внешних модуляторов лазерного луча. Однако следует учитывать эффект "спектрального уширения" излучения лазера, вызванный модуляцией тока лазера.

В докладе анализируется возможность применения диодных лазеров ближнего ИК-диапазона с распределенной обратной связью (DFB) для газоанализа с помощью миниатюризированной ОА камеры. На примере паров аммиака в воздухе, демонстрируется возможность детектирования газов в эксперименте с терморегулируемым диодным DFB лазером, генерирующим излучение с длиной волны 1,53 мкм, и компактной ОА камерой наклонной геометрии. Приводятся результаты исследования эффекта спектрального уширения излучения для диодного лазера с распределенной обратной связью при амплитудной токовой модуляции лазера TTL сигналом на частотах, типичных для акустических резонансов миниатюризированной ОА камеры (1-20 кГц). Спектральная ширина лазерного луча оценивается и анализируется как функция силы тока лазера и частоты модуляции.

 A.V. Gorelik, A.L. Ulasevich, F.N. Nikonovich, M.P. Zakharich, V.A. Firago, N.S. Kazak, V.S. Starovoitov, Miniaturized resonant photoacoustic cell of inclined geometry for trace-gas detection, Appl. Phys. B 100 (2010) 283-289.

[2]. http://www.micepas.basnet.by

УДК 535.3;621.315.592

А. М. Гончаренко, Г. В. Синицын, А. В. Ляхнович, В. Л. Малевич

ТЕРАГЕРЦОВЫЙ СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИЙ КОМПЛЕКС С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФОТОПРОВОДЯЩИХ АНТЕНН И УВ:КУW ЛАЗЕРА

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь g.v.sinitsyn@gmail.com

В последнее время созданы лазерные источники фемтосекундных импульсов на основе иттербий-содержащих сред с диодной накачкой, которые генерируют на длине волны 1.03-1.04 мкм [1]. Они сравнительно недороги, обеспечивают более 1 Вт средней мощности выходного излучения без дополнительных регенеративных усилителей. Достигнутые параметры указывают на перспективность применения подобных лазеров в спектрометрах терагерцового (ТГц) диапазона с когерентным детектированием электрического ТГц поля (time-domain spectroscopy). Недавно на основе полупроводниковых соединений GaBiAs были также разработаны чувствительные в области 1 мкм фотопроводящие антенны, которые весьма эффективны в качестве как излучателей, так и детекторов ТГц поля [2].

Нами создан спектрометрический ТГц комплекс с использованием Yb:KYW лазера FL-1 (ЗАО «СоларЛС», Беларусь), генерирующего импульсы фемтосекундной длительности на длине волны 1.04 мкм. Схема спектрометра представлена на рисунке1.



Рис. 1. Схема ТГц спектрометра. 1 – лазер; 2 – ТГц эмиттер; 3 – ТГц детектор; 4 – объект исследований; 5 – моторизованная оптическая линия задержки; 6 – синхронный усилитель; 7 – источник напряжения смещения; 8 – компьютер; 9 – оптический модулятор; 10 – тракт распространения ТГц излучения.

Лазер (1) обеспечивает до 1.2 Вт средней выходной мощности при длительности импульса 150 фс с частотой повторения 70 МГц. Лазерное излучение делится светоделителем на два пучка, обеспечивающих возбуждение эмиттера (2) и детектора (3) терагерцовых импульсов. Средняя мощность каждого пучка составляет около 15 мВт. Возбуждающие пучки фокусируются линзами с фокусным расстоянием 100 мм. Пучок возбуждения ТГц эмиттера прерывается модулятором (9) с частотой порядка 1 кГц. Одна из последних моделей фотоантенны–эмиттера, производства компании Teravil (Литва), обеспечивает эффективность преобразования средней мощности фемтосекундного оптического излучения в пикосекундное терагерцовое на уровне 10⁻⁴. ТГц излучение коллимируется и фокусируется гиперсферическими линзами,

выполненными из высокоомного кремния. Пикосекундные терагерцовоые импульсы в тракте (10), пройдя через исследуемый образец, попадают в зазор между электродами полосковой линии фотоантенны-детектора (3). В моменты прихода в зазор также и фемтосекундных импульсов в фотопроводящем слое генерируются неравновесные носители заряда, которые дают вклад в фототок, пропорциональный напряженности ТГц электрического поля в эти моменты. Последовательно изменяя с помощью оптической линии задержки (5) моменты прихода фемтосекундных импульсов относительно ТГц импульсов, производится запись временной зависимости ТГц поля с разрешением до 10 фс. Для регистрации индуцированного ТГц польм тока в фотоантенне применен синхронный усилитель SR830 (6). Использование метода синхронного детектирования позволяет достигать отношения сигнал/шум до 60 дБ.

Спектр прошедшего сигнала получается из временной формы ТГц импульса путем преобразования Фурье. Применяемый здесь метод когерентного детектирования позволяет фиксировать одновременно как амплитуду, так и фазу электрического поля ТГц импульсов, что обеспечивает одновременное измерение коэффициента поглощения и показателя преломления исследуемого образца в диапазоне частот 0,1...2,5 ТГц. Пример зарегистрированных для образца керамики временных профилей ТГц поля, а также соответствующих спектров приведен на рисунке 2.





Для управления входящим в состав спектрометра оборудованием, сбора данных и их первичной обработки используется компьютер (8) со специально разработаным программным обеспечением (ПО). ПО позволяет визуализировать кинетику напряженности поля терагерцовых импульсов, сохранять полученные данные в файл, производить обработку профилей ТГц импульсов, преобразовывать их в частотные спектры и определять ТГц спектры объекта.

 [1] Кисель В. Иттербиевые твердотельные лазерные системы. / В. Кисель, А. Гулевич, Н. Кондратюк // Фотоника. – 2011. – №2. – С. 20–24.

[2] GaBiAs: A material for optoelectronic terahertz devices. / K.Bertulis [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2006. – V. 88. – P. 201112 -20115.

УДК 535.317.1

В. М. Катаркевич, А. Н. Рубинов, Т. Ш. Эфендиев

СУБНАНОСЕКУНДНЫЙ ЛАЗЕР НА КРАСИТЕЛЯХ СО СВЕТОИНДУЦИРОВАННОЙ РАСПРЕДЕЛЕННОЙ ОБРАТНОЙ СВЯЗЬЮ НА ОСНОВЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ РЕШЕТКИ ДИХРОИЗМА УСИЛЕНИЯ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь katarkevich@dragon.bas-net.by

В лазерах на красителях со светоиндуцированной распределенной обратной связью (РОС) возбуждение активной среды, как правило, осуществляется с помощью двух симметрично сходящихся на ее рабочей поверхности когерентных световых пучков с S поляризацией, электрические векторы излучения которых E_1 и E_2 параллельны друг другу и перпендикулярны к плоскости падения. В результате интерференции указанных пучков обеспечивается пространственно-периодическая модуляция интенсивности поля возбуждения раствора красителя, приводящая к соответствующей модуляции коэффициента усиления и показателя преломления активной среды (т.е., к формированию в ней динамической амплитудно-фазовой решетки). В этом случае развитие генерации в РОС-лазере происходит в результате обратной брэгговской дифракции излучения на указанной решетке. Вместе с тем, вследствие анизотропии поглощения и испускания света молекулами красителей, в их растворах возможно формирование И другого рода динамических пространственных структур - решеток дихроизма усиления, которые также могут выполнять роль распределенного по длине активной среды резонатора. В простейшем варианте формирование таких решеток осуществляется при возбуждении активной среды с помощью двух сходящихся ортогонально поляризованных пучков излучения ($E_1 \perp E_2$) с *S* и *P* поляризацией. В этом случае интенсивность результирующего поля накачки однородна по длине зоны возбуждения, зато имеет место пространственно-периодическое изменение состояния его поляризации. Вследствие преимущественного возбуждения молекул красителя, дипольные моменты которых ориентированы по направлению вектора напряженности суммарного электрического поля накачки $E = E_1 + E_2$, и формируется динамическая пространственная решетка дихроизма усиления.

В настоящей работе впервые получена генерация в РОС-лазере на красителях на основе пространственной решетки дихроизма усиления при субнаносекундной длительности импульсов накачки. Детально исследовано влияние экспериментальных условий возбуждения активной среды на характеристики генерации. Определены условия получения в таком РОС-лазере эффективного узкополосного излучения с высокой стабильностью параметров.

Для проведения исследований нами использовался РОС-лазер на красителях оригинальной конструкции, обеспечивающий возможность получения генерации, оперативно перестраиваемой в широкой области спектра (~535 – 900 нм), при возбуждении импульсным излучением с длиной волны $\lambda = 532$ нм. В оптической

ИЗ

одного

схеме РОС-лазера деление исходного пучка накачки с вертикальной ориентацией электрического вектора Е на два пучка сходной интенсивности осуществляется с помощью диэлектрического светоделителя. Для разворота плоскости поляризации 90^{0} использовалась пучков на полуволновая пластинка ИЗ кристаллического кварца. Излучатель РОС-лазера представлял собой стеклянную призму-кювету со скошенными выходными окнами, заполненную раствором красителя. Активной средой РОС-лазера служили этанольные растворы родамина 6Ж

с концентрацией $C \approx 0.2$ ммоль/л. В качестве источника возбуждения использовался частотный (f < 500 Гц) твердотельный Nd:LSB микролазер с диодной накачкой STA-01SH ($\lambda = 532$ нм) с длительностью импульсов $\tau_{0.5} \approx 0.5$ нс, энергией $E_{\mu} \leq 80$ мкДж при стабильности $\varepsilon \sim 0.4\%$ (СКО) и ширине линии $\Delta \lambda_{0.5} < 0.005$ нм. Длина зоны возбуждения раствора красителя в кювете составляла L = 1 - 1,2 см при высоте $d \approx 0.01$ см.

Проведенные исследования показали, что, в отличие от традиционного варианта возбуждения ($E_1 / / E_2$), на стабильность поляризационно-энергетических характеристик излучения РОС-лазера на основе решетки дихроизма усиления более заметное влияние оказывают расходимость, a также пространственная формирующего неоднородность интенсивности ee светового поля накачки. Оптимизация экспериментальных условий возбуждения активной среды позволила получить в РОС-лазере эффективную генерацию узкополосного излучения с высоко воспроизводимыми параметрами. Так, при накачке РОС-лазера, работающего в 1-м порядке брэгговской дифракции, импульсами излучения Nd:LSB микролазера с $E_{\mu} \sim 50$ мкДж был реализован устойчивый энергией режим генерации субнаносекундных импульсов с длительностью $\tau_{05} \le 0,4$ нс при ширине линии излучения *Д*λ_{0.5} < 0,008 нм и области плавной перестройки длины волны 546 – 590 нм. В области максимума контура усиления активной среды ($\lambda \sim 568$ нм) пороговая энергия возбуждения РОС-лазера составляла *E*_{nop} ~ 3,8 мкДж, а КПД генерации достигал $\eta_{max} \sim 24\%$ ($\eta_{max} \sim 48\%$ при учете суммарной энергии двух симметрично выходящих из кюветы пучков). В таком режиме работы РОС-лазера стабильность энергии генерируемого излучения составляла $\varepsilon \sim 3\%$ при степени поляризации $P \sim 0, 1 - 0, 3$. В случае же однонаправленного вывода излучения генерации из устройства (что достигалось с помощью внешнего алюминиевого зеркала, возвращавшего один из выходящих из кюветы пучков генерации обратно в активную среду) порог генерации РОС-лазера понижался почти в 2 раза, а КПД генерации возрастал до $\eta_{max} \sim 37\%$. При этом также наблюдалось существенное улучшение стабильности энергии излучения генерации ($\varepsilon \sim 0.6$), а также возрастание степени его поляризации до P~0,4. РОС-лазер устойчиво работал с частотами следования импульсов, повторяющими накачку, без прокачки раствора красителя через кювету.

простоте, эффективности высокой Благодаря своей И стабильности характеристик, реализованный в настоящей работе РОС-лазер на красителях на основе решетки дихроизма усиления представляет не только чисто научный, но и практический интерес. Он может найти применение в тех областях, где требуются перестраиваемые субнаносекундные импульсы излучения невысокой мощности.

УДК 535.37 Г. Е. Малашкевич^{1,2}, Н. В. Голубев², Е. Х. Мамаджанова², В. Н. Сигаев², И. В. Прусова¹, И. И. Сергеев¹, А. А. Суходола¹

ОКСИДНОЕ СТЕКЛО С БОЛЬШИМ МИНИМАЛЬНЫМ РАССТОЯНИЕМ МЕЖДУ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫМИ АКТИВАТОРАМИ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>g.malashkevich@ifanbel.bas-net.by</u>

² Международная лаборатория функциональных материалов на основе стекла РХТУ им. Д.И. Менделеева, Миусская пл., 9, 125047 Москва, Россия <u>vlad.sigaev@gmail.com</u>

Хорошо известно, что большинство редкоземельных активаторов В диэлектрических матрицах испытывают концентрационное тушение люминесценции из-за кроссрелаксационных и кооперативных процессов безызлучательного переноса обусловлен возбуждений. Такой перенос, как правило, мультипольными взаимодействиями квантовых осцилляторов, соответствующих взаимодействующим переходам. Квадрат матричного элемента гамильтониана такого взаимодействия в адиабатическом приближении характеризуется обратной зависимостью от расстояния между донором и акцептором возбуждений в степени m = 6, 8, 10 соответственно для диполь-дипольных, диполь-квадрупольных и квадруполь-квадрупольных переходов. Поэтому для минимизации процессов тушения люминесценции, обусловленных переносом возбуждений, актуальным поиск межионным является матриц, обеспечивающих максимальное значение указанного расстояния.

Среди таких матриц обращают на себя внимание тугоплавкие бораты со структурой хантита и общей формулой $RM_3(BO_3)_4$, где R = Y, Ln, a M = Al, Cr, Ga, Fe, Sc. В этой структуре полиэдры [LnO₆] оказываются разделёнными полиэдрами [BO₃] в результате чего минимальное расстояние Ln – Ln составляет ≈ 5.9 Å [1]. Недостатком рассматриваемых кристаллов можно считать относительно эффективную многофононную релаксацию между состояниями с энергетической щелью менее 8000 – 10000 см⁻¹ из-за достаточно большой частоты валентных колебаний связи B – O в полиэдрах [BO₃] ($v \approx 1300$ см⁻¹).

Превалирующее содержание бора в указанных кристаллах предполагает высокую стеклообразующую способность и возможность получения прозрачных стекол идентичного состава, реализуемость которой возрастает при использовании в качестве М алюминия. Потенциальным преимуществом подобных стекол представляется снижение концентрации колебательных осцилляторов [ВО₃] в результате перехода части трёхкоординированного бора в четырёхкоординированный, для которого частота валентных колебаний связи В – О составляет ≈ 1100 см⁻¹.

Недавно, используя методы анализа распределения активной примеси в твёрдых телах [2], мы показали, что при трансформации хантитоподобных поликристаллов Sm_xY_{1-x}Al₃(BO₃)₄ в стекло системы $12,5(Sm_xY_{1-x})_2O_3 - 37,5Al_2O_3 - 50B_2O_3$, происходящей при $T \approx 1470$ °C, структура распределения редкоземельных элементов в матрице сохраняется, а минимальное расстояние Sm – Sm увеличивается до рекордной

для оксидных матриц величины в 6,5 Å [3]. Данный результат свидетельствует о том, что в хантитоподобных стеклах практически отсутствуют связи Ln - O - Ln, т. е. полиэдры [LnO_n] изолированы друг от друга (не имеют общих вершин), несмотря на неупорядоченную структуру матрицы. При этом, как и ожидалось, происходит переход части полиэдров [BO_3] в [BO_4] и соответствующее увеличение квантового выхода люминесценции. Дальнейшие исследования показали, что увеличение концентрации B_2O_3 существенно снижает температуру синтеза и склонность стекла к кристаллизации при нагреве, но слабо влияет на расстояние Ln - Ln. Благодаря возможности введения в такое стекло высоких (до $4,5 \cdot 10^{21}$ ионов/см³) концентраций лантаноидов его можно рекомендовать в качестве матрицы для получения высоколегированных активных лазерных элементов с низким концентрационным тушением люминесценции. Однако из-за наличия в таком стекле высокочастотных колебательных осцилляторов [BO_3] предпочтительным является использование активаторов с энергетической щелью между метастабильным и ближайшим к нему нижним состоянием более 8000 см^{-1} .

Приводятся конкретные примеры исследования квантовых выходов и кинетики затухания люминесценции различных редкоземельных активаторов, демонстрирующие низкую эффективность концентрационного тушения люминесценции в данном стекле.

- [1] Kellendonk F. On the luminescence of Sm³⁺, Gd³⁺, and Dy³⁺ in yttrium aluminium borate. / F. Kellendonk, G. Blasse // Phys. Stat. Sol. (b). 1981. V. 108. P. 541.
- [2] Аванесов А. Г. Исследование процессов дезактивации и переноса энергии и электронного возбуждения неодима в высококонцентрированных фосфатных стеклах / А. Г. Аванесов, Т. Т. Басиев, Ю. К. Воронько, Б. И. Денкер, А. Я. Карасик, Г. В. Максимова, В. В. Осико, В. Ф. Писаренко, А. М. Прохоров // ЖЭТФ. – 1979. – Т. 77. – С. 1771.
- [3] Malashkevich G. E. Spectroscopic properties of Sm-containing yttrium-aluminoborate glasses and analogous huntite-like polycrystals / G. E. Malashkevich, V. N. Sigaev, N. V. Golubev, E. Kh. Mamadzhanova, A. A. Sukhodola, A. Paleari, P. D. Sarkisov, A. N. Shimko // Materials Chemistry and Physics. – 2012. – V. 137. – P. 48.

УДК 535.8

С. С. Ануфрик¹, А. П. Володенков¹, К. Ф. Зноско¹

ПРИМЕНЕНИЕ XECL-ЛАЗЕРА ДЛЯ АБЛЯЦИОННОЙ ОБРАБОТКИ ЗУБНОЙ ТКАНИ

¹ Гродненский государственный университет им. Я.Купалы, ул. Ожешко, 22, 230023 Гродно, Беларусь a.volodenkov@grsu.by

Выполнено экспериментальное исследование по обработке зубной ткани (эмали) излучением XeCl-лазера. Для облучения зубной ткани использовался электроразрядный эксимерный лазер со следующими характеристиками: энергия импульса до E=30 мДж, длительность импульса по основанию 15 нс (τ =7,5 нс по полувысоте). При использовании фокусирующей линзы с фокусным расстоянием 10 см диаметр сфокусированного излучения составляет d=1мм. Максимальная плотность энергии сфокусированного излучения определялась по формуле: $Eyd = E/(\pi d^2/4) = 3.8$ Дж/см². Максимальная плотность мощности сфокусированного излучения определялась по формуле: $Pyd = E/(\tau \pi d^2/4) = 500$ МВт/см². Образцы зубной ткани облучались при использовании частоты повторения импульсов 1 Гц серией из 1000 импульсов. В таблице 1 представлена величина энергии, которая использовалась для экспериментов, и глубина образуемого кратера.

Таблица 1. Зависимость глубины кратера (после 1000 импульсов) от плотности энергии лазерного импульса.

Энергия импульса,	Плотность энергии,	Плотность мощности,	Глубина кратера, мкм
Дж	Дж/см ²	MBt/cm ²	
0,003	0,382	51	6
0,005	0,64	85	28
0,01	1,27	170	45
0,015	1,91	255	131
0,02	2,55	340	209
0,025	3,18	424	327
0,03	3,82	510	616

На рисунке 1 представлена зависимость глубины кратера от плотности энергии после 1000 импульсов.



Рис. 1. Зависимость глубины кратера от плотности энергии

Из представленной данных следует, что зависимость носит пороговый характер и при плотности энергии меньшей 0,3 Дж/см² процесс образования кратеров не наблюдается. По данным работы [1] при использовании XeCl лазеров с плотностью энергии 5 Дж/см², но с длительность импульса 60 нс получаются кратеры глубиной ~60 мкм при облучением 800 импульсами. Следует отметить, что определяющим фактором для глубины кратера является плотность мощности. По этому на рисунке 2 представлена зависимость глубины кратера от плотности мощности лазерного излучения после 1000 импульсов.



Рис. 2. Зависимость глубины кратера от плотности пиковой мощности излучения

Следует отметить, что получаются достаточно гладкие кратеры без следов обугливания (карбонизации), что указывает на то, что они образуются по абляционному механизму.

По данным работы [1] при использовании XeCl лазеров с длительностью импульса 60 нс порог абляции эмали зуба составляет ~ 2 Дж/см² и обнаружено, что при плотности энергии 1 Дж/см² происходит эффективное удаление зубного камня, но при этом не наступает абляция эмали зуба.

В нашем случае при использовании XeCl лазеров с длительностью импульса 7,5 нс порог абляции эмали зуба составляет ~ 0,3 Дж/см² и обнаружено, что при плотности энергии большей 0,15 Дж/см² происходит эффективное удаление зубного камня, но при этом не наступает абляция эмали зуба.

Поэтому излучение XeCl лазера может быть использовано для удаления зубного камня с поверхности зубов без повреждения эмали.

В заключение отметим, что разработана методика и техника транспортирования лазерного излучения и управления его параметрами для абляционной обработки биологических объектов. Проведена обработка зубной эмали УФ излучением и определена зависимость величины абляции от плотности пиковой мощности излучения лазера и общего числа облучающих импульсов.

Folwaczny M. . Substance removal on teeth with and without calculus using 308 nm XeCl excimer laser radiation - an in vitro investigation. / M. Folwaczny, A. Mell, C. Haffner, R. Hickel / J. Clin. Periodontol. – 1999. – V. 26. -P. 306-312.

УДК 543.42:621.373

С.В. Васильев, А.Ю. Иванов

ВОЗДЕЙСТВИЕ ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОБРАЗЕЦ, НАХОДЯЩИЙСЯ В ЖИДКОСТИ

Гродненский государственный университет им. Я.Купалы ion_ne@mail.ru

Излучение рубинового лазера, работавшего в режиме свободной генерации, пройдя через фокусирующую систему, направлялось на поверхность облучаемого металлического образца, расположенного в кювете, наполненной жидкостью. Плотность потока воздействующего излучения варьировалась от 10^6 до 5×10^7 Bt/cm², длительность лазерного импулься составляла 1,5 мс. Развитие парогазового образования у поверхности металлического образца исследовалось при помощи скоростной голографической киносъемки. Кювета помещалась в одно из плеч интерферометра Маха – Цендера, который освещался излучением зондирующего рубинового лазера. Интерферометр был состыкован co скоростной фоторегистрирующей камерой, работавшей в режиме лупы времени, что. обеспечивало временное разрешение не хуже 0.8 мкс и пространственное разрешение по полю объекта ~50 мкм. Исследования показали, что парогазовое образовние активно росло в течение 0,5 мс и сохранялось в течение не менее 1 мс после завершения воздействия лазерного воздействия на мишень. Рельеф кратера принципиально отличался от получаемого при воздушном окружении облучаемого образца, что может быть объяснено характером течения газов и водяного пара в парогазовом образовании. На поверхности кратера образовывались гидрооксиды металлов, которые после извлечения образца из кюветы трансформировались в оксиды.

УДК 535.012, 535.327

П. А. Лойко¹, В. В. Филиппов², К. В. Юмашев¹, Н. В. Кулешов¹, А. А. Павлюк³

ОПТИЧЕСКАЯ АТЕРМАЛЬНОСТЬ ЛАЗЕРНЫХ КРИСТАЛЛОВ ДВОЙНЫХ ВОЛЬФРАМАТОВ $KRE(WO_4)_2$ (RE = Gd, Y, Lu)

¹ Научно-исследовательский центр оптических материалов и технологий, Белорусский национальный технический университет, пр. Независимости 65/17, 220013 Минск, Беларусь

<u>kinetic@tut.by</u>

² Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

v.filippov@dragon.bas-net.by

³ Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, пр. Акад. Лаврентьева, 3, 630090 Новосибирск, Россия

Моноклинные кристаллы двойных вольфраматов $KRE(WO_4)_2$ (где RE = Gd, Y или Lu), активированные ионами Yb³⁺ или Tm³⁺, в настоящее время широко используются в качестве активных сред лазеров с диодной накачкой (в том числе генерирующих импульсы сверхкороткой длительности). Данные материалы характеризуются низким коэффициентом теплопроводности (к~3Вт/мК) [1], что в совокупности с существенной анизотропией физических свойств приводит к возникновению в активном элементе сильной астигматической термической линзы. Ее влияние на выходные характеристики лазера может быть уменьшено путем использования особых атермальных направлений распространения излучения в кристалле [1,2]. Данная работа посвящена определению ориентаций таких направлений для кристаллов двойных вольфраматов. Атермальным направление, для которого температурно-обусловленное изменение является оптического пути в резонаторе равно нулю, $W = dn/dT + (n-1)\alpha_n = 0$ (т.н. конфигурация «лазерного резонатора»). Здесь n, dn/dT – показатель преломления и его температурный коэффициент, α_n – коэффициент теплового расширения [1]. Кристаллы KRE(WO₄)₂ являются оптически двухосными и характеризуются тремя главными значениями dn_i/dT (i = p, m, g). Для их определения было использовано два независимых метода: отклонения лазерного пучка в среде с линейным градиентом температуры и модифицированный метод минимальных отклонений, учитывающий изменение размеров и формы образца под действием анизотропного термического расширения. Компоненты тензора коэффициентов термического расширения α (в системе осей оптической индикатрисы это диагональные элементы α_p , α_m и α_g и недиагональные $\alpha_{mg} = \alpha_{gm}$) были найдены с использованием дилатометрического метода. Полученные значения dn/dT для кристалла KGd(WO₄)₂ приведены на Рис. 1.

Существование атермальных направлений в кристаллах $KRE(WO_4)_2$ обусловлено отрицательными значениями коэффициентов dn/dT и высокой анизотропией эффекта термического расширения. В общем случае условие существования атермальных направлений определяется выражением $(n-1)n\alpha n+dn/dT=0$, где n – единичный вектор, определяющий направление распространения излучения в кристалле. В качестве базиса использовалась система ортов u_p , u_m и u_g . При этом учитывалось, что произвольной

ориентации вектора *n* соответствует два различных значения показателя преломления n_+ и n_- для волн с взаимно ортогональными векторами индукции D_+ и D_- .



Рис. 1 Зависимость главных температурных коэффициентов показателя преломления от длины волны излучения для кристалла KGd(WO₄)₂

С точки зрения лазерных применений интерес представляют поляризации света $E||N_{\rm m}$ и $E||N_{\rm p}$, соответствующие наибольшим поперечным сечениям поглощения и испускания для активированных кристаллов двойных вольфраматов. Соответствующие атермальные направления расположены в плоскости главных осей $N_{\rm p}$ - $N_{\rm g}$ и $N_{\rm m}$ - $N_{\rm g}$. Для кристалла KLu(WO₄)₂ для поляризации света $E||N_{\rm m}$ данные направления образуют углы ±54.5°, а для поляризации света $E||N_{\rm p}$ – углы 12.1° и 66.6° с направлением оси $N_{\rm g}$ (длина волны ~1мкм). Общий случай иллюстрирует Рис. 2. Здесь угол $\theta = n^{4}u_{\rm g}$, ψ – угол между вектором $u_{\rm p}$ и проекцией вектора n на плоскость $N_{\rm p}$ - $N_{\rm m}$.

Использование предложенных атермальных направлений для вырезки активных элементов из кристаллов двойных вольфраматов *KRE*(WO₄)₂ позволит существенно улучшить выходные характеристики лазеров на их основе.



Рис. 2 Ориентации атермальных фазовых направлений в кристалле KLu(WO₄)₂ (длина волны ~1мкм, конфигурация «лазерного резонатора»)

- [1] Biswal, S.P. Thermo-optical parameters measured in ytterbium-doped potassium gadolinium tungstate / S. Biswal, S. O'Connor, S. R. Bowman // Appl. Opt. 2005. Vol. 44. P. 3093.
- [2] Vatnik, S. Thermo-optic coefficients of monoclinic KLu(WO₄)₂ / S. Vatnik, M. C. Pujol, J. J. Carvajal, X. Mateos, M. Aguiló, F. Díaz, V. Petrov // Appl. Phys. B. 2009. Vol. 95. P. 653.

УДК 539.104:537.311.33:621.315.5

П. П. Трохимчук

РЕЛАКСАЦИОННАЯ ОПТИКА. НЕОБХОДИМОСТЬ СИНТЕЗА И ПРОБЛЕМЫ РАЗВИТИЯ И ПРИМЕНЕНИЯ

Восточноевропейский национальный университет им. Леси Украинки, пр. Воли, 13, 43025 Луцк, Украина trope@univer.lutsk.ua, trope@yandex.ru

Релаксационная оптика (PO) возникла из проблемы технологического использования лазерного излучения. В более узком смысле это раздел физики необратимого воздействия лазерного излучения с веществом [1, 2]. В более широком смысле это раздел физики, что изучает процессы релаксации первичных оптических возбуждений в среде [2]. Релаксация может быть излучательной, что собственно и есть оптикой в общепринятом смысле этого слова, и безизлучательной, что относится к PO в более узком смысле этого слова. Грубо говоря, PO есть синтезом квантовой электроники, радиационной физики твердого тела и физики критических явлений [1].

В основу РО положена феноменологическая хронологически-энергетическая классификация процессов взаимодействия оптического излучения из веществом. Эта классификация позволяет выбирать методы моделирования наблюдаемых явлений из различных разделов современной физики и физической химии. Благодаря этой классификации В рамках каскадной модели последовательного насышения возбуждения соответствующих типов химических связей удалось с единой точки зрения объяснить такие явления как генерация лазерного излучения, дробление кванта падающего излучения, фазовые трансформации облученного материала и хаотизацию лазерного излучения (проблема Хакена) в антимониде индия, кремнии, германии и аллотропных фазах углерода, включая алмаз и графит [1, 2].

Связь РО с нелинейной оптикой можно проследить на основании классификации возможных явлений основанной на разложении вектора Пойнтинга (тензорных произведений тензоров диэлектрической и магнитной проницаемости среды, включая их комплексную часть) в ряд по степеням напряженностей электрического и магнитного полей [2]. Практически это есть расширением нелинейной оптики на магнитные явления и на безилучательную часть взаимодействия оптического излучения с веществом [2]. Эта классификация позволяет качественно определить взаимовлияние эффектов релаксационной и нелинейной оптики [2]. Это, в первую очередь, процессы переизлучения (оптический Urca-процесс) и процессы лазерноиндуцированных фазовых трансформаций, включая образование наноструктур [2].

В рамках РО были положительно решены проблемы лазерного отжига, лазерного легирования и разрушения различных материалов (от диэлектриков до металлов) [1, 2].

Одним из важных малоизученных вопросов РО есть проблема влияния и изменения поляризации излучения на процессы взаимодействия оптического излучения с веществом [2]. Поляризация излучения играет важную роль в процессе лазерноиндуцированного формирования рельефа наноструктур. Если падающее излучение имеет плоскую поляризацию, то образуются двумерные интерференционные картины; эллиптическую – нанохолмы (наносекундный режим облучения) и наноколонны (фемтосекундный режим облучения) [2, 3]. Для лазерного сверления лучше использовать азимутальную поляризацию [3]. Использование фемтосекундного режима облучения для образования наноструктур позволило решить проблему тепловых и ионизационных (плазменных) механизмов в пользу последних [2, 3]. Наносекундные наноструктуры (нанохолмы) в 15–20 раз ниже, чем фемтосекундные (наноколонны), а это обозначает, что тепловые процессы влияют только на обратные процессы, т.е. возвращение системы в исходное стабильное состояние [2], а сами наноструктуры образуются, согласно С.А. Ахманова, нетепловыми механизмами [2].

Учет спектрального состава лазерного излучения и природы центров поглощения этого излучения позволяет расширить область применения РО. В этом случае лазерное излучение может быть использовано для фотостимулированного "отжига" дефектов и снятия неоднородностей, которые возникают в элементах оптоэлектронных систем при их продолжительной эксплуатации, и таким образом увеличить ресурс и надежность как элементов в отдельности, так и систем в целом [1].

- Trokhimchuck P.P. Foundations of Relaxed Optics. Lutsk: Volyn' University Press "Vezha", 2011. – 627 p.
- [2] Trokhimchuck P.P. Nonlinear and Relaxed Optical Processes. Problems of Interactions. Lutsk: Vezha-Print, 2013. – 280 p.
- [3] Макин В.С., Макин Р.С. Резонансное взаимодействие радиально поляризованого лазерного излучения с конденсированной средой. / Сб. научных трудов II-ой Всероссийской конференции по фотонике и информационной оптике, 23–25 января 2013 года. – Москва: НИЯУ МИФИ, 2013. – С.97–98.

УДК 539.293; 621.382

В. В. Паращук

ОПТИМИЗАЦИЯ МЕТОДОВ ПОЗИЦИОНИРОВАНИЯ ЧИПОВ В ПРОЦЕССЕ СБОРКИ МОЩНЫХ ДИОДНЫХ ЛАЗЕРОВ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАНБ, пр. Независимости 68, 220072 Минск, Беларусь <u>v.parashchuk@ifanbel.bas-net.by</u>

Известно, что технологическая операция установки (позиционирования) чипов на теплоотводящих основаниях в процессе сборки диодных лазеров существенно влияет на многие их характеристики, но наиболее существенно сказывается на тепловых режимах и, как следствие - на энергетических параметрах и ресурсе приборов [1]. Соответствующее требование заключается в точности расположения выходного (переднего) зеркала диодного чипа относительно рабочей кромки теплоотвода, на котором он номинально располагается с целью избежания эффекта виньетирования излучения. Допустимое значение данного параметра находится в области нескольких микрон. Ниже врамках разработанного ранее метода расчета тепловых полей (трехмерное приближение) в приближенной к реальной лазерной системе диодтеплоотвод [2] численно промоделировано влияние процесса позиционирования лазерного чипа на пространственное распределение в системе термоупругих напряжений (рис.) и выявлены оптимальные условия данного процесса.

Рассмотрено приближение типа $\sigma i j = \sigma i j(x,y)$ (i,j=1,2,3) [3] при различных условиях, в том числе для случая отсутствия теплоотвода (предельные режимы), и при его наличии.



Рис. 1. $\Delta \varepsilon = 0$ (*a*), ± 5 мкм (δ); $n_1 = m_1 = 100$, P = 1 Вт, $a_0 = 10^{-3}$; $\lambda = 0.05$ Вт/м·К; a = b = 1.5 мм, c = 0.3 мм, $l_1 = 0.5$ мм, $l_2 = 0.1$ мм [2]. Влияние точности позиционирования ($\Delta \varepsilon$) лазерного чипа на величину и характер термоупругих напряжений в моделируемой системе

Приведены результаты для нормальной составляющей σхх≡D тензора напряжений, характеризующейся наибольшими значениями (показана часть кристалла). С целью упрощения расчетов использована интерполяция в виде полиномов второй степени и выше. Параметры задачи определялись на основании анализа обобщенного

закона Гука и условий равновесия и совместимости деформаций Сен-Венана с учетом соответствующих краевых условий и функции напряжения Эйри [3,4].

При расположении полоски активной области (источника) в центре кристалла, картина формируемых термоупругих напряжений симметрична по отношению к сечению || XOZ, проходящему через продольную ось полоски, и к произвольным поперечным сечениям || YOZ, т. е. для противоположных сторон указанной области. Видно, что напряжения концентрируются преимущественно по периметру источника (на его краях). Их знак на длинных и коротких сторонах полоски может быть как одинаковым, так и разным, а также изменяться на каждой из сторон полоски. Эти результаты в определенной степени соответствуют данным [5], полученным численным методом конечных элементов для случая закрепления диода на теплоотводе (контактная задача) и относящихся к остаточным напряжениям. Обращает внимание величина максимальных напряжений ~ 100 MPa, формируемых в обоих случаях, что указывает на необходимость учета напряжений рассматриваемого типа в различных задачах термоупругости.

При смещении источника к краю кристалла указанная выше симметрия картины напряжений нарушается, а при совпадении короткой стороны (передней кромки) источника с рабочей гранью кристалла YOZ значения σx здесь минимальны или близки к нулю, что соответствует случаю точного позиционирования $\Delta \varepsilon = 0$ (рис. а). Такая ситуация имеет место как при наличии теплоотвода, так и в его отсутствие. При отклонении от указанных условий, когда величина наружного выступа (или внутреннего уступа) передней кромки превышает значение $\Delta \varepsilon = \pm 5$ мкм, в соответствующей области возникает всплеск напряжений, значительно (в несколько раз) превышающий максимальные напряжения на остальных сторонах источника. Этот факт может быть использован для диагностики качества посадки лазерного чипа и как эффективный метод позиционирования в процессе сборки диодных структур. Из данных расчета также следует, что использование теплоотвода приводит к существенному относительному уменьшению всплеска термоупругих напряжений на передней кромке активной области при уменьшении точности позиционирования.

В рамках используемого подхода, учитывающего влияние термоупругих напряжений, проанализирована роль продольной и поперечной геометрии позиционирования на величину перегрева активной области диода для медных и алмазных теплоотводов. Найдены оптимальные условия работы диодного лазера при различных режимах работы.

- Loosen Peter. Cooling and Packaging of High-Power Diode Lasers / Edit. R. Diehl: High-Power Diode Lasers, Topics Appl. Phys. – 2000. - Vol. 78. - P. 289-301.
- [2] Паращук В.В., Русаков К.И., Vu Doan Mien и др. Моделирование процессов электротеплового взаимодействия в диодной лазерной системе // Вестник БрГТУ. Физика, математика, информатика. 2010, № 5. С. 89-94.
- [3] Тимошенко С.П., Гудьер Дж. Теория упругости М., 1979.-560 с.
- [4] Трехмерные задачи математической теории упругости и термоупругости / Под ред. В.Д. Купрадзе. М., 1976.
- [5] Шерстнев В.А., Кузьмин А.Н., Рябцев Г.И. Термоупругие напряжения в системе лазерный диод-хладопровод // Весці АН БССР. 1987, № 4. С. 75-80.

УДК 533.9: 621.373.826 /:539.2

А.Н. Чумаков¹, И.С. Никончук¹, Н.А. Поклонский², Н.И. Горбачук², В.Е. Обухов³

ЛАЗЕРНАЯ МОДИФИКАЦИЯ АЛМАЗОПОДОБНЫХ УГЛЕРОДНЫХ ПЛЕНОК С ОБРАЗОВАНИЕМ ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩИХ СТРУКТУР

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

chumakov@imaph.bas-net.by

² Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220050 Минск,

Беларусь

gorbachuk@bsu.by

³ НИЦ "Плазмотег" ФТИ НАН Беларуси, ул. Купревича, 1/3, 220141 Минск, Беларусь

Лазерные технологии могут быть использованы для создания резисторных [1] и других приборных структур практически любой конфигурации на базе пленок алмазоподобного углерода (АПУ). В работе исследовалось влияние лазерного излучения (ЛИ) на электрическое сопротивление пленок АПУ. Пленки АПУ толщиной 0,7–1,2 мкм осаждались на ситалловые подложки. Модификация осуществлялась лазерным излучением с длиной волны $\lambda = 532$ нм. Диаметр пятна излучения — 0,3 мм, режим работы лазера — импульсный (длительность импульса $\tau = 17$ нс, частота — $2 \le f \le 10$ Гц). Энергетическая экспозиция за время импульса составляла 0,4–4 Дж/см². В процессе модификации пленки линейно перемещались со скоростью v = 0,2 см/с.

Исходные пленки АПУ имели удельное сопротивление ≥ 10⁸ Ом см. В результате воздействия ЛИ сопротивление пленок уменьшалось. На рисунке 1 для двух частот следования импульсов представлены зависимости поверхностного сопротивления ρ_s пленок АПУ от энергии накачки лазера, используемого для модификации пленок. Вид-



Рис 1. Зависимость поверхностного сопротивления пленок АПУ от энергии накачки лазера

но, что поверхностное сопротивление зависит как от энергии накачки лазера (и соответственно от экспозиции за время импульса), так и от частоты следования импульсов. При одинаковых значениях энергии накачки лазера по мере увеличения частоты повторения импульсов от 5 до 10 Гц поверхностное сопротивление может уменьшаться почти на 3 порядка (в связи с увеличением площади перекрытия модифицированных областей). При постоянной частоте повторения

лазерных импульсов сопротивление пленок нелинейно падает с ростом энергии накачки. Так, при частоте 5 Гц максимальное снижение ρ_s (почти на полтора порядка величины) наблюдается с ростом энергии накачки с 16.5 до 17 Дж. Дальнейший рост накачки до 18.5 Дж вызывает уменьшение поверхностного сопротивления лишь в 3 раза. Это может быть связано с уменьшением толщины пленки вследствие частичного ее испарения, с пороговым характером перестройки межатомных связей, в результате которой пленка АПУ переходит в проводящее состояние, либо с перколяционным характером образования кластеров электропроводящей фазы. Для проверки данной гипотезы и определения состава высокопроводящей фазы методом КРС проводилось исследование исходных и модифицированных пленок.

Полученные спектры КРС исходной (1) и модифицированных ЛИ пленок представлены на рис. 2. На спектре исходной пленки (1) наблюдается сигнал, являющийся суперпозицией D и G полос. Доминирует полоса G с максимумом при 1525 см⁻¹. Подобный спектр КРС характерен для пленок аморфного тетраэдрического углерода с до-



Рис. 2. Спектры КРС исходной (1) и лазерномодифицированных пленок АПУ: 2 — энергия накачки 19 Дж, 3 — 19,5 Дж, 4 — 20 Дж, 5 — 20,5 Дж, 5 — 21 Дж

минированием *sp*³-гибридизованных связей [2]. Лазерная модификация АПУ пленки приводит к уменьшению ширины как D, так и G полосы. При этом амплитуда сигнала D полосы растет с увеличением энергии накачки с 19 Дж до 19,5-20 Дж. С ростом накачки до 21 Дж амплитуда сигнала КРС уменьшается, что связано с эрозией пленки. В спектрах КРС пленки, модифицированной при накачке 19,5 Дж, отчетливо разрешается полоса D с максимумом при 1343 см⁻¹ и полоса G с максимумом при 1596 см⁻¹. В интервале 1130–1150 см⁻¹ наблюдается особенность спектра, которая может быть интерпретирована как известная полоса

T, происхождение которой связывают либо с изогнутыми графеновыми слоями [3], либо с sp^3 -гибридизованным углеродом [2]. Спектры КРС с отношением интенсивностей *D* и *G* полос ~2 и максимумом *G* полосы в окрестности 1600 см⁻¹ характерны для нанокристаллического графита [2]. Сопоставление полученных результатов и данных [2] позволяет предположить, что в результате воздействия ЛИ происходит формирование в АУП наноразмерных включений sp^2 -гибридизованного углерода.

Таким образом, при импульсном лазерном облучении с энергетической экспозицией 0,4–4 Дж/см² в пленках АПУ формируются электропроводящие структуры с поверхностным сопротивлением от тысяч до единиц кОм/ \Box . Рост проводимости пленок связан с образованием и ростом областей sp^2 -гибридизованного углерода, а при определенной мощности ЛИ наблюдается образование кластеров нанокристаллического графита.

- [1] Армеев В.Ю.Формирование электропроводных линий на алмазоподобных углеродных пленках методом лазерного рисования / В.Ю. Армеев// Письма в ЖТФ.– 1990.– Т. 16.– С. 54.
- [2] Ferrari A.C. Resonant Raman spectroscopy of disordered, amorphous, and diamondlike carbon / A.C. Ferrari, J. Robertson // Phys. Rev. B.- 2001.- V. 64.- P. 075414.
- [3] Tan, P.H. Raman scattering of non-planar graphite: arched edges, polyhedral crystals, whiskers and cones / P.H. Tan, S. Dimovsky, Yu. Gogotsi // Phil. Trans. R. Soc. Lond.– 2004.– V. 362.– P. 2289.

УДК 543.42:621.373

С.С.Ануфрик, В.Ч.Белаш, С.В. Васильев, А.Ю. Иванов, А.В.Копыцкий

ТЕРМОДИФФУЗИЯ МЕТАЛЛОВ ПРИ НЕРАЗРУШАЮЩЕМ ИМПУЛЬСНОМ ЛАЗЕРНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

Гродненский государственный университет им. Я.Купалы <u>s.vasilijev@grsu.by</u>

Излучение рубинового лазера ГОР-100М, работавшего в режиме свободной фокусирующую систему, генерации. пройдя через направлялось облучаемый металлический образец. Плотность потока воздействующего излучения варьировалась от 10⁴ до 5×10⁵ Вт/см². Элементный состав мишени до и после облучения исследовался с использованием рентгеновского спектрометра ElvaX. Исследования показали, что содержание некоторых элементов в приповерхностном слое образца после нразрушающей лазерной обработки существенно изменяется. В частности, при воздействии на тонкий (несколько мкм) слой никеля, нанесенный на подложку из титана, носле облучения концентрация титана в приповерхностном слое значительно (в 1,5 раза и более) увеличивалась. Содержание других примесей (кобальт, хром, железо и др.), имевшихся в незначительном количестве (десятые доли процента) в приповерхностном слое, практически не изменялось. Существенно, что концентрация титана монотонно увеличивалась при увеличении плотности потока воздействующего лазерного излучения в указанном интервале. Это свидетельствует об активной диффузии металла из подложки в покрытие в зоне импульсного нагревания образца лазерным излучением.

УДК 621.37/.39:621.9.048.7 С. В. Шалупаев, А. Н. Сердюков, Ю. В. Никитюк, А. А. Середа

АНАЛИЗ ДВУЛУЧЕВОГО ЛАЗЕРНОГО ТЕРМОРАСКАЛЫВАНИЯ В РАМКАХ ЛИНЕЙНОЙ МЕХАНИКИ РАЗРУШЕНИЯ

УО «Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины», ул. Советская, 104, 246019 Гомель, Беларусь shalupaev@gsu.by

В рамках теорий термоупругости и линейной механики разрушения на основе разработанного алгоритма выполнено конечно-элементное моделирование процесса развития лазерно-индуцированной трещины в силикатных стеклах при двулучевом лазерном управляемом термораскалывании, схема которого представлена на рисунке 1. Согласно [1] в качестве критерия разрушения можно использовать коэффициент интенсивности напряжений К_I в вершине лазерно-индуцированной трещины. При этом в качестве необходимых условий роста трещины были приняты следующие критерии: напряжения в вершине трещины должны быть растягивающими; коэффициент интенсивности напряжений в вершине трещины должен превышать критический коэффициент интенсивности напряжений K_{IC} (для силикатного стекла K_{IC}=0.5 МПа м^{1/2}) [2]. Были выполнены расчеты температурных полей и полей термоупругих напряжений возникающих в образце, а также расчеты значений коэффициентов интенсивности напряжений в вершинах лазерно-индуцированной трещины для следующих параметров материала и режимов обработки. В качестве материала образца выбрано силикатное стекло вертикальной вытяжки, плотность которого $\rho=2740$ кг/м³, модуль упругости, коэффициент Пуассона и коэффициент температурного расширения полагались соответственно равными E=73.5 ГПа, v=0.214, $\alpha_{\rm r}$ =90·10⁻⁷ (1/°С). Излучение CO₂-лазера



 1 – пучок CO₂-лазера;
 2 – пучок YAG-лазера;
 3 –. хладагент
 Рис. 1 – Схема двулучевого управляемого лазерного формируется в пучок с поперечным сечением в виде эллипса с размерами большой и малой осей 7 и 2 мм соответственно. Хладагент в виде мелкодисперсной воздушно-водяной смеси формируется на поверхности материала в виде круга диаметром 5 мм и подается непосредственно за лазерным пучком, обеспечивая отведения тепла с поверхности материала с коэффициентом теплоотдачи равным $6800 \text{ Bt/(m^2K)}.$

Излучение YAG-лазера моделировалось как объемный цилиндрический тепловой источник (радиус в поперечном сечении 1 мм) с заданной объемной плотностью мощности. Значение объемной плотности мощности рассчитывается для каждого слоя конечных элементов с

использованием закона Бугера-Ламберта-Бера и рассчитанного коэффициента экстинкции α=86,129 м⁻¹.

В качестве образца выбрана пластина толщиной 3 мм и геометрическими размерами 20х30 мм. Скорость обработки выбрана равной 20 мм/с, мощность пучка CO₂-лазера 20 Вт, YAG-лазера – 140 Вт.

По рассчитанным значениям напряжений и коэффициентов интенсивности напряжений в вершинах трещины на каждом шаге решения, а также по координатам узлов определена глубина развития, и форма разделяющей трещины.

На рисунке 2 представлен расчетный профиль лазерно-индуцированной трещины. Как видно из представленного рисунка профиль трещины имеет характерный прогиб. Именно такой профиль наблюдается при разделении силикатных стекол методом управляемого лазерного термораскалывания в соответствии со схемой,

приведенной на рисунке 1, что показывает адекватность разработанного алгоритма Как моделирования. показывают результаты моделирования, расчетная глубина трещины почти два раза выше, нежели в случае однолучевой обработки с использованием в качестве источника излучения СО₂-лазера при тех же параметрах обработки. Двукратное





увеличение глубины трещины наблюдается на эксперименте.

- [1] Сиратори, М. Вычислительная механика разрушения / М. Сиратори, Т. Миеси, Х. Мацусита; пер. с японск. М.: Мир, 1986. 334 с.
- [2] Shahani, A. R. Simulation of glass cutting with an impinging hot air jet / A. R. Shahani, M.Seyedian // International journal of solids and structures. -2004.-Vol. 41, № 5-6. -P. 1313-1329.
- [3] Кикоин, И. К. Таблицы физических величин: справочник / И. К. Кикоин, В. Г. Аверин, Б. А. Аронзон; под ред. И. К. Кикоина. –М.: Атомиздат, 1976. –1008 с.

УДК 621.37/.39:621.9.048.7

Е.Б. Шершнев, Ю.В. Никитюк, С.И. Соколов

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ДВУХЛУЧЕВОЙ ЛАЗЕРНОЙ СВАРКИ КВАРЦЕВОГО СТЕКЛА

Учреждение образования «Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины», ул. Советская, 104, 246019 Гомель, Беларусь <u>sokolov@gsu.by</u>

Основными недостатками традиционных методов сварки кварцевого стекла являются низкая точность и производительность. Использование лазерного излучения позволяет добиться более высокой производительности и точности благодаря высокой концентрации энергии в лазерном пучке и высокой точности локализации лазерного излучения.

В настоящее время успешно применяются двухлучевые схемы сварки металлов [1], поэтому представляется целесообразным проведение исследований аналогичных двухлучевых схем в случае лазерной сварки кварцевых стекол.

Разработан алгоритм для проведения компьютерного моделирования процессов лазерной двухлучевой сварки кварцевого стекла, в которой используется 2 лазера с различной длиной волны. При этом выбор длин волн лазерного излучения осуществлялся из условия поверхностного поглощения для одного из используемых лазеров и объемного поглощения для другого.

Выполнены расчеты температурных полей в среде ANSYS для следующих случаев лазерной сварки кварцевых стекол:

1) двухлучевая суперпозиционная сварка

2) двухлучевая последовательная сварка.

Для оценки эффективности использования двухлучевой технологии, полученное распределение температурных полей сравнивалось с распределением температурных полей при однолучевой сварке.

При расчетах была учтена зависимость теплофизических свойств материала от температуры. Анализ результатов показал, что учет зависимости теплофизических свойств приводит к уменьшению максимальной расчетной температуры в зоне сварки в 1,7 раза.

Установлено, что при использовании суперпозиционной схемы удается достичь большей глубины проплавления, чем при однолучевом варианте обработки. Показано, что использование последовательной схемы обеспечивает снижение максимальных значений температуры на обрабатываемой поверхности, при одновременном ее увеличении в объеме материала по сравнению с однолучевым вариантом обработки.

[1] Григорьянц А.Г., Шиганов И.Н., Чирков А.М. Гибридные технологии лазерной сварки: Учебное пособие. - М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2004. - 52 с.

УДК 535.42

А. И. Водчиц, В. А. Орлович, П. А. Апанасевич

НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ ВАНАДАТОВ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>a.vodchits@dragon.bas-net.by</u>

Кристаллы широко применяются ванадатов В лиодно-накачиваемых твёрдотельных лазерах [1]. По сравнению с другими кристаллами ванадаты характеризуются более широкой полосой поглощения при накачке и большим поперечным сечением индуцированного излучения. Что же касается нелинейнооптических свойств ванадатов, как то нелинейная рефракция и поглощение, которые могут существенно влиять на генерационные характеристики лазеров, то такие свойства ванадатов изучены пока недостаточно полно. В данном докладе мы представляем результаты исследований нелинейно-оптических свойств ряда кристаллов ванадатов в видимом и ближнем инфракрасном (ИК) диапазоне спектра методом однопучкового Z-сканирования [2, 3].

Ранее, используя данный метод, нами были измерены показатели нелинейного преломления и коэффициенты двухфотонного поглощения кристаллов нитрата бария, вольфрамата бария, KGW, KYW, KYbW на длинах волн 790 и 395 нм [2, 3]. Было показано, что данные кристаллы имеют значительное по величине нелинейное преломление и поглощение, которые существенно усиливаются в ультрафиолетовом диапазоне спектра.

Следует отметить, что кристаллы ванадатов являются комбинационноактивными, и в них может происходить вынужденное комбинационное рассеяние (ВКР) лазерного излучения. Этот нелинейный оптический процесс, будучи возбуждённым, может исказить результаты исследований на основе метода Zсканирования. Поэтому, в измерениях применялись сверхкороткие лазерные импульсы и тонкие образцы кристаллов, чтобы устранить возбуждение ВКР в образцах, увеличивая существенно порог его появления.

В наших экспериментах использовался пикосекундный АИГ:Nd лазер, генерирующий импульсы излучения на длинах волн 1064 и 532 нм с частотой следования 20 Гц. Длительность импульсов составляла 80 пс на длине волны 1064 нм и 60 пс на длине волны 532 нм. Оптическая схема однопучкового Z-сканирования хорошо известна [2, 3]. В нашем случае линейно-поляризованный пучок лазерного излучения фокусировался в исследуемые образцы кристаллов с помощью линз с фокусным расстоянием 25 - 35 см. В исследованиях применялись следующие кристаллы ванадатов: GdVO₄, Nd:GdVO₄, YVO₄, Nd:YVO₄, Gd_{0.64}Y_{0.36}VO₄, Yb:Gd_{0.64}Y_{0.36}VO₄ и Er,Yb:Gd_{0.64}Y_{0.36}VO₄. Образцы кристаллов имели срезы "а" и "с" и толщину 3 мм. В случае кристаллов, активированных ионами, концентрация ионов составляла 0.3 ат. %. Для измерения нелинейной рефракции использовалась диафрагма диаметром 2.5 мм, устанавливаемая на расстоянии 120 см от фокальной перетяжки пучка внутри кристалла. Нелинейное поглощение измерялось в другом канале без

диафрагмы. В качестве эталонного образца применялась кварцевая пластинка толщиной 3 мм.

Показатель нелинейного преломления определяется из соотношения для нелинейного изменения фазы поля излучения $\Delta \Phi_{nr}[2, 3]$:

$$\Delta \Phi_{nr} = (2\pi/\lambda) l_{eff} n_2 I_{\omega}. \tag{1}$$

Здесь λ - длина волны лазерного излучения, $l_{eff} = [1 - \exp(-\alpha_0 \cdot l)]/\alpha_0$ эффективная длина кристалла, l - его физическая длина, α_0 - линейный коэффициент поглощения кристалла, I_{ω} - интенсивность лазерного излучения в фокальной перетяжке пучка, n_2 – нелинейный показатель преломления.

Коэффициент нелинейного поглощения β определяется на основе соотношения для нелинейного изменения фазы в этом случае $\Delta \Phi_{na}$ [2, 3]:

$$2\Delta\Phi_{na} = \ln(1 + l_{eff}\beta I_{\omega}).$$
⁽²⁾

Полученные нами результаты показывают, что на длине волны 1064 нм кристаллы ванадатов имеют значительные величины нелинейного показателя преломления, изменяющиеся в зависимости от кристалла в диапазоне $n_2 = (11 - 22) \times 10^{-16}$ см²/Вт. Для кварца $n_2 = 2.1 \times 10^{-16}$ см²/Вт. Изменения нелинейной рефракции в зависимости от ориентации кристаллов относительно поляризации лазерного излучения были в пределах экспериментальных ошибок. Нелинейное поглощение не проявлялось в кристаллах на этой длине волны. В кристаллах, активированных ионами, наблюдалось ослабление нелинейной рефракции, что может быть обусловлено разными знаками вкладов в нелинейный показатель преломления от различных физических механизмов (электронный механизм, двухфотонные переходы, комбинационно-активные резонансы и др.).

На длине волны 532 нм ванадаты характеризуются нелинейной рефракцией и поглощением, которые значительно сильнее по сравнению с ближним ИК диапазоном и с таковыми величинами для других известных кристаллов. В частности, для кристалла $Gd_{0.64}Y_{0.36}VO_4$, срез "с" (ориентация параллельно поляризации излучения) измеренный нелинейный показатель преломления составляет $n_2 = 12 \times 10^{-15}$ см²/Вт, а коэффициент нелинейного поглощения $\beta = 2.4 \times 10^{-10}$ см/Вт. Кроме того, нами обнаружено, что в видимой области нелинейная рефракция и поглощение ванадатов существенно зависят от ориентации осей кристаллов относительно поляризации лазерного излучения.

- [1] Kalisky Y. The Physics and Engineering of Solid State Lasers (SPIE PRESS, Bellingham, Washington, 2006), Chap. 11.
- [2] Vodchits A. I., Kozich V. P., Orlovich V. A., Apanasevich P. A. Z-Scan studies of KYW, KYbW, KGW, and Ba(NO₃)₂ crystals / Opt. Communs. 2006. V. 263. P. 304-308.
- [3] Vodchits A. I., Orlovich V. A., Apanasevich P. A., Basiev T. T., and Zverev P. G. Nonlinear optical properties of BaWO₄ crystal / Opt. Mater. – 2007. – V. 29. – P. 1616-1619.

УДК 535.1

В. Н. Белый, Н.А. Хило, С. Н. Курилкина, Н. С. Казак

СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЕ УГЛОВОГО МОМЕНТА БЕССЕЛЕВЫХ СВЕТОВЫХ ПУЧКОВ В КРИСТАЛЛАХ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь s.kurilkina@ifanbel.bas-net.by

Распространяющийся в заданном направлении световой пучок обладает как спиновым угловым моментом (СУМ), связанным с его поляризацией, так и орбитальным угловым моментом (ОУМ), зависящим от профиля волнового фронта [1-2]. Для параксиального светового пучка в однородной изотропной среде спиновая и орбитальная компоненты углового момента могут быть разделены. Однако они оказываются связанными в неоднородной или анизотропной среде. Динамика спинпреобразования углового момента циркулярно поляризованных орбитального гауссовых пучков, распространяющихся вдоль оптической оси однородного одноосного кристалла, изучена в работах [3, 4]. При этом оказано, что эффективность подобного преобразования в данном случае не может превышать 50%. В настоящем сообщении исследована динамика взаимного преобразования спиновой и орбитальной составляющих углового момента бесселевых световых пучков (БСП).

Показана возможность и определены условия полного преобразования право параксиального циркулярно поляризованного БСП нулевого порядка J_0 распространяющегося вдоль оптической оси двуосного кристалла и обладающего $\sigma^+ = \hbar / \phi OTOH$, только спиновым угловым моментом в лево циркулярно поляризованный БСП первого порядка J_l со спиновым ($\sigma^- = -\hbar/\phi$ отон) и орбитальным ($\sigma^l = \hbar/\phi$ отон) моментами. Поскольку полный угловой момент поля на выходе из кристаллической пластинки равен нулю, изменение углового момента при взаимодействии с двуосным кристаллом равно – \hbar/ϕ отон. Следовательно, в процессе взаимодействия J₀ БСП с пластинкой из двуосного кристалла каждый фотон отдает пластинке угловой момент, равный \hbar , в результате чего пластинка испытывает вращение. Предложена схема, позволяющая осуществить данное оптическое вращение (рис.1). Обосновано, что изменение углового момента и вращающий момент пластинки из двуосного кристалла оказываются не зависящими от топологического заряда падающего БСП. Установлено, что изменяя угол конусности падающего J_m БСП, оказывается возможным управление полным угловым моментом поля на выходе кристаллической пластинки.

Показана возможность и найдены условия полного преобразования право циркулярно поляризованного J_0 БСП, распространяющегося вдоль оптической оси одноосного кристалла и обладающего только спиновым угловым моментом $\sigma^+ = \hbar/\phi$ отон, в лево циркулярно поляризованный J_2 БСП как со спиновым ($\sigma^- = -\hbar/\phi$ отон), так и с орбитальным ($\sigma^l = 2\hbar/\phi$ отон) моментами. Таким образом, в результате взаимодействия БСП с пластинкой из одноосного кристалла оказывается возможной генерация орбитального углового момента у невортексного пучка (рис.2).



Рис. 1. Схема для наиболее эффективного осуществления оптического вращения кристаллической пластинки с помощью бесселева светового пучка



Рис. 2. Схема наиболее эффективной генерации орбитального углового момента у невортексных световых полей с помощью одноосного кристалла

Полные угловые моменты поля на входе и выходе из кристаллической пластинки равны и, в отличие от двуосного кристалла, вращения пластинки не происходит. Однако, изменяя направление поляризационного вращения падающего пучка можно управлять генерируемым орбитальным моментом. Обнаружено, что осуществить подобное высокоэффективное спин-орбитальное преобразование удается в достаточно широком диапазоне углов конусности параксиальных БСП за счет соответствующего подбора толщины кристаллической пластинки.

- Allen L. Orbital angular momentum of light and the transformation of Laguerre -Gaussian laser modes/ L. Allen, M. W. Beijersbergen, R. J. C. Spreeuw, J. P. Woerdman// Phys. Rev. - 1992. - A 45. - P. 8185–8199.
- [2] Vasnetsov M. Optical Vortices/ M. Vasnetsov, K. Staliunas// Horizons of World Physics. - 1999. -V.228.
- [3] Ciattoni A. Circularly polarized beams and vortex generation in uniaxial media/ A. Ciattoni, G. Cincotti, C. Palma// J.Opt.Soc.Am. 2003. A. 20. P.163-171.
- [4] Dynamics of optical spin-orbit coupling in uniaxial crystals/ E. Brasselet [et al]// Opt. Lett.- 2009. - V.34. - P. 1021-1023.

Г.С.Митюрич¹, В.В. Свиридова², А.Н. Сердюков²

ЛАЗЕРНАЯ ФОТОАКУСТИЧЕСКАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ГИРОТРОПНЫХ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР

¹ Белорусский торгово-экономический университет, пр. Октября, 50, 246029, Гомель, Беларусь <u>george_mityrich@mail.ru</u> ² Гомельский государственный университет им. Ф.Скорины, ул. Советская, 104, 246028, Гомель, Беларусь <u>serdyukoy@gsu.by</u>

В последние годы возрастает интерес исследователей к изучению низкоразмерных структур, в частности, к пространственно-периодическим средам типа сверхрешеток. Такая структура обладает, помимо периодического потенциала кристаллической решетки, дополнительным потенциалом, обусловленным чередующими слоями материала.

В данной работе приведены исследования термооптической генерации звука различными модами бесселевых световых пучков в естественно гиротропных и магнитоактивных сверхрешетках. Выполнено решение уравнений Максвелла в бесселевых цилиндрической системе координат для световых пучков, распространяющихся в поглощающих сверхрешетках с естественной и вынужденной (эффект Фарадея) гиротропией. Получены выражения для скорости диссипации ТЕ- и ТН-мод бесселевых световых пучков и найдено распределение тепловых полей в естественно гиротропных и магнитоактивных сверхрешетках. Показано, что в отличии от диссипации плоских монохроматических электромагнитных волн диссипация квазибездифракционных световых полей имеет особенность, связанную с возникновением радиальной и азимутальной составляющих потоков энергии.

Определены амплитудно-фазовые характеристики фотоакустического сигнала возбужденного бесселевыми световыми пучками в естественно гиротропных и магнитоактивных сверхрешетках для двух типов регистрации результирующего отклика – методом газомикрофонной ячейки и с помощью пьезоэлектрического детектора. В области высоких частот модуляции внешнего излучения в случае пьезорегистрации сигнала, обнаружены резонансные явления, которые могут быть использованы для повышения разрешающей способности метода пьезофотоакустической спектроскопии.

Показана возможность управления термооптической генерацией акустических волн, возбуждаемых световыми пучками с бесселевым профилем распределения интенсивности, поглощаемые естественно гиротропными и магнитоактивными сверхрешетками. Управление амплитудой и распределением интенсивности звуковых полей достигается путем формирования требуемых мод бесселевых световых пучков, за счет использования аксиконов с регулируемым углом конусности. Существует также возможность изменения скорости диссипации энергии бесселевых световых пучков путем воздействия внешнего магнитного поля на гиротропную сверхрешетку, вследствие чего изменяется величина магнитного циркулярного дихроизма. УДК 537.87

V.N. Kapshai¹, A.A. Shamyna¹, V.V. Kondratjuk²

RESONANCE STRUCTURE OF THE SCATTERING CROSS SECTIONS IN THE MIE PROBLEM AND THE AMPLITUDES IN THE COMPLEX PLANE

¹ Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины, ул. Советская, 104, 246000 Гомель, Беларусь

kapshai@rambler.ru; oxota13@tut.by

² Гомельский государственный технический университет им. П.О. Сухого, пр-т Октября, 48, 246000 Гомель, Беларусь valeria kondratjuk@tut.by

The talk is devoted to the study of the scattering and extinction cross sections behavior in the case of electromagnetic plane monochromatic wave scattering by a bilsotropic sphere of radius *R* imbedded in another bilsotropic medium. Electromagnetic properties of bilsotropic media are described by the constitutive relations $\vec{D} = \varepsilon \vec{E} + (\chi + i\alpha)\vec{H}$; $\vec{B} = (\chi - i\alpha)\vec{E} + \mu\vec{H}$. For solving the boundary problem we use the theory of spherical vectors $\vec{Y}_{JM}^L(\vec{n}_r)$ and the spherical waves $\vec{F}_{JvM}^{(z)}(k|\vec{r})$ [1-3]:

$$\vec{E}_{\nu}^{in}(\vec{r}) = \sum_{J=1}^{\infty} E_J \vec{F}_{J\nu\nu}^{(j)}(k_{\nu} \mid \vec{r}); \quad \vec{H}_{\nu}^{in}(\vec{r}) = -\sum_{J=1}^{\infty} E_J b_{\nu} \vec{F}_{J\nu\nu}^{(j)}(k_{\nu} \mid \vec{r});$$
(1)

This allows to represent the solution in the form

$$\vec{E}_{v}^{sct}\left(\vec{r}\right) = -\sum_{J=1}^{\infty} E_{J} \sum_{\sigma=\pm 1} f_{\sigma v}^{J} \vec{F}_{J\sigma v}^{(h^{1})}\left(k_{\sigma} \mid \vec{r}\right); \quad \vec{E}_{v}^{prt}\left(\vec{r}\right) = \sum_{J=1}^{\infty} E_{J} \sum_{\sigma=\pm 1} g_{\sigma v}^{J} \vec{F}_{J\sigma v}^{(z)}\left(k_{\sigma}^{1} \mid \vec{r}\right); \\ \vec{H}_{v}^{sct}\left(\vec{r}\right) = \sum_{J=1}^{\infty} E_{J} \sum_{\sigma=\pm 1} f_{\sigma v}^{J} b_{\sigma} \vec{F}_{J\sigma v}^{(h^{1})}\left(k_{\sigma} \mid \vec{r}\right); \quad \vec{H}_{v}^{prt}\left(\vec{r}\right) = -\sum_{J=1}^{\infty} E_{J} \sum_{\sigma=\pm 1} g_{\sigma v}^{J} b_{\sigma}^{J} \vec{F}_{J\sigma v}^{(z)}\left(k_{\sigma}^{1} \mid \vec{r}\right); \quad (2)$$

$$E_{J} = E_{0} \sqrt{2\pi (2J+1)} i^{J}; \quad b_{\sigma} = \left(\chi + i\sigma \sqrt{\varepsilon\mu - \chi^{2}}\right) / \mu; \quad k_{v} = \left(\sqrt{\varepsilon\mu - \chi^{2}} + v\alpha\right) \omega / c .$$

The boundary conditions for the electric and magnetic fields at the interface between two media yields a system of algebraic equations for the expansion coefficients from which one can determine the coefficients $f_{\sigma\nu}^J$ and $g_{\sigma\nu}^J$ of the scattered and internal fields.

To obtain the scattering and extinction cross sections one should use the Pointing vector for the field outside the scattering particle, it may be written as

$$\vec{S} = \operatorname{Re}\left[\vec{E}, \vec{H}^*\right] = \vec{S}^{in} + \vec{S}^{sct} + \vec{S}^{ext};$$
(3)

$$\vec{S}^{ext} = \operatorname{Re}\left\{ \left[\vec{E}^{in}, \vec{H}^{sct^*} \right] + \left[\vec{E}^{sct}, \vec{H}^{in^*} \right] \right\}; \quad \vec{S}^{sct} = \operatorname{Re}\left[\vec{E}^{sct}, \vec{H}^{sct^*} \right]; \quad \vec{S}^{in} = \operatorname{Re}\left[\vec{E}^{in}, \vec{H}^{in^*} \right], \quad (4)$$

where \vec{S}^{in} (\vec{S}^{sct}) is the Pointing vector of the incident (scattered) field and \vec{S}^{ext} is the term due to the interaction between the incident and scattered waves. The energy flux trough a sphere of radius r > R ($\Phi^{abs} = -\int \vec{S} d\vec{\sigma}$) may be written as the sum

$$\Phi^{abs} = \Phi^{in} - \Phi^{sct} + \Phi^{ext}; \quad \Phi^{sct} = \int \vec{S}^{sct} d\vec{\sigma}; \quad \Phi^{ext} = -\int \vec{S}^{ext} d\vec{\sigma}; \quad \Phi^{in} = -\int \vec{S}^{in} d\vec{\sigma}.$$
(5)

The Pointing vector's modulus of the incident wave is $I^{in} = |\vec{S}^{in}| = \mu^{-1} \sqrt{\epsilon \mu} - \chi^2 E_0^2$.

The scattering and extinction cross sections are obtained in the following forms:
$$\sigma_{\nu}^{sct} = \frac{\Phi^{sct}}{I^{in}} = 4\pi \sum_{J=1}^{\infty} (2J+1) \sum_{\sigma=\pm 1} \left| f_{\sigma\nu}^{J} \right|^{2} \frac{1}{k_{\sigma}^{2}};$$
(6)

$$\sigma_{\nu}^{ext} = \frac{\Phi^{ext}}{I^n} = 2\pi \sum_{J=1}^{\infty} (2J+1) \sum_{\sigma=\pm 1} \operatorname{Re} \left[f_{\sigma\nu}^J (1+\sigma\nu) / k_{\sigma} k_{\nu} \right].$$
(7)

The results for the scattering cross section (6) and extinction cross section (7) obtained have been studied by numerical calculations performed in the Mathematica system (fig.1). At the electromagnetic processes describing it is convenient to use the efficiency factor of extinction (scattering), which is defined as the cross section, divided by the particle radius squared (or by πR^2). The dependence of this factor on the parameter R/λ was calculated and this corresponds to the efficiency factor dependence on the radius at a fixed frequency of the incident radiation.



Fig. 1. Plot for the partial extinction cross section on the complex *kR* -plane: $v=1; J=1; \chi=0.1; \varepsilon=1.1; \mu=1; \alpha=0.1; \chi=0.1, \varepsilon_1=1.3; \mu=1.1; \alpha=0.3.$

In this paper the scattering and extinction cross sections are calculated in the case of the plane circularly polarized electromagnetic wave scattering on a biisotropic sphere embedded in another biisotropic environment. The behavior of individual partial terms of the cross sections is analysed on the complex plane kR. Maximums (fig. 1) can be explained by existence of the poles of the amplitudes f_{av}^J near the real kR-axis.

- [1] Годлевская, А.Н. Рассеяние электромагнитных волн на сферически симметричных частицах в естественно гиротропной среде / А.Н. Годлевская, В.Н. Капшай // Опт. и спектр. 1990. Т. 68, № 1. С. 122–127.
- [2] Капшай В.Н., Резонансная структура сечений рассеяния и экстинкции в проблеме Ми для биизотропного шара / В.Н. Капшай, А.А. Шамына, В.В. Кондратюк // Проблемы физики, матеатики и техники. – 2011. - № 4 (9). С. 28-32.
- [3] Капшай, В.Н. Рассеяние электромагнитных волн на биизотропном шаре в биизотропной среде / В.Н. Капшай, В.В. Кондратюк // Проблемы физики, математики и техники. 2010. № 3 (4). С. 7-21.

УДК 621.785.048.7 С.Ф. Кукин¹, А.С. Малоштан², А.С. Кукин¹, В.В. Жарский³, О.Г. Девойно⁴, А.Н. Лебедев¹, И.В. Емельянович¹, Н.В. Спиридонов⁴

МОДЕРНИЗАЦИЯ ОПТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ЛАЗЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ УСТАНОВОК ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ И КАЧЕСТВА ПРОЦЕСОВ ЛАЗЕРНОГО ТЕРМОУПРОЧНЕНИЯ ПОВЕРХНОСТЕЙ ДЕТАЛЕЙ

¹ РУП «Минский тракторный завод», ул. Долгобродская, 29, 220009, Минск, Республика Беларусь ² Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Республика Беларусь ³ООО «Рухсервомотор», ул. Монтажников, 5, 220019, Минск, Республика Беларусь ⁴Белорусский Национальный Технический Университет, пр. Независимости, 65, 220013, Минск, Республика Беларусь

Основными параметрами, характеризующими эффективность и качество процесса лазерного термоупрочнения, являются: равномерность по глубине получаемого упрочненного слоя; сохранение исходной шероховатости и микрорельефа обрабатываемой поверхности; максимальная производительность процесса при эксплуатационных минимальных затратах. Технологическими факторами, оказывающих свое влияние на вышеуказанные параметры процесса лазерного термоупрочнения поверхностей деталей являются геометрическая форма пятна лазерного луча на обрабатываемой поверхности и закон распределения плотности энергии в нем [1]. На РУП «МТЗ» разработана и внедрена технология лазерного термоупрочнения поверхностей деталей тормозных и фрикционных механизмов тракторов «Беларус» осуществляемых излучением волоконного лазера в составе лазерной технологической установке MLS-2-3DF-B. Особыми требованиями к технологии лазерного термоупрочнения деталей тормозной системы и фрикционных механизмов тракторов «Беларус» является конструктивная необходимость получения равномерных по глубине сплошных упрочненных слоев шириной не менее 8 мм, и толщиной упрочненного слоя 0,4...0,7мм, без искажения исходной шероховатости и микрорельефа поверхности. С целью снижения затрат на опытно-экспериментальные технологических режимов работы по определению оптимальных лазерного термоупрочнения с помощью программного комплекса ANSYS были рассчитаны оптимальные конфигурации температурных полей для лазерного термоупрочнения деталей тормозных (материал чугун СЧ-20) и фрикционных механизмов (материал сталь 45 и 45X, рис. 1(б)) тракторов «Беларус», с целью получения требуемых по качеству и конфигурации упрочненных слоев.

По результатам проведенных расчетов и исследований установлено, что, для получения оптимального температурного поля по глубине и ширине зоны лазерного воздействия, необходимо прямоугольное пятно лазерного излучения размером 0,6х8,0 мм, а распределение плотности мощности лазерного излучения по длине пятна должно соответствовать закону, представленному на рис. 1(а).

Оптическая система лазерной установке MLS-2-3DF-В сканирующим лазерным лучом, особенностью которой является наличие двух подвижных однокоординатных зеркал и обеспечивающих сканирование лазерного луча в ДBVX взаимно перпендикулярных плоскостях позволяет получать прямоугольное пятно лазерного излучения на обрабатываемой поверхности со ступенчатым изменением плотности мощности от q_{max} до q_{och}. Глубина профиля зоны упрочнения при использовании данной оптической системы в пределах изменения плотности мощности от q_{max} до q_{och} . плавно изменяется от минимального значения на самом краю до номинального значения. Практическая эксплуатация оптической системы сканирующим лазерным лучом показала, что периодически необходима перенастройка оптических элементов, из-за ухода пространственного положения подвижных зеркал от первоначального положения, а также замены оптических элементов, из-за их малого срока службы.

Вышеуказанных недостатков лишена разработанная РУП «МТЗ» совместно с Институтом Физики НАНБ статическая оптическая система преобразования Гауссового лазерного излучения в прямоугольное пятно с требуемым законом распределения плотности мощности [2,3]. Данная система позволяет получать практически равномерную глубину упрочненного слоя по всей ширине следа лазерной обработки за один проход лазерного луча.



Рис. 1. (а) Оптимальное распределение плотности мощности по длине пятна лазерного луча на обрабатываемой поверхности деталей при сканировании перпендикулярно плоскости рисунка. (б) Распределение температуры по глубине и ширине зоны лазерного воздействия при обработке деталей из стали 45.

- [1] Hoffmann P., Dierken R. Recent Developments of System Technology for Surface Treatment // Proc. 5d European Conf. "Surface Treatment and Ablation". LANE 2007 2 Vol. Eds. M. Geiger, A. Otto, M. Schmidt / Vol. 2. - P. 715-721.
- [2] Патент №2449029 (RU) МКИ С21D 1/09, G02B 13/00 Способ лазерного термического упрочнения поверхностей изделий из железоуглеродистых сплавов / Кукин С.Ф., Девойно О.Г., Спиридонов Н.В. Баркун А.А., Емельянович И.В., Лебедев А.Н., Кукин А.С., Яровой Б.Ю. (ВҮ).- №2010141309/02; Заяв.07.10.2010.
- [3] Патэнт №15948 (ВҮ) МКИ С21D 1/09, G02B 27/09, G02B 27/10 Способ лазерного термического упрочнения поверхности изделия из железоуглеродистого сплава / Кукин С.Ф., Девойно О.Г., Спиридонов Н.В. Баркун А.А., Емельянович И.В., Лебедев А.Н., Кукин А.С., Яровой Б.Ю.

С.А. Назаров, Д.В. Горбач

ЧЕТЫРЕХ- И ШЕСТИВОЛНОВЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГАУССОВЫХ И СИНГУЛЯРНЫХ ПУЧКОВ В РАСТВОРЕ КРАСИТЕЛЯ РОДАМИН 6Ж

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь <u>sanazarov@tut.by</u>

Многоволновые взаимодействия в средах с тепловой нелинейностью представляют собой научный и практический интерес, вследствие возможности преобразования различных характеристик лазерного излучения (фазы, поляризации, топологического заряда и т.д.)

Для реализации четырехволнового взаимодействия (ЧВВ) в нелинейную среду под небольшим углом направляются два пучка, опорный и сигнальный, которые записывают динамическую голограмму. Считывание голограммы осуществляется пучком, направляемым точно навстречу опорному пучку, в результате чего формируется дифрагированный пучок с волновым фронтом тождественным волновому фронту сигнального пучка и распространяющийся ему навстречу – происходит обращение волнового фронта. Условие брэгговской дифракции в высшие порядки может быть выполнено за счет изменения направления распространения считывающей волны или ее частоты. Если угол между опорной и считывающей волной равен половинному углу между опорной и сигнальной волной (в случае малых углов), то имеет место шестиволновое взаимодействие (ШВВ) [1]. Использование в качестве одной или нескольких взаимодействующих волн оптических вихрей позволяет решать различные задачи по преобразованию и передаче топологического заряда при многоволновых взаимодействиях [2].

С целью оптимизации эффективности ЧВВ и ШВВ с использованием гауссовых и сингулярных световых пучков были проанализированы зависимости интенсивности дифрагированной волны от концентрации красителя родамин 6Ж и пространственного рассогласования оптических путей взаимодействующих волн. Анализ многоволнового взаимодействия с использованием сингулярных световых пучков проводился при использовании оптического вихря в качестве сигнальной волны.

Экспериментальные результаты представлены на рис. 1. Из рис.1, *а* видно, что оптимальная концентрация раствора красителя родамин 6Ж при ЧВВ меньше, чем при ШВВ при одинаковой общей интенсивности волн накачки порядка 10 МВт/см². Это объясняется тем, что для реализации ШВВ необходимо увеличить концентрацию красителя для более раннего выхода на участок нелинейной зависимости коэффициента поглощения от интенсивности светового излучения. Зависимость интенсивности дифрагированной волны от концентрации раствора красителя родамин 6Ж при многоволновых взаимодействиях с сингулярной сигнальной волной носит характер аналогичный зависимости, полученной с участием только гауссовых пучков. Оптимальное значение концентрации составило $4 \cdot 10^{-5}$ моль·л⁻¹ и $7 \cdot 10^{-5}$ моль·л⁻¹ для ЧВВ и ШВВ соответственно.

Влияние рассогласования оптических путей на характер многоволнового взаимодействия также имеет свои особенности. Из рис.1, *б* видно, что ШВВ более чувствительно к рассогласованию оптических путей записывающих голограмму волн, чем ЧВВ.



Рис.1. Зависимости интенсивности дифрагированного пучка от концентрации красителя родамин 6Ж (*a*), от разности оптических путей сигнальной и опорной волн (*б*, *в*).

Рис.1, в показывает более высокую чувствительность ЧВВ к рассогласованию оптических путей записывающих голограмму волн при использовании сингулярной сигнальной волны обусловленную более сложной реализацией эффективного перекрытия гауссова и сингулярного пучков. Такая же зависимость наблюдается и при ШВВ.

Таким образом, проведенные экспериментальные исследования позволили определить оптимальные значения концентрации раствора красителя родамин 6Ж и допустимые величины рассогласования оптических путей записывающих голограмму волн при реализации ЧВВ и ШВВ с использованием в качестве сигнальной волны как гауссова, так и сингулярного световых пучков.

[1]. Толстик А.Л. Многоволновые взаимодействия в растворах сложных органических соединений. / А.Л. Толстик. – Минск: БГУ, 2002. –С. 6-10.

[2]. Романов О.Г. Частотное преобразование оптических вихрей при невырожденном многоволновом взаимодействии в растворах красителей / О.Г. Романов, Д.В. Горбач, А.Л. Толстик // Оптика и спектроскопия. – 2010. – Т.108. – №5. – С.812-817.

Д. В. Горбач¹, О. Г. Романов¹, А. П. Сухоруков², А. Л. Толстик¹

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ГАУССОВЫХ И СИНГУЛЯРНЫХ СВЕТОВЫХ ПУЧКОВ В СРЕДАХ С ТЕПЛОВОЙ НЕЛИНЕЙНОСТЬЮ

¹ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь romanov@bsu.by

² Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

В работе экспериментально и теоретически проанализированы закономерности некогерентного взаимодействия гауссовых и сингулярных световых пучков в средах с тепловой нелинейностью. Проанализированы два режима взаимодействия световых пучков: 1) режим полного внутреннего отражения, реализующийся в схеме наклонного падения гауссового сигнального светового пучка на оптическую неоднородность, сформированную в нелинейной среде мощным гауссовым пучком накачки; 2) режим волноводного распространения гауссового сигнального светового пучка в среде с градиентом показателя преломления подобным профилю обычного световода, создаваемым мощным сингулярным световым пучком.

Экспериментальная реализация эффекта нелинейного отражения световых пучков в среде с тепловой нелинейностью основана на создании локализованной пространственной области с отрицательным изменением показателя преломления. Такая область может быть сформирована в растворе поглощающего органического красителя с отрицательным термооптическим коэффициентом (dn/dT < 0) при воздействии мощного лазерного импульса (пучка накачки). Распространяясь в растворе красителя, лазерный пучок создает неоднородное распределение температуры в поперечном сечении нелинейной среды. В результате возникает градиент показателя преломления, и мощный опорный пучок становится непрозрачным объектом для наклонной волны другой частоты. Для экспериментальной реализации режима отражения в качестве нелинейной выбраны нелинейного среды растворы полиметиновых красителей, которые поглощают излучение на основной длине волны генерации лазера на иттрий-алюминиевом гранате (λ = 1064 нм) и практически прозрачны в видимой области спектра. Лазер работал в режиме активной модуляции добротности с частотой следования импульсов v = 1 – 10 Гц. Интенсивность пучка накачки варьировалась в пределах $I_0 = 100 - 1500 \text{ MBt/cm}^2$. В качестве сигнального пучка использовалось непрерывное излучение гелий-неонового лазера на длине волны $\lambda = 632.8$ нм, направляемое в кювету с красителем под углом $\gamma \sim 10 - 20$ мрад, близким к углу полного внутреннего отражения от наведенной лазером накачки тепловой линзы. При ланных **VСЛОВИЯХ** наблюдалось отражение сигнального пучка. распространяющегося под небольшим углом к пучку накачки от области светоиндуцированной неоднородности показателя преломления.

Для преобразования гауссового пучка накачки в вихревой пучок использовался голографический транспарант, в первом порядке дифракции излучения на котором формировался сингулярный световой пучок, внешний диаметр которого на входе в

нелинейную среду составлял 400 мкм, а диаметр внутренней «сердцевины» – порядка 200 мкм. В результате воздействия такого светового пучка на поглощающий раствор красителя в среде индуцировалась динамическая структура с градиентом показателя преломления подобным профилю показателя преломления обычного световода. Таким образом, мощный опорный сингулярный пучок формировал волновод для сигнального гауссового пучка распространяющегося соосно с ним. Зафиксированные изменения поперечного распределения интенсивности сигнального пучка на выходе из нелинейной среды при увеличении мощности пучка накачки, представленные на рис. 1, позволяют говорить о том, что в среде формируется волноводная структура изменения показателя преломления. Так, рис. 1, а показывает поперечное распределение интенсивности сигнального пучка на выходе из нелинейной среды в отсутствие излучения накачки. На рис. 1, б, в видно, что с увеличением мощности пучка накачки размер сигнального пучка на выходе постепенно уменьшается. Заметные изменения в распределении излучения сигнального пучка происходили при интенсивности пучка накачки $I = 200 \text{ MBt/cm}^2$, а при увеличении интенсивности до $I = 700 \text{ MBt/cm}^2$ поперечный размер сигнального пучка уменьшился в три раза (рис. 1, в).



Рис. 1 Распределение интенсивности сигнального пучка на выходе из нелинейной среды в отсутствие пучка накачки (*a*), при интенсивности пучка накачки $I = 400 \text{ MBt/cm}^2(6), 700 \text{ MBt/cm}^2(6)$

Для объяснения закономерностей преобразования поперечной структуры сигнального светового пучка при отражении от пространственно-неоднородной тепловой линзы, наводимой в растворе красителя пучком накачки, и в условиях волноводного распространения разработана теоретическая модель, учитывающая как динамику изменения показателя преломления среды под действием мощного светового импульса, так и объемный характер взаимодействия световых пучков. В результате численного решения системы нелинейных волновых уравнений и уравнения теплопроводности установлены параметры среды и излучения, при которых имеют место эффекты полного внутреннего отражения, частичного туннелирования светового пучка через оптическую неоднородность, а также волноводного распространения.

- [1] Горбач Д. В. Нелинейное взаимодействие и отражение некогерентных световых пучков / Д. В. Горбач, О. Г. Романов, А. П. Сухоруков, А. Л. Толстик // Известия РАН. Сер. Физическая. – 2010. – Т. 74. – № 12. – С. 1706.
- [2] Горбач Д. В. Формирование динамических волноводных структур в средах с тепловой и резонансной нелинейностью / Д. В. Горбач, О. Г. Романов, А. П. Сухоруков, А. Л. Толстик // Известия РАН. Серия физическая. – 2011. – Т. 75. – №12. – С. 1737.

А. А. Казак, А. Л. Толстик, Е.А. Мельникова

УПРАВЛЕНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИЕЙ СВЕТОВЫХ ПУЧКОВ С ПОМОЩЬЮ ЖК-Элементов

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь <u>kazakAA@bsu.by</u>

Наряду с традиционными сферами использования жидких кристаллов (индикаторы, дефлекторы, модуляторы света) в последнее время активно исследуются пути создания управляемых элементов, формирующих световые поля с необходимыми свойствами. Одним из направлений развития методов управления световыми полями является разработка жидкокристаллических элементов, позволяющих изменять не только пространственную структуру пучка, но и контролировать его поляризационные характеристики.

В данной работе представлены результаты разработки управляемых жидкокристаллических элементов на основе нематического жидкого кристалла (ЖК) и фотополимерного ориентирующего слоя, позволяющих изменять поляризацию в поперечном сечении лазерного пучка, а так же дифракционные жидкокристаллические элементы, обеспечивающие ортогональные поляризации лазерного излучения в зависимости от четности порядков дифракции.

Основной особенностью разрабатываемых элементов является то, что формирование анизотропной ЖК структуры осуществляется посредством пространственно-неоднородной ориентации молекул ЖК фотополимерным ориентирующим покрытием при фотополимера ультрафиолетовым засветке излучением с заданным пространственным распределением интенсивности и поляризации [1]. Таким образом, в местах засветки фотополимера создается необходимая твист-структура (Т-деформация ЖК), определяющая оптические свойства элемента и его возможности для управления поляризацией лазерного излучения. В результате проведенной работы были разработаны ЖК ячейки, при прохождении которых линейно поляризованный световой пучок приобретает поляризацию (радиальную или азимутальную) в соответствии с распределением поляризации засвечивающего излучения.

Так же представлен метод создания дифракционных электрически управляемых жидкокристаллических твист-структур, обеспечивающих поворот плоскости поляризации лазерного пучка в зависимости от приложенного напряжения. Управление поляризацией обеспечивается как для плоских, так и для сингулярных оптических пучков, формируемых этими элементами.

[1] Управление световыми полями с помощью дифракционных жидкокристаллических элементов / А.А. Казак, Е.А. Мельникова, А.Л. Толстик // Оптический журнал. – 2010. – Т. 7. – С. 72.

УДК:535.36

В.А. Ковтун – Кужель¹, Р.А. Дынич², А.Н. Понявина²

ВЛИЯНИЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ ЦИЛИНДРОВ НА ИХ БЛИЖНЕПОЛЕВЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

¹УО «Гродненский государственный университет им. Я. Купалы», ул. Ожешко, 22, г. Гродно, Беларусь

kaf_radiofiz@grsu.by ²Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости,68, г. Минск, Беларусь

Численные исследования картин распределения ближних полей (КРБП) для единичного цилиндра необходимы для того, чтобы выявить предпосылки электродинамического взаимодействия в системах таких цилиндров. Ранее на основе формализма объемного интегрального уравнения (ФОИУ) проводилось изучение зависимости КРБП единичных цилиндров конечной длины от их размеров, длины волны падающего излучения, диэлектрических свойств окружающей их среды [1].

В настоящей работе с помощью (ФОИУ) для прямых и инверсных систем исследовано влияние на КРБП диэлектрической проницаемости материала цилиндров. Под инверсными системами понимаются структуры, для которых показатель преломления окружающей среды превышает показатель преломления включенных в нее цилиндров. Диаметр исследуемых частиц равен 100нм, длина – 1500нм.

На рисунке 1 (панель 1) в представлены ближнеполевые картины для цилиндра с диэлектрической проницаемостью ε =8 (керамика), находящегося в воздухе. Как видно из данной иллюстрации, «горячие пятна» располагаются по краям цилиндра. Есть также области (в передней полусфере), куда переместились «горячие пятна». Значение максимально достижимого коэффициента усиления интенсивности составляет k_{max} =1.5.

1			
	x=674,27	y=331,78	z=2729,19
2			
	x=48,43	y=48,43	z=798,43
3			
	x=57,81	y=57,81	z=823,43

Рис. 1. КРБП для одиночного цилиндра из керамики – верхняя панель, керамического цилиндра в органическом стекле – средняя панель и воздушной поры в керамике – нижняя панель. Длина волны падающего излучения 300 нм

На панели 2 и 3 приведены картины распределения ближних полей для керамического цилиндра, помещенного в органическое стекло (ε=3) и воздушной

неоднородности в керамической среде, соответственно. Значение максимального коэффициента усиления интенсивности для первого и второго случая близки и равны примерно k_{max} =0,3. Обратим внимание на то, что особых различий в ближнеполевых картинах, представленных на панелях 2 и 3, не наблюдается. Можно заметить только более значительный период модуляции внутреннего поля для керамического цилиндра в органическом стекле (сечения ZOX, ZOY) по сравнению с картиной внутреннего поля на тех же сечениях для воздушной частицы в керамике.

При изменении длины волны падающего излучения изменяются и картины распределения ближних полей (см. рисунок 2). Интенсивность горячих и холодных пятен для трех случаев принимает различные значения. На 1 панели изображены ближнеполевые картины для керамики, когда значение k_{max} = 0,2. В данном случае наблюдается немонотонное изменение интенсивности поля по всей длине частицы. Горячие пятна смещаются в переднюю полусферу. На панели 2, где представлены результаты для керамического цилиндра в оргстекле, КРБП характеризуются величиной k_{max} =1,5. Как видно из рисунка, в этом случае «горячие пятна» локализуются в центре частицы, вытесняя к краям «холодные пятна». Изображения, представленные на 3 панели, соответствующие инверсному случаю, иллюстрируют распределения с k_{max} =0,6. На данной панели и на рисунке 1 (панель 2) вид ближнеполевых картин подобен с одним отличием: интенсивность во втором случае равна k_{max} =0,3, как упоминалось ранее.



Рис. 2. КРБП для одиночного цилиндра из керамики – верхняя панель, керамического цилиндра в органическом стекле – средняя панель и воздушной поры в керамике – нижняя панель. Длина волны падающего излучения 600 нм

В данной работе провели сравнительное исследование картин распределения ближнего поля для отдельных цилиндров из керамики в воздухе, а также для инверсных сотовых структур с аналогичными размерными характеристиками.

[1] Ковтун – Кужель В.А. Локализация и рассеяние электромагнитного излучения в упорядоченных ансамблях конечных цилиндров / В.А. Ковтун – Кужель, Р.А. Дынич, А.Н. Понявина. Проблемы математики, физики и техники. – 2012. - №2(11). – С.27 – 33.

К. Н. Каплевский¹, М. П. Самцов¹, И. М. Гулис², Д. С. Тарасов², А. Е. Радько¹, К. А. Шевченко¹

ВОЗМОЖНОСТИ ЦИФРОВОЙ ФОТОКАМЕРЫ ДЛЯ МУЛЬТИЗОНАЛЬНОЙ СЪЕМКИ

¹НИУ "Институт прикладных физических проблем им. А.Н. Севченко" БГУ, ул. Курчатова, 7, 220045 Минск, Беларусь <u>kapleu@bsu.by</u>

² Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

В настоящее время в прикладной спектроскопии интенсивно развиваются новые методы, позволяющие получать и анализировать спектроскопическую информацию об объекте с разрешением по пространственным координатам [1]. Такие методы спектроскопии с пространственным разрешением (СПР) находят все более широкое применение в медицинской диагностике, дистанционном мониторинге земной поверхности, криминалистике, полиграфии, при экспертизе произведений искусства, в сельском и лесном хозяйстве, пищевой и фармацевтической промышленности для спектроскопии одиночных квантовых объектов и астрономических исследований. В связи с этим является актуальным развитие аппаратурной базы методов СПР.

В зависимости от круга решаемых задач в СПР используются следующие подходы в аппаратурной реализации. Аппаратура, основанная на мультиспектральной (мультизональной) съемке, обеспечивающей регистрацию «квазимонохроматических» изображений объектов в относительно небольшом числе относительно широких спектральных полос. Недостатки обусловлены обычно небольшим спектральным разрешением (десятки нанометров), низким спектральным контрастом вследствие широкополосного фонового пропускания и, соответственно, сниженной информативностью. Гиперспектрометры позволяют получить для каждой точки двумерного изображения объекта оптический спектр (гиперспектральное изображение), характеризующийся спектральным разрешением порядка единиц, а иногда и долей нанометров. К недостаткам следует отнести необходимость оперировать большими трехмерными массивами и значительное время для получения гиперспектрального изображения. Использование сканирующего конфокального микроскопа, сопряженного с дисперсионным спектрометром, также позволяет получить гиперспектральное изображение, однако время регистрации может оказаться большим при работе с большими участками объекта.

Во множестве практических применений приходится иметь дело с объектами распределение полезной информации, на которых является неоднородным: высокоинформативными оказываются некоторые малые участки, площадь которых существенно (часто на порядки) меньше площади всего объекта. Регистрация гиперспектрального изображения объекта целиком весьма нерационально, поскольку сопряжена с получением огромных массивов данных, подавляющая часть которых заведомо малоинформативная. В то же время, общий обзор объекта является необходимым условием выбора по определенным спектроскопическим критериям информационно-значимых участков для последующего более детального анализа с использованием микроспектрометрии.

В лаборатории спектроскопии НИИ ПФП им. А.Н. Севченко совместно с кафедрой лазерной физики и спектроскопии физического факультета БГУ проводится разработка видеомикроспектрометрического комплекса (ВМСК), предназначенного для анализа спектральных характеристик пространственно сложных объектов. Разрабатываемая аппаратура исключает выше перечисленные недостатки в существующих аппаратурных реализациях СПР и в тоже время обладает всеми их возможностями. В частности, для проведения предварительного анализа спектральных характеристик исследуемого объекта с помощью мультизональной съемки с целью обнаружения информационно-значимых участков предполагается использование цифровой фотокамеры Canon 1000D с набором светофильтров. Специфика такого применения требует от фотокамеры широкого динамического диапазона значений регистрируемых интенсивностей света (не менее 1000:1), а также линейной зависимости этих значений от светового потока, падающего на поверхность светочувствительного элемента.

Фотокамера Canon 1000D предоставляет возможность получения информации с каждого светочувствительного пикселя в необработанной форме (RAW), что позволяет проводить оценки интенсивностей попадающего на них света. В этой связи, нежелательным является то, что для получения цветного изображения каждый светочувствительный пиксель накрыт светофильтром одного из трех основных цветов (RGB), причем зеленых фильтров в два раза больше (фильтр Байера). С другой стороны, наличие светофильтров обеспечивает мультизональную съемку в трех спектральных диапазонах одновременно и эту возможность можно использовать в разрабатываемой аппаратуре для грубой спектральной фильтрации изображения объекта. В ходе исследования возможностей применения выбранной фотокамеры было разработано оригинальное программное обеспечение, позволяющее получать и проводить анализ четырех изображений, построенных из пикселей под красными, синими и зелеными фильтрами.

Полученные результаты демонстрируют техническую возможность с помощью фотокамеры проводить мультизональную съемку в трех спектральных каналах, а также достаточно линейную зависимость цифрового сигнала в широком диапазоне (порядка 2500 отн. ед.), что, безусловно, позволит в дальнейшем использовать эту камеру для разрабатываемого комплекса аппаратуры в качестве регистратора мультиспектральных изображений.



Рис. 1. Зависимость интенсивности регистрируемого сигнала от относительной освещенности светочувствительной матрицы для трех спектральных каналов (R – красный, B – синий, G – зеленый). В качестве светящегося объекта использован белый светодиод

Рис. 2. Зависимость интенсивности регистрируемого сигнала от времени экспозиции для трех спектральных каналов (R – красный, B – синий, G – зеленый). В качестве светящегося объекта использован белый светодиод

[1] Воропай, Е.С. Мультиобъектный спектрометр с микрозеркальной матрицей / Е.С. Воропай [и др.] // Журн. прикл. спектр. – 2010. – Т. 71, № 2. – С. 305–312.

УДК 535.4; 53.5

А. В. Макаревич¹, М. В. Дубина¹, В. В. Шепелевич¹, С. Ф. Ничипорко¹, П. И. Ропот², С. М. Шандаров³

ГОЛОГРАФИЧЕСКИЙ ИНТЕРФЕРОМЕТР НА ОСНОВЕ ФОТОРЕФРАКТИВНЫХ КРИСТАЛЛОВ ДЛЯ КОНТРОЛЯ ИЗМЕНЕНИЯ ТОЛЩИНЫ ПОКРЫТИЙ ОПТИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ

¹ Мозырский государственный педагогический университет им. И.П. Шамякина, ул. Студенческая, 28, 247760 Мозырь, Беларусь <u>aleksandr_makarevich@inbox.ru</u> ²Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси,

пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь ³Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, пр. Ленина, 40, 634050 Томск, Россия

В ряде работ, например [1], показана возможность применения фоторефрактивных кристаллов (ФРК) силленитов Bi₁₂SiO₂₀ и Bi₁₂TiO₂₀ (BTO) среза (110) для интерферометрических исследований с использованием приложенного к кристаллу внешнего электрического поля. Проведенные нами исследования образца ВТО толщиной 7,7 мм аналогичного среза дали возможность реализовать оптическую схему голографического интерферометра, позволяющего проводить изучение прозрачных и непрозрачных объектов в реальном времени, в частности, осуществлять контроль изменения толщины покрытий таких объектов, без использования электрического поля, приложенного к кристаллу.

В основу работы интерферометра, оптическая схема которого представлена на рисунке 1, положен принцип применения опорной системы интерференционных полос, создаваемых до начала проведения мониторинга объекта. Создание опорной системы интерференционных полос осуществлялось посредством небольшого поворота пьезоэлектрического зеркала 5 вокруг оси ОО'.



Рис.1 Оптическая схема голографического интерферометра для контроля изменения толщины зеркальных и прозрачных объектов: 1 – Не-Ne лазер, 2 – коллиматор, 3 – светоделительный кубик, 4 –глухое зеркало, 5 – пьезоэлектрическое зеркало, 6 – фоторефрактивный кристалл, 7 – ослабитель, 8 –ПЗС-датчик, 9 –персональный компьютер, 10 – стеклянная пластинка

Моделирование изменения толщины зеркально отражающего объекта осуществлялось посредством пьезозеркала 5, на которое медленно подавалось постоянное электрическое напряжение. Изменение толщины прозрачного объекта моделировалось поворотом стеклянной пластинки 10, которая устанавливалась на пути предметного пучка.

На рисунках 2 и 3 представлены 3 последовательных кадра видеозаписи смещения опорной системы интерференционных полос при повороте стеклянной пластинки (рисунок 2) и при приложении напряжения к пьезоэлектрическому зеркалу (рисунок 3).



Рис. 2 Последовательное смещение интерференционных полос при повороте стеклянной пластинки: рамкой белого цвета выделена произвольно выбранная светлая интерференционная полоса, смещение которой происходит влево относительно горизонтальной оси



Рис. 3 Последовательное смещение интерференционных полос при приложении напряжения к пьезоэлектрическому зеркалу: рамкой белого цвета выделена произвольно выбранная светлая интерференционная полоса, смещение которой происходит вправо относительно горизонтальной оси

Следует отметить, что возможность получения удовлетворительной видности движущейся системы интерференционных полос была реализована благодаря предварительной оптимизации ориентации кристалла при считывании голограммы с использованием результатов [2, 3].

Работа выполнена при поддержке Государственной комплексной программы научных исследований «Электроника и фотоника», задание 2.2.09, а также БРФФИ и РФФИ (проекты № Ф12Р-222 и № 12-02-90038-Бел а соответственно).

- [1] Sochava, S.L. Holographic interferometry using 1-order diffraction in photorefractive Bi₁₂SiO₂₀ and Bi₁₂TiO₂₀ crystals / S.L. Sochava, R.C. Troth, S.I. Stepanov // J. Opt. Soc. Am. B. 1992. Vol. 9, № 8. P. 1521-1527.
- [2] Шандаров С.М. Фоторефрактивные эффекты в электрооптических кристаллах / С.М. Шандаров, В.М. Шандаров, А.Е. Мандель и др. Томск: ТУСУР, 2007. 242 с.
- [3] Шепелевич В.В. Голография в фоторефрактивных оптически активных кристаллах / В.В. Шепелевич. – Минск: Изд. центр БГУ, 2012. – 254 с.

В. В. Шепелевич¹, М. В. Дубина¹, А. В. Макаревич¹, С.М. Шандаров²

ИССЛЕДОВАНИЕ ОРИЕНТАЦИОННЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ ДИФРАКЦИОННОЙ ЭФФЕКТИВНОСТИ СМЕШАННЫХ ГОЛОГРАММ В КРИСТАЛЛЕ ВТО

¹Мозырский государственный педагогический университет им. И.П. Шамякина, ул. Студенческая, 28, 247760 Мозырь, Беларусь maxim dubina@mail.ru

²Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники

Кубические фоторефрактивные кристаллы уже несколько десятилетий привлекают внимание оптических научных групп благодаря перспективам их применений в адаптивной интерферометрии, обработке оптической информации [1, 2], и др.

В ряде работ (например, [3, 4]) показано влияние пьезоэлектрического эффекта на ориентационные и поляризационные зависимости дифракционной эффективности голограмм в кубических фоторефрактивных кристаллах и установлено, что без учета этого влияния нельзя достичь согласования теоретических результатов и экспериментальных данных.

В теоретических исследованиях кубических фоторефрактивных кристаллов обычно рассматриваются фазовые голографические решетки, записанные в этих средах. Однако в отдельных статьях (например, [5, 6]) наряду с фазовыми рассматриваются и амплитудные решетки. В частности, в кристалле GaAs [6] только учет смешанных голографических решеток (амплитудных и фазовых) обеспечивает удовлетворительное описание экспериментальных результатов.

В настоящей работе представлены результаты экспериментального изучения ориентационных зависимостей дифракционной эффективности голограмм, записанных в кристалле $Bi_{12}TiO_{20}$. При попытке теоретической интерпретации полученных зависимостей для случаев двух линейных поляризаций взаимодействующих в процессе записи голограмм световых волн (в плоскости падения ($\psi_0 = 0$) и перпендикулярно этой плоскости ($\psi_0 = 90^\circ$)) модели фазовых голографических решеток оказалось недостаточно и пришлось привлечь дополнительно модель амплитудных голограмм.

Время записи голограмм при экспериментальном исследовании составляло 30 с, а угол Брэгга вне кристалла был равен 18,5°. Теоретические и экспериментальные результаты представлены на рисунке 1.

Параметры кристалла: пьезоэлектрический коэффициент $e_{14} = 1,1 \text{ Kл/m}^2$; электрооптический коэффициент $r_{41}^s = 4,75 \text{ пм/B}$; фотоупругие постоянные $p_{11} = 0,173$; $p_{12}+p_{13} = -0,003$; $p_{44}^E = -0,005$; коэффициенты упругости $c_{11} = 13,7 \times 10^{10} \text{ H/m}^2$; $c_{12} = 2,8 \times 10^{10} \text{ H/m}^2$; $c_{44}^E = 2,6 \times 10^{10} \text{ H/m}^2$; удельное вращение плоскости поляризации $\rho = 6,3$ град/мм; показатель преломления n = 2,58 [7]; параметр для характеристики амплитудной решетки $\kappa_2 = 2,6 \text{ m}^{-1}$; коэффициент поглощения $\alpha = 40 \text{ m}^{-1}$; толщина кристалла d = 7,7 мм; электрическое поле решетки $E_g = 5,75 \cdot 10^4 \text{ B/m}$ (для $\psi_0 = 0$) и $E_g = 9,75 \cdot 10^4 \text{ B/m}$ (для $\psi_0 = 90^\circ$).



Рис. 1. Зависимости дифракционной эффективности $\eta(\theta)$ голограмм, записанных в ВТО, от ориентационного угла θ : а) азимут линейной поляризации взаимодействующих пучков: $\psi_0=0^\circ$;

б) азимут линейной поляризации взаимодействующих пучков: ψ₀=90°. Штриховая линия – теоретическая зависимость η(θ) без учета вклада амплитудной составляющей голограммы; сплошная линия – теоретическая зависимость η(θ) с учетом вклада амплитудной составляющей голограммы; 0 – экспериментальные данные.

Работа выполнена при поддержке Государственной комплексной программы научных исследований «Электроника и фотоника», задание 2.2.09, а также БРФФИ и РФФИ (проекты № Ф12Р-222 и № 12-02-90038-Бел а соответственно).

- [1] Петров, М.П. Фоторефрактивные кристаллы в когерентной оптике / М.П. Петров, С.И. Степанов, А.В. Хоменко. СПб.: Наука, 1992. 320 с.
- [2] Solymar, L. The physics and applications of photorefractive materials / L. Solymar, D. J. Webb, A. Grunnet–Jepsen. – Oxford: Clarendon Press, 1996. – 494 p.
- [3] Шандаров, С.М. Фоторефрактивные эффекты в электрооптических кристаллах / С.М. Шандаров, В.М. Шандаров, А.Е. Мандель и др. Томск: ТУСУР, 2007. 242 с.
- [4] Шепелевич, В.В. Голография в фоторефрактивных оптически активных кристаллах / В.В. Шепелевич. Минск: Изд. центр БГУ, 2012. 254 с.
- [5] Fish, D.A. Theoretical analysis of mechanism of photorefractive enhancement of photochromic gratings in BSO / D.A. Fish, A.K. Powel, T.J. Hall et al. // Optics Comm. – 1993. – Vol. 98. – P. 349-356.
- [6] Shcherbin, K. Contribution of nonlinear absorption and elasto-optic effect in photorefractive grating recording in GaAs / K. Shcherbin, S. Odoulov, R. Litvinov et al. // Opt. Soc. Am. B. – 1996. – Vol. 13, №10. – P. 2268-2277.
- [7] Shamonina, E. Diffusion recording in photorefractive sillenite crystals: an analytical approach for engineering purposes / E. Shamonina, Hu Yi, V.P. Kamenov et al. // Opt. Commun. 2000. Vol. 180, №1-3. P. 183–190.

В. А. Лойко, А. В. Конколович, А. А. Мискевич

ИССЛЕДОВАНИЕ РАССЕЯНИЯ СВЕТА ПЛЕНКАМИ КАПСУЛИРОВАННЫХ ПОЛИМЕРОМ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ С ПОМОЩЬЮ МЕТОДА ВЕНТЦЕЛЯ-КРАМЕРСА-БРИЛЛЮЭНА

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь loiko@dragon.bas-net.by

В жидкокристаллических сегнетоэлектриках (ЖКС) при определенных условиях может наблюдаться сильное рассеяние света. Оно обусловлено пространственной неоднородностью оптической анизотропии слоя ЖКС, которая образуется при деформации его ориентационной структуры под действием управляющего поля (электрического или магнитного). Известно несколько типов рассеяния света в ЖКС: рассеяние на переходных доменах (переходное рассеяние света) в геликоидальных и негеликоидальных ЖКС, рассеяние света в одномерно-модулированных ЖКС структурах с сегнетоэлектрическими доменами. Рассеяние света в ЖКС детально не исследовано. Для оптимизации оптического отклика пленок жидких кристаллов необходимо знать специфику рассеяния на каплях жидкого кристалла (ЖК) и их ансамблях. Строгой теории решения задачи рассеяния на отдельной капле жидкого кристалла не существует. Наиболее общее (работающее в широком диапозоне размеров и углов рассеяния) приближенное решение для оптически мягких изотропных частиц можно получить с помощью метода Вентцеля-Крамерса-Бриллюэна (ВКБ). Нами разработана оптическая модель для анализа коэффициентов когерентного (направленного) пропускания и когерентного (зеркального) отражения света монослоем капель ЖК при нормальном освещении неполяризованным световым излучением. Она основана на обобщении приближения ВКБ на векторный случай. Для оптически анизотропных капель с однородно ориентированной внутренней структурой, используя это приближение, получены аналитические выражения для элементов амплитудной матрицы рассеяния по направлению строго вперед и назад.

Для описания коэффициентов когерентного (направленного) пропускания и когерентного (зеркального) плоскопараллельным отражения света слоем жидкокристаллических сегнетоэлектриков с электроуправляемой двумерной модуляцией показателя преломления использована модель амплитудно-фазового экрана. Введена в рассмотрение оптически анизотропная матрица, которая образуется в управляющем электрическом поле в процессах раскручивания и скручивания спиральной структуры жидкокристаллических сегнетоэлектриков, сопровождающихся дроблением единой спирали на множество спиральных доменов.

Разработана оптическая модель для описания коэффициентов когерентного пропускания и отражения света плоскопараллельным слоем жидкокристаллических сегнетоэлектриков в режиме электроуправляемой светорассеивающей моды с новым типом рассеяния, обусловленным разрушением спирали в управляющем поле и образованием полидисперсной структуры спиральных доменов.

Ж. В. Колядко, В. В. Шепелевич, С.Ф. Ничипорко

ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА РАСПРОСТРАНЕНИЕ ТЕМНОГО НЕЧЕТНОГО ПУЧКА В ФОТОРЕФРАКТИВНОМ КРИСТАЛЛЕ Bi₁₂SiO₂₀

Мозырский государственный педагогический университет имени И.П. Шамякина, ул. Студенческая, 28, 247760 Мозырь, Гомельская обл., Беларусь <u>zh.kolyadko@mail.ru</u>

В данном сообщении представлены результаты экспериментального и теоретического исследования влияния внешнего электрического поля, приложенного к кристаллу, на распространение темного нечетного пучка в фоторефрактивном кристалле Bi₁₂SiO₂₀ (BSO) толщиной 10 мм.

При проведении эксперимента использовалась установка, схематично изображенная на рисунке 1, где 1 – гелий-неоновый лазер, 2 – коллиматор, 3 –фазовый транспарант, представляющий собой тонкую стеклянную пластинку, формирующую фазовый скачок π в центре пучка, 4 – кристалл BSO с плоскостью среза ($\overline{1}\,\overline{1}0$), 5 – линза с фокусным расстоянием f = 6.5 см, 6 – стандартный ослабитель, 7 – CD-камера, 8 – компьютер.



Рис. 1. Схема эксперимента

Из экспериментальных результатов, которые показаны на рисунке 2, видно, что на входе в кристалл в световом пучке наблюдается темный провал шириной d_1 около 54 мкм (рис. 2, столбец 1). В отсутствие электрического поля после прохождения кристалла ширина темного пучка увеличивается до $d_2 = 67$ мкм (рис. 2, столбец 2). При значении внешнего электрического поля, приложенного к кристаллу, $E_0 = 5.0$ кВ/см (рис. 2, столбец 3) можно наблюдать появление двух дополнительных темных полос вокруг центральной темной полосы. При значении внешнего электрического поля $E_0 = 7.5$ кВ/см (рис. 2, столбец 4) наблюдается увеличение глубины трех расщепленных темных пучков. В научной литературе такое явление называют переходом от фундаментального темного пространственного солитона, соответствующего самому низкому порядку, к темному солитону более высокого, в данном случае третьего, порядка [1]. При значении внешнего электрического поля $E_0 = 10$ кВ/см (рис. 2, столбец 5) глубина трех темных полос увеличивается и появляются две дополнительные темные полосы, что свидетельствует о переходе темного солитона к пятому порядку.

С целью теоретического объяснения экспериментальных результатов было проведено численное моделирование распространения темного пучка в фоторефрактивном кристалле. Для расчетов в качестве модели формы входного пучка

использовался профиль пучка, полученный экспериментально (рис.2, средний ряд, столбец 1) с «включением» в него фазовой неоднородности (рис.2, нижний ряд, столбец 1).

Результаты численного моделирования представлены на рисунке 2, нижний ряд. Сравнение полученных кривых (графики 2 – 5 в нижнем ряду рис. 2) с экспериментальными данными показывает качественное их совпадение. Некоторое отличие теоретических результатов от экспериментальных может быть связано с несовершенством формы светового пучка и с возможным отличием использованных параметров кристалла от реальных.



Рис. 2. Экспериментально наблюдаемые картины распределения интенсивности светового поля темного пучка (верхний ряд) и поперечные профили (средний ряд – экспериментальные результаты, нижний ряд – результаты численного моделирования) интенсивности выходного пучка после прохождения кристалла BSO в диффузионном режиме (столбец 2), а также при E₀=5.0 кВ/см (столбец 3), при E₀=7.5 кВ/см (столбец 4) и при E₀=10 кВ/см (столбец 5)

Численные расчеты также показывают, что оптическая активность кристалла практически не влияет на распределение интенсивности в выходном темном пучке.

Работа выполнена при частичной поддержке Министерства образования Республики Беларусь (грант на выполнение научно-исследовательской работы «Темные пространственные солитоны в фоторефрактивных кристаллах», грант Государственной комплексной программы научных исследований «Электроника и фотоника», задание «Фотоника 2.2.09»), а также БРФФИ, проект № Ф12Р-222.

[1] Chen Z. Sequential formation of multiple dark photorefractive spatial solitons: experiments and theory / Z. Chen [et al.] // J. Opt. Soc. Am. B. – 1997. – V. 14, № 6. – P. 1407.

УДК 535.3+535.8:535.214

С. В. Солоневич, А. А. Рыжевич, Н. С. Казак

МЕТОД ФОРМИРОВАНИЯ ОПТИЧЕСКОЙ БИЛОВУШКИ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>a.ryzhevich@dragon.bas-net.by</u>

Изначально лазерные пинцеты использовались в качестве инструментов для манипуляции одиночными частицами. По мере совершенствования и усложнения технических средств стало возможным оперировать комплексами (ансамблями) микрочастиц. Известны методы формирования прямолинейной цепочки частиц, а также кольца из частиц в кольцевом максимуме бесселева светового пучка. Одной из актуальных задач является обеспечение возможности позиционирования двух частиц относительно друг друга с целью поворота или соединения. Нами предложен метод формирования оптической ловушки, позволяющей производить одновременное манипулирование парой микрочастиц путем их вращения относительно центра соединяющего их отрезка, а также изменения расстояния между ними. Для одновременной манипуляции двумя микрочастицами была разработана и смонтирована экспериментальная установка в горизонтально-вертикальной компоновке, схема которой показана на рисунке 1.



Рис. 1. Оптическая схема экспериментальной установки для одновременного манипулирования парой микрочастиц с помощью перестраиваемого двухпичкового лазерного поля

Излучение гелий-неонового лазера 1 (ГН-25-1, производство «Плазма», Рязань, Россия), представляющее собой гауссов пучок мощностью 25 мВт с длиной волны 0,633 мкм, направлялось на оптическую систему, состоящую из положительных линз 2, 3 и бипризмы Френеля 4 с углом при основании 2° между ними. Фокусные расстояния для линз составляли $f_1 = 10$ мм и $f_2 = 125$ мм соответственно. Линзы устанавливались на

фиксированном расстоянии друг от друга, равном f₁+f₂, формируя при этом телескопрасширитель пучка. Бипризма 4 устанавливалась точно на оси светового пучка в плоскости, перпендикулярной оси пучка с помощью комбинированного держателя, обеспечивающего возможность поворота бипризмы 4 вокруг оси, параллельной оптической оси схемы и совмещения оси поворота с оптической осью схемы. Перестройка угла бипучка, формируемого элементами 2-4, осуществляется при перемещении бипризмы 4 вдоль оптической оси схемы, совпадающей с осью падающего на бипризму светового пучка. Бипучок направляется на положительную линзу 5 с фокусным расстоянием $f_3 = a+b = 210$ мм, которая вблизи своей фокусной плоскости формирует выходное двухпичковое поле, являющееся вследствие высокого градиента интенсивности двойной ловушкой для микрочастиц (биловушкой). За линзой 5 на расстоянии а, меньшем, чем фокусное расстояние f₃, установлено поворотное зеркало 6, отклоняющее световой пучок по направлению вертикально вверх. Вблизи фокусной плоскости линзы 5 располагается прозрачное для лазерного излучения дно кюветы 7. Кювета содержит взвесь (суспензию) микрочастиц необходимого размера в воде в необходимой концентрации. Кювета устанавливается на держателе, обеспечивающем возможность ее плавного перемещения по трем поступательным и двум вращательным степеням свободы. Выходное поле в области его взаимодействия с микрочастицами для наблюдения увеличивается с помощью 200-кратного микроскопа 8 и направляется поворотным зеркалом 9 на зачерненный матовый металлический экран, препятствующий дальнейшему распространению лазерного излучения и служащий для наблюдения светового поля в фокусной плоскости линзы 5. Увеличенное изображение на экране может при необходимости регистрироваться с помощью цифровой камеры, работающей в видео- либо фото-режиме. С помощью данной установки можно в определенной горизонтальной плоскости, вблизи которой формировать локализованы микрочастины. световое поле с двумя пиками интенсивности, совмещать ИХ с частицами, контролируемо перемещая R горизонтальной плоскости кювету с суспензией и изменяя взаимную ориентацию пиков и расстояние между ними. Затем изменяя ориентацию световых пиков в горизонтальной плоскости и расстояние между ними, можно соответственно изменять одновременно расположение двух частиц, удерживаемых в пиках интенсивности градиентными силами, поскольку частицы обладают свойством втягиваться в максимум интенсивности лазерного излучения, а при плавном и достаточно медленном перемещении максимума двигаться вместе с ним вблизи области с пиковым значением интенсивности. Все элементы оптической схемы предложенного метода пригодны для преобразования мощного лазерного излучения, особенно при наличии на входных и выходных поверхностях просветляющего покрытия. Световые максимумы двухпичкового поля в фокусе имеют микроскопические размеры, поэтому оно может использоваться не только для управления микро- и наночастицами, но также в высокоразрешающей микроскопии, для неразрушающего оптического контроля толщины покрытий, а также для прецизионной лазерной обработки материалов, в том числе металлов.

С. Н. Курилкина¹, В. Н. Белый¹, Н.И. Мухуров¹, А.А. Минько²

НАПРАВЛЕННАЯ ДИФРАКЦИЯ В СЛОИСТО-ПЕРИОДИЧЕСКИХ СРЕДАХ

¹Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

s.kurilkina@ifanbel.bas-net.by

²Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

Недавно в результате численного моделирования дифракции электромагнитных волн в двумерном фотонном кристалле (ФК), представляющем собой структуру параллельных воздушных цилиндров в диэлектрической матрице, обнаружено явление направленной дифракции [1,2], заключающееся в независимости направления распространения света в ФК от угла его падения на данную структуру. Представляет интерес исследование возможности направленной дифракции в слоисто-периодических средах (СПС). Такие среды технологичны, обладают малыми потерями; для их описания используется математический аппарат. Решению данной проблемы и посвящено настоящее сообщение.

Показано, что если период диэлектрической СПС значительно меньше длины падающей световой волны, можно найти ее эффективное волновое число $K^{eff} = \sqrt{K^2 + k_x^2}$ и соответственно эффективный показатель преломления $n_e^{eff}(\alpha) = K^{eff}/k_0$. Здесь $K, k_x = k_0 n \sin \alpha$ - соответственно нормальная и тангенциальная (неизменная) компоненты волнового вектора, $k_0 = \omega/c$, *c* - скорость света в вакууме, *n* - показатель преломления внешней среды, α - угол падения.

Как показали расчеты, кривая $n_e^{eff}(\alpha)$ сечения поверхности эффективных показателей преломления плоскостью падения, вообще говоря, не является эллипсом, а имеет линейные участки, длина которых зависит от отношения *a* диэлектрических постоянных ε_1 и ε_2 компонентов СПС с толщинами d_1 и d_2 соответственно. Отметим, что данные линейные участки соответствуют коллинеарным векторам эффективной лучевой скорости

$${}^{eff} = \partial_{\omega} / \partial \vec{K} {}^{eff} , \qquad (1)$$

где $\vec{K}^{eff} = k_0 n_e^{eff}(\alpha) \vec{n}$ - эффективный волновой вектор, \vec{n} - волновая нормаль.

ū

В работе проанализированы особенности дифракции световых волн с длиной волны 401 нм, падающих из воздуха на СПС со следующими параметрами: $d_1 = 50$ нм, $d_2 = 80$ нм; $\varepsilon_1 = 1.5$, $\varepsilon_2 = 12$. Данная структура обладает большим диэлектрическим контрастом, вследствие чего поверхность эффективных показателей преломления (или, что равноценно, поверхность обратных эффективных показателей преломления $n_e^{eff}(\alpha)$) такой среды сильно искажается в сравнении с эллипсоидом: она имеет существенные плоские участки, для которых $\partial n_e^{eff}(\alpha)/\partial \alpha = 0$ (рис.1,2). Для каждой области волновых нормалей, которым соответствуют такие плоские участки, лучевые скорости коллинеарны.



Рис. 1. Зависимость $(n_e^{eff})^{-1}$ от угла падения. Рис. 2. Зависимость $\partial n_e^{eff}(\alpha) / \partial \alpha$ от угла падения.

Как видно из рис.2, для данной СПС область углов падения, для которых групповые скорости коллинеарны, чрезвычайно велика (от 10° до 90°). Однако данный интервал оказывается весьма чувствительным к варьированию параметров слоистопериодической среды.

Обсуждены возможные применения данного явления. Показано, что направленная дифракция в диэлектрических СПС может быть использована для генерации сверхузких цилиндрических пучков из ограниченного бесселева пучка, имеющего центральный и несколько побочных максимумов. Данные пучки перспективны для литографии, микроскопии.

Обоснована возможность применения направленной дифракции в слоистопериодических средах для передачи изображения субволнового размера без искажений и, следовательно, при разработке суперлинзы.

- [1] Directed diffraction without negative refraction/ H. T. Chien [et al]// Phys. Rev. 2004.
 B 70. P.113101-113104.
- [2] Belov P.A. Canalization of subwavelength images by electromagnetic crystals/ P.A.Belov, C.R.Simovski, P.Ikonen// Phys.Rev. – 2005. - B71. – P.193105-1 – 193105-5.
- [3] Ikonen P. Experimental demonstration of subwavelength field channeling at microwave frequences using a capacitively loaded wire medium/ P.Ikonen, P.Belov, C.Simovski, S. Maslovski// Phys.Rev. – 2006. - B73. – P.073102-1 –073102-4.

УДК 535:628.373.8, 535:548 Н. С. Казак, Н. А. Хило, С. В. Солоневич, А. А. Рыжевич

ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЬ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ ДВУОСНОГО КРИСТАЛЛА

Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>a.ryzhevich@dragon.bas-net.by</u>

При распространении аксиально симметричного светового пучка вдоль бинормали двуосного кристалла он может быть преобразован в многокольцевой световой пучок (МКСП), обладающий или не обладающий винтовой дислокацией волнового фронта (ВДВФ). Для практического использования этого полезного свойства двуосных кристаллов был разработан преобразователь лазерного излучения, оптическая схема которого приведена на рис. 1.



Рис. 1. Оптическая схема преобразователя лазерного излучения

Преобразователь работает следующим образом. Начальный лазерный пучок от внешнего источника излучения падает на преобразователь в направлении, показанном стрелкой 9, лежащей на оси симметрии 10 этого пучка. Входной поляризатор 1 придает проходящему сквозь него лазерному излучению линейную поляризацию, после чего соответствующим образом ориентированная первая четвертьволновая пластина 2 придает световому пучку циркулярную поляризацию. Проходя через двуосный кристалл 3 циркулярно поляризованный пучок разделяется в нем на два циркулярно поляризованных в противоположных направлениях пучка, один из которых обладает, а другой не обладает ВДВФ. Второй четвертьволновой пластиной 4 пучки с противоположными циркулярными поляризациями преобразуются В лва сонаправленных ортогональными линейными пучка с поляризациями. Четвертьволновая пластина 4 закреплена в держателе 5, с помощью которого ее можно поворачивать точно на 180° вокруг оси, перпендикулярной либо параллельной плоскости поляризации и перпендикулярной оси симметрии 10 падающего на пластинку светового пучка. При таком повороте пластины 4 происходит одновременный поворот ориентации плоскостей поляризации обоих выходящих из нее линейно поляризованных пучков на 90° в одном направлении относительно оси симметрии 10 начального пучка. Выходной поляризатор 6 пропускает один из линейно

поляризованных пучков. Поворотом вокруг вертикальной оси держателя 5 выбирают световой пучок с необходимым порядком ВДВФ. Опциональная система сферических линз 7 и 8 регулирует расходимость, поперечный размер и количество кольцевых максимумов интенсивности выходного пучка. При уменьшении фокусного расстояния линзы 7 увеличивается количество кольцевых максимумов интенсивности в выходном пучке. Изменяя расстояние между линзами 7 и 8, регулируют расходимость выходного пучка. Если фокусные плоскости линз 7 и 8 совмещены, и фокусное расстояние линзы 8 больше, чем фокусное расстояние линзы 7, диаметр выходного пучка больше, чем диаметр начального пучка, и соответственно наоборот. Если фокусные расстояния линз 7 и 8 одинаковы, при совмещении фокусных плоскостей линз диаметр выходного пучка такой же, как и диаметр входного. Опциональность системы линз 7 и 8 означает, что любая из них в зависимости от расходимости начального пучка либо требований к выходному пучку может либо отсутствовать, либо заменяться системой сферических линз с необходимым фокусным расстоянием.

На рисунке 2 показаны зарегистрированные распределения интенсивности в начальном пучке, не проходившем через кристалл и поляризатор (1), в аподизированном пучке без ВДВФ (2), в пучке с ВДВФ (3) и рассчитанное суммарное (2)+(3) распределение интенсивности (4).



Выходной пучок с ВДВФ, имеющий минимум интенсивности на оси, может быть полезен для проведения импульсной лазерной сварки, управления микро- и наночастицами после преобразования в бесселев световой пучок первого порядка, для создания профилометров. Осевой максимум выходного МКСП как без, так и с ВДВФ можно отделять круглой диафрагмой, размещая ее край точно по окружности ближайшего минимума с нулевой интенсивностью с целью аподизизации входного пучка. Аподизированный световой пучок может иметь одновременно меньший диаметр и меньшую расходимость по сравнению с начальным.

Разработанный преобразователь пригоден для работы с мощным непрерывным и импульсным лазерным излучением в оптическом диапазоне, однако для аподизации мощных лазерных пучков необходимо применение металлической диафрагмы с радиатором, позволяющим рассеивать в виде тепла поглощаемую световую энергию.

УДК 535:530.182

Р. А. Власов¹, В.М. Волков², Д.Ю.Дедков²

ОСОБЕННОСТИ САМОФОКУСИРОВКИ ФЕМТОСЕКУНДНЫХ ВИХРЕВЫХ ОПТИЧЕСКИХ ИМПУЛЬСОВ В ВОЗДУХЕ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

r.vlasov@dragon.bas-net.by

² Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь volkovvm@bsu.by

Самофокусировка мощных фемтосекундных лазерных импульсов в нелинейных средах сопровождается радикальной трансформацией пространственно-временного спектра излучения, приводящей к существенному перераспределению энергии в широком частотно-угловом диапазоне [1]. Теоретическому и экспериментальному исследованию спектрально-угловых характеристик излучения и изучению закономерностей формирования структуры суперконтинуума при самофокусировке мощных импульсов посвящена обширная литература [2–4]. Ниже показано, что сингулярность (вихревая структура) фемтосекундных импульсов может кардинально и нетривиальным образом изменить спектральные характеристики и общую картину самофокусировки таких импульсов в воздухе.

На основе трехмерной математической модели, учитывающей характерные линейные и нелинейный эффекты при распространении лазерного излучения [2,3,5] проведен сравнительный анализ особенностей самофокусировки обычных и вихревых оптических импульсов фемтосекундного диапазона длительности.

Для сравнения рассмотрена самофокусировка обычного и вихревого импульсных пучков с длиной волны λ =800 нм., длительностью 100 фс., радиусом r_0 =3 мм, топологическими зарядами m=0 и m=1 соответственно и одинаковой пиковой мощностью, приблизительно равной двадцатикратному превышению критической мощности, необходимой для самофокусировки.

В обоих случаях инерционность нелинейности приводит к характерной нестационарности процесса, что проявляется в образовании первичного фокуса позади максимума пиковой интенсивности и опережающим его движением со скоростью, превышающей групповую скорость распространения импульса. Среди отличий, наблюдаемых в картине самофокусировки вихревых импульсов в сравнении с обычными, отметим существенное уменьшение модуляции интенсивности излучения в продольном и поперечном плане и формирование более выраженной рупоровидной структуры пространственно-временного профиля.

Превышение порога ионизации при самофокусировке включает диссипативные процессы многофотонного поглощения, приводящие к потерям энергии. Потери энергии при самофокусировке вихревого импульса составляют свыше 3% от исходного значения, что более чем на порядок превосходит аналогичные показатели при самофокусировке обычного импульса, где потери не более десятой доли процента. Это

при рассмотенных энергетических характеристиках и объясняется тем, что длительности импульсов локализованная в фокусе вихревого импульса мощность и пиковая интенсивность превосходят аналогичные параметры для случая обычных импульсов. Как следствие, характерное уширение пространственно-временного спектра при самофокусировке вихревого импульса существенно превосходят данные показатели в безвихревом режиме. Ширина углового спектра, как видно на рис., при самофокусировке вихревого импульса составляет приблизительно α=±0,25град, в то импульсов время как для обычных она в пределах α=±0,1град. Спектр сфокусированных вихревых импульсов характеризуется доминированием конической эмиссией в длинноволновом крыле, тогда как для обычных пучков доминирует коническая эмиссия в коротковолновой области спектра.



Рис. Нормированные частотно-угловые спектры обычного (слева) и вихревого (справа) импульсных пучков, испытавших самофокусировку

Азимутальная неустойчивость вихревых импульсных пучков ограничивает дистанцию стабильного распространения. Дистанция устойчивого распространения оптических вихрей при достаточно малом уровне начальных возмущений исходного импульса может превосходить длину самофокусировки.

Представленные результаты показывают перспективность использования вихревых импульсов в задачах дистанционного зондирования атмосферы.

- [1] Ахманов С.А., Выслоух В.А., Чиркин А.С. Оптика фемтосекундных лазерных импульсов. М:, Наука, 1988.
- [2] Chin, S. L., Wang, T. J., Marceau, C., Wu, J., Liu, J. S., Kosareva, O., et al. Advances in intense femtosecond laser filamentation in air //Laser Physics. – 2012. – T. 22. – P. 1.
- [3] Chin S.L., Hosseini S. A., Liu W., Luo Q., Theberge F., Aközbek N., Becker A., Kandidov V.P., Kosareva O.G., Schroeder H. The propagation of powerful femtosecond laser pulses in optical media: physics, applications, and new challenges// Canadian journal of physics. – 2005. – V. 83 – P. 863-905
- [4] Neshev, D. N., Dreischuh, A., Maleshkov, G., Samoc, M., & Kivshar, Y. S. Supercontinuum generation with optical vortices 2010 V. 18 P. 18368.
- [5] Власов Р.А., Волков В.М., Дедков Д.Ю. Особенности сверхуширения спектра при самофокусировке импульсных вихревых пучков в воздухе // Квант. электроника. 2013. Т. 43. С. 157.

УДК 53.082.5:621.373.826

С. В. Солоневич, А. А. Рыжевич, В. Е. Лепарский, А. Г. Смирнов

ОТРАЖЕНИЕ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ ГРУБООБРАБОТАННОЙ ЦИЛИНДРИЧЕСКОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>a.ryzhevich@dragon.bas-net.by</u>

Механическая обработка объекта и его последующая эксплуатация образуют специфическую геометрию объекта с наличием неровностей определенных видов, и в зависимости от назначения объекта, его роли в технологическом процессе в каждом конкретном случае выставляются определенные требования к качеству поверхности объекта. Для контроля формы хорошо отражающих цилиндрических объектов удобно оптическую профилометрию. Закономерности применять отражения света полированными поверхностями металлов достаточно хорошо изучены, однако отражение света грубообработанными поверхностями проявляет дополнительные особенности. Излучение, отраженное и рассеянное от неполированной поверхности металла, имеет в своем поперечном сечении пятнистую структуру. Тем не менее, воспользовавшись соответствующим регистрирующим оборудованием, статистическими методами и специальным программным обеспечением, можно с большой точностью рассчитать профиль поверхности объекта. В [1] нами предложены методика и устройство для неразрушающего бесконтактного измерения всех трех видов неровностей на цилиндрических объектах, закрепленных возможностью с контролируемого вращения, в том числе не дающих нормального зеркального отражения, шероховатых, крупногабаритных, массивных и нагретых, т.е. в условиях реального производства. Отклонения поверхности объекта от прямолинейной образующей измеряются по изменению направления распространения светового пучка, отраженного поверхностью. Направление отраженного пучка с хорошей точностью определяется по местонахождению центра гауссовой огибающей распределения интенсивности света в его поперечном сечении. В настоящей работе показано, что отражение пучка неполяризованного когерентного света от цилиндрических поверхностей с непериодическими, но однотипными технологическими неровностями в виде параллельных друг другу бороздок примерно одинаковой глубины, имеет некоторые особенности, которые можно использовать для усовершенствования предложенного в [1] устройства с целью увеличения точности определения волнистости и отклонения формы поверхности объекта. На вид распределения отраженного излучения большое влияние оказывает интенсивности наличие выделенных направлений в положении микронеровностей на металлической поверхности. В большинстве случаев на цилиндрических изделиях имеются полосы и бороздки, направленные в зависимости от метода изготовления и последующей обработки либо параллельно оси изделия, либо перпендикулярно ей. При наличии на поверхности свет сильнее рассеивается таких бороздок В стороны, перпендикулярные направлению бороздок. Рассеивание от неровностей дополнительно усложняет картину, возникающую при отражении наклонно падающего излучения от цилиндрической поверхности. С помощью гониометрической установки, позволяющей направлять неполяризованный гауссов лазерный пучок на поверхность цилиндрического объекта под заданным углом к оси объекта, нами была исследована зависимость распределения интенсивности в отраженном/рассеянном грубообработанной металлической поверхностью световом пучке от угла падения лазерного излучения при двух различных ориентациях бороздок на поверхности металла относительно оси объекта (рисунок 1). Распределения интенсивности регистрировались ПО диаметральной линии В сечении отраженного пучка (1 пикс. = 4,4 мкм), лежащей в плоскости, параллельной плоскости падения излучения и содержащей при этом ось объекта и ось падающего пучка.



Рис. 1. Зависимость интенсивности в отраженном пучке от угла падения; бороздки: а - перпендикулярны, б – параллельны оси объекта

Статистическая обработка полученных распределений интенсивности показала, существуют оптимальные для контроля формы грубообработанных что цилиндрических объектов углы падения. С одной стороны, желательно делать угол падения света на объект как можно более острым (чем меньше угол падения, тем меньший участок поверхности объекта освещается падающим пучком, а это улучшает разрешение при определении отклонения поверхности объекта от направляющей). С другой стороны, при малых углах падения точность определения направления отраженного пучка существенно уменьшается из-за увеличения минимального диаметра и/или уменьшения интенсивности отраженного цилиндром пучка. В зависимости от направления бороздок наиболее приемлемые для определения отклонений поверхности цилиндрического объекта от направляющей по направлению пучка отраженного света углы падения лежат в диапазонах 72 ÷ 79 градусов (бороздки перпендикулярны оси объекта) и 58 ÷ 65 градусов (бороздки параллельны оси объекта), причем параллельная ориентация бороздок относительно оси объекта обеспечивает более высокую точность по сравнению с перпендикулярной.

[1] Солоневич, С.В. Исследование качества грубообработанной металлической поверхности с помощью лазерного излучения / С.В. Солоневич, А.А. Рыжевич, В.Е. Лепарский // Известия Гомельского государственного университета имени Ф. Скорины. – 2011. – Т. 69, № 6. – С. 132-136.

В.А. Лойко¹, В.Я. Зырянов², А.В. Конколович¹, А.А. Мискевич¹

ПРОПУСКАНИЕ И УГЛОВАЯ СТРУКТУРА СВЕТА, РАССЕЯНОГО КАПЛЯМИ КАПСУЛИРОВАННЫХ ПОЛИМЕРОМ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ С НЕОДНОРОДНЫМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

<u>loiko@dragon.bas-net.by</u>

² Институт физики им. Л. В.Киренского СО РАН, Академгородок 50-38, Красноярск, 660036, Россия

Управляемое рассеяние света в композитных ЖК материалах под воздействием внешнего электрического или магнитного поля является одним из широко исследуемых и перспективных способов формирования отклика в устройствах отображения информации, телекоммуникации, оптоэлектронике и т.д.. Недавно предложен и реализован новый метод управления структурой ЖК капель в полимерной матрице электрическим полем. Он основан на модификации граничных условий на межфазной границе ЖК-связующий полимер ионообразуюшими сурфактантами. Ионный сурфактант создает неоднородность граничных условий и позволяет снизить значения напряженностей управляющих электрических полей в сравнении с материалами, создаваемыми на основе капель с однородным поверхностным сцеплением.

данной работе рассмотрено прохождение света через монослойную B полимерную пленку с ориентированными каплями нематического жидкого кристалла (ЖК). Получены соотношения для коэффициентов когерентного пропускания слоя из ориентированных капель эллипсоидальной формы. Использованы модель амплитуднофазового экрана и интерференционное приближение теории многократного рассеяния волн. Разработано приближение аномальной дифракции для описания рассеяния излучения отдельной эллипсоидальной каплей с неоднородным поверхностным сцеплением. Проведен анализ коэффициентов когерентного пропускания и угловой структуры рассеянния для монослоев из сферических ЖК капель. Внутренняя структура нематических капель расчитывалась релаксационным методом на основе решения задачи минимизации объемной плотности свободной энергии. Изучены основные закономерности рассеяния света монослоем с однородными И неоднородными граничными условиями на межфазной границе ЖК-полимер. Показано, что для пленок содержащих капли с неоднородными граничными условиями типа «тангенциально-нормальные» имеет место асимметрия угловой структуры рассеяния света по полярному углу рассеяния. Проведен анализ влияния размера, концентрации ЖК капель и управляющего электрического поля приложенного в плоскости монослоя на структуру некогерентно рассеянного света в малых углах. Найдены условия реализации интерференционного эффекта гашения коэффициента когерентного пропускания КПЖК монослоя с неоднородными межфазными границами при нормальном освещении линейно поляризованной плоской волной.

Т. А. Корниенко¹, Ю. И. Миксюк², К. А. Саечников², А. Л. Толстик¹

ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ И САМОВОЗДЕЙСТВИЕ ГАУССОВЫХ И СИНГУЛЯРНЫХ СВЕТОВЫХ ПУЧКОВ В КРИСТАЛЛАХ Ві12 ТіО20 И Ві12 SiO20

¹ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

² Белорусский государственный педагогический университет, ул. Советская, 18, 220050 Минск, Беларусь <u>ska-bspu@tut.by</u>

Одними из ярких эффектов, которые происходят при воздействии лазерного излучения на фоторефрактивную среду, являются процессы самофокусировки и дефокусировки светового пучка. Использование фоторефрактивных материалов отличается тем, что в них возможно получение солитонов при микроваттной мощности светового изучения [1]. В общем случае любое световое влияние на нелинейно- и электрооптические свойства исследуемых кристаллов связано с перераспределением энергии и зарядов носителей, которое может вызывать не только распространение пучка в автоколлимационном режиме, но и может приводить к изменению поглощения [2] и подвижности фотоиндуцированных носителей, что приводит к изменению электрического сопротивления и проявлению эффекта фотопроводимости [3]. Исследование указанных проблем является определяющим при создания элементов с многослойной оптической памятью, оптических переключателей и оптических корреляторов.

Данная работа посвящена экспериментальному исследованию динамики самофокусировки и дефокусировки световых пучков в фоторефрактивном кристалле титаната висмута при прохождении через кристалл сфокусированного лазерного излучения. Второй этап работы затрагивает проблему фотопроводимости кристаллов титаната (Bi₁₂TiO₂₀) и силиката висмута (Bi₁₂SiO₂₀) при их засветке лазерным излучением на различных длинах волн (532,8 нм и 632,8 нм).

Для исследования процесса самофокусировки выбраны гауссовы и сингулярные световые пучки мощностью от 1 мкВт до 110 мкВт, диаметр которых на передней грани кристалла составлял около 50 мкм. Определен общий сценарий распространения гауссовых и сингулярных световых пучков в кристалле титаната висмута под действием приложенного электрического напряжения (величина электрического поля составляла 11,5 кВ/см).

Показано, что для гауссова светового пучка при включении внешнего поля пучок начинает сжиматься и его интенсивность в центре заметно возрастает, происходит эффект самовоздействия пучка и его самофокусировка. Такой процесс сопровождается перераспределением энергии в поперечном сечении пучка. При снятии поля с кристалла происходит дефокусировка пучка и последующее восстановление первоначальных размеров и интенсивности. Такая ситуация имела место при мощности светового пучка менее 80 мкВт. При больших значениях мощности описанные процессы самофокусировки сменялись более медленными обратными процессами дифракционного расплывания светового пучка.

Совершенно иной наблюдалась динамика распространения сингулярных световых пучков в исследуемом кристалле. При приложении к кристаллу внешнего электрического поля сначала происходит дефокусировка оптического вихря, затем структура пучка восстанавливается и остается стабильной. При снятии электрического поля происходит обратный процесс – самофокусировка пучка, при которой размер вдоль направления приложения поля резко уменьшается, а затем происходит восстановление пучка до первоначальных размеров.

Построены зависимости времени формирования устойчивых структур светового поля от мощности лазерного излучения. Показано, что при изменении мощности светового пучка изменяется время его формирования, причем это происходит таким образом, что произведение мощности на время (экспозиция) остается постоянным. Для гауссова пучка эта экспозиция составила 3,6 мДж, в то время как для сингулярного пучка – 6,7 мДж.

В качестве образцов для исследования фотопроводимости были выбраны кристаллы Bi₁₂SiO₂₀, размерами 2,5 x 15 x 20 мм, и кристалл Bi₁₂TiO₂₀, размерами 2,6 х 6,5 х 10,3 мм. построения зависимостей Для электропроводности ОТ интенсивности засветки было выбрано непрерывное лазерное излучение с различными состояниями поляризации на длинах волн 632,8 нм (плотность мощности до 50 мВт/см²) и 532 нм (плотность мощности до 10 мВт/см²). Показано, что в условиях проведенных экспериментов наблюдаются линейные зависимости электропроводности от светового потока, причем эффект не зависит от поляризации падающего излучения. Аналогичные зависимости получены и для кристалла титаната висмута, однако для него при больших интенсивностях излучения (свыше 10 мВт/см²) наблюдался эффект насыщения. При этом были отмечены остаточные явления в кристалле, что объясняется большей светочувствительностью кристалла титаната висмута по сравнению с силикатом висмута.

Таким образом, в результате работы получена информация об особенностях электрооптических и нелинейно-оптических эффектов в наиболее популярных фоторефрактивных кристаллах семейства силленитов, которые используются в системах обработки и преобразования информации, а также в устройствах управления лазерными пучками.

- [1] Формирование низкоинтенсивных пространственных солитонов в фоторефрактивном кристалле Bi₁₂TiO₂₀ / Т. В. Габрусева [и др.] // Известия РАН. Серия физическая. 2006. Т. 70, № 12. С. 1745-1747.
- [2] Methods for controlling of the laser-induced absorption in a BTO crystal by using of cw-laser radiation / A. Matusevich [etc] // Applied Physics B: Laser and Optics 2009. 96. P. 119-125.
- [3] Пространственно-временные модуляторы света на монокристаллах Bi₁₂GeO₂₀, Bi₁₂SiO₂₀ / А.Т. Клипко [и др.] // Автометрия. 1976. №1. С. 34-43.

УДК 539.196:621.373.826

В. А. Савва

КВАНТОВЫЕ ОСЦИЛЛЯТОРЫ КАК МОДЕЛИ ЛАЗЕРНОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ КВАЗИРЕЗОНАНСНЫХ СРЕД

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>v.savva@ifanbel.bas-net.by</u>

В последние десятилетия проявлен интерес к нестационарным задачам когерентного возбуждения резонансных сред. Такой режим реализуется на временах, когда релаксационные процессы не уничтожают наводимую излучением квантовую когерентность среды, например, при многофотонном возбуждении молекул в поле мощного лазерного излучения. Режим используют для лазерного разделения изотопов, при изучении каналов декогеренции с целью поиска путей ее устранения для построения квантовых компьютеров. В химии режим осуществляет лазерное управление реакциями, а в спектроскопии его применяют для селективного возбуждения молекул, чтобы исследовать их внутримолекулярную релаксацию.

Интегрируемых моделей такого процесса немного. Это, прежде всего, гармонический осциллятор и двухуровневый атом. Ниже показано, что число моделей можно существенно увеличить. Представлен метод построения точного решения уравнений динамики, приведены результаты, описывающие возбуждение ряда многоуровневых моделей сред лазерным излучением.

Модель среды, взаимодействующей с излучением $\mathbf{E}(\tau) = \mathbf{E}_{l} \cos \omega_{l} \tau$, это квантовая система с уровнями энергии $E_{n} = \sum_{k=0}^{n} \hbar \omega_{k}$, n = 0, 1, ..., N и радиационными переходами между соседними уровнями. Переход характеризуется матричным элементом $\mu_{n-1,n} = \mu_{0,1} f_{n}$, $f_{0} = 0$, $f_{1} = 1$ дипольного момента. Функция f_{n} дипольных моментов переходов описывает их зависимость от энергии. Уровни энергии и дипольные моменты переходов редко удается вычислить, решив стационарную квантовую задачу для среды. Обычно эти данные получают экспериментально. В начальный момент $\tau = 0$ система не возбуждена, ее энергия $E_{0} = 0$.

Уравнение динамики для амплитуд $a_n(t)$ вероятности имеет вид:

$$-i\frac{da_{n}(t)}{dt} = f_{n+1}e^{-i\mathcal{E}_{n+1}t}a_{n+1}(t) + f_{n}e^{+i\mathcal{E}_{n}t}a_{n-1}(t), \quad a_{n}(t=0) = \delta_{n,0}, \quad n = 0, 1, \dots, N.$$
(1)

Здесь N — любое заданное натуральное число, включая бесконечность. Все переменные и коэффициенты безразмерны. Зная амплитуды можно рассчитать населенности $\rho_n(t) = |a_n(t)|^2 \equiv a_n(t)a_n^*(t)$ уровней, т.е. найти функцию распределения системы по уровням в любой момент времени, которая полностью описывает динамику системы. В уравнениях (1) $t = \Lambda \tau$ безразмерное время, $\varepsilon_n = (\omega_n - \omega_l)/\Lambda$ — безразмерная частотная отстройка на *n*-ом переходе $n-1 \rightleftharpoons n$, $\Lambda = \mu_{0,1} \mathbf{E}_l / 2\hbar$ — частота Раби. Решение уравнений (1) ищем в виде одного из выражений:

$$a_{n}(t) = e^{is_{n}t}b_{n}(t) = e^{is_{n}t}\int_{A}^{B}\sigma(x) p_{0} p_{n}(x) e^{ixxt} dx \quad unu = e^{is_{n}t}\sum_{x=0}^{N}\sigma(x) p_{0} p_{n}(x) e^{ixxt} , \qquad (2,3)$$

т.е. произведения фазового множителя, не изменяющего населенностей уровней $\rho_n(t) = a_n^*(t)a_n(t) = b_n^*(t)b_n(t)$, и непрерывного или дискретного преобразования Фурье с ортонормированных полиномов $\{p_n(x); n=0,1,...,N;\}$ некоторой системой непрерывной или дискретной переменной x, заданной на некотором интервале $A \le x \le B$ или на дискретной равномерной сетке x = 0, 1, ..., N. Количество полиномов должно совпадать с числом уравнений. Полиномы ортогональны с весовой функцией $\sigma(x)$. Параметры r, s_n в (2,3) есть коэффициенты трехчленного рекуррентного соотношения $\vec{f}_{n+1}p_{n+1}(x) + \vec{f}_n p_{n-1}(x) = [rx + s_n]p_n(x)$, которому удовлетворяют любые ортонормированные полиномы. Для известных ортогональных полиномов коэффициенты f_n , r, s_n известны. В работе доказано, что (2) или (3) будут решениями уравнения (1) с коэффициентами, $f_n = \overline{f}_n$, $\varepsilon_n = s_n - s_{n-1}$. Дана физическая интерпретация выражений (2), (3): спектр Фурье амплитуд $b_n(t)$

Дана физическая интерпретация выражений (2), (3): спектр Фурье амплитуд $b_n(t)$ состоит из спектра (безразмерных) частот x и спектра амплитуд $S_n(x) = \sigma(x) p_0 p_n(x)$, Выбирая полиномы, мы исходим из спектра и по нему находим коэффициенты уравнений (1), амплитуды $a_n(t)$, населенности $\rho_n(t)$, т.е. характеристики квантовой системы и ее динамику в поле излучения. Большое количество изученных полиномов позволит получать точные решения, описывающие динамику разнообразных квантовых систем в когерентных полях излучения. Физические соображения о возможном спектре амплитуд вероятностей квантовой системы вместе с рекуррентным соотношением для полиномов помогает сделать правильный (удачный) выбор последних.

Приведен ряд примеров. В частности, спектр амплитуд в виде полиномов Кравчука $K_n^{(p)}(x; N)$; n = 0, 1, ..., N; 0 переменной <math>x = 0, 1, ..., N дает решение

$$\rho_n(t) = \binom{N}{n} (1 - y(t))^{N-n} y^n(t); \quad y = 4p(1-p)\sin^2\frac{rt}{2}, \qquad r = \frac{1}{\sqrt{p(1-p)N}}.$$
(4)

Это биномиальное распределение. Его параметр y(t; p, N) зависит от времени, частотной отстройки и числа уровней осциллятора. Решение можно выразить через параметры уравнения (1): $y(t) = \frac{1}{N} \left(\frac{2}{r}\right)^2 \sin^2 \left[\frac{r}{2}t\right], \quad r = \sqrt{\varepsilon^2 + \frac{4}{N}}.$ Решение описывает динамику семейства N+1-уровневых квантовых систем с эквидистантными уровнями. В семейство входят гармонический осциллятор $(N \to \infty)$, двухуровневая (N=1), трехуровневая модель с равными моментами переходов (N=2), а также бесконечное количество других осцилляторов Кравчука $(3 \le N < \infty)$ с функцией дипольных моментов $f_n = \sqrt{\frac{n(N+1-n)}{N}}, \quad \varepsilon_n \equiv \varepsilon = \frac{p-q}{\sqrt{pqN}}.$ Осцилляторы возбуждаются

излучением произвольной несущей частоты. Единое описание динамики столь различных систем оказалось возможным благодаря тому, что полиномы Кравчука содержат параметры p и N. Теория ортогональных полиномов является естественным математическим формализмом для аналитического описания когерентной динамики квантовых систем, возбуждаемых лазерным излучением.

УДК535.338.3

О.Федотова¹, О.Хасанов¹, Г.Русецкий¹, Ж.Дежерт², Э.Фрез²

МНОГОГОРБЫЕ ТЕРАГЕРЦОВЫЕ СИМУЛТОНЫ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ СРЕДАХ

¹НПЦ НАНБ по материаловедению, 19 ул. Бровки, Минск 220072 Беларусь <u>khasanov@ifttp.bas-net.by</u>

²LOMA, University of Bordeaux, 351 Cours de la Libération, 33405 Talence Cedex, France

Интенсивно развивающиеся терагерцовые (ТГц) технологии находят применение в неразрушающем контроле, удаленной диагностике и визуализации, молекулярной спектроскопии и спектроскопии отпечатков пальцев, в системах обеспечения безопасности и в мониторинге окружающей среды, в быстродействующей оптической обработке сигналов, химии, биологии, медицине. ТГц устройства контроля, мониторинга и диагностики имеют преимущества над аналогичными приборами, работающими в инфракрасном, радиоволновом и ультразвуковом диапазонах. Замена рентгеновского оборудования на безвредную ТГц-технику значительно повысит эффективность и качество проводимых исследований. ТГц излучение может найти применение там, где необходим непрерывный мониторинг живых объектов, например, при томографических исследованиях, или в постоянно работающих системах безопасности. Развитие методов нелинейной ТГц спектроскопии актуализируется с созданием источников ТГц излучения высокой интенсивности.

В настоящей работе изучаются связанные состояния двух ТГц импульсов пикосекундной длительности, невырожденных по частоте, распространяющихся в кювете с молекулярными парами(аммиак),находясь в резонансе с нижними смежными вращательными переходами. Вращательные состояния с угловым моментом P характеризуются вращательным квантовым числом Jи имеют2J+1подуровней, связанных с проекциейквантового числа полногоуглового момента на молекулярную ось симметрии,обозначаемой проекционным квантовым числом K. Для каждого (J, K) уровня сK>0 выделяют 2 состояния, «+» и «-», связанных с симметрией вращательных волновых функций [1].ТГц импульсы вызывают переходы с правилами отбора: + \leftrightarrow - , $\Delta J=0, \pm 1, \Delta K=0$.

Исследуется взаимодействие двух ТГц импульсов со средой, состоящей из 3уровневой системы и четырех 2-уровневых систем. При этом первый импульс находится в резонансе с нижним переходом 3-уровневой системы (0.6 ТГц), а второй резонансен не только ее верхнему переходу ($K=0,+\leftrightarrow$ -, $J=1\leftrightarrow 2$) с частотой 1.2 ТГц, но и четырем 2-уровневым системам ($K=\pm 1$, $+\leftrightarrow$ -, $J=1\leftrightarrow 2$).Задачасводится к рассмотрению двух ТГц импульсов, распространяющихся в среде с двумя различными мультиплетами, состоящих из трех - и двух - уровневых подсистем [2], соответственно. Изучается когерентный режим взаимодействия обоих импульсов со средой, при их меньшей времен релаксации населенности и фазы. Проводится ллительности поискусловийзахвата В симултондвух ТГц импульсов. Проанализировано распространение как импульсов, сформированных техникой ТГц-шейпинга [3], и содержащихдостаточно большое число циклов, так и импульсов с небольшим количеством циклов. В общем, задача неинтегрируема, значительно отличаясь от проблемы симултонов в оптической спектральной области. С одной стороны, все соответствующие уровни при комнатной температуре населены. С другой стороны, присутствие подсистем с двумя уровнями влияет на условия захвата. Задача усложнена и тем, что сила осциллятора нижнего перехода в два раза меньше, чем верхнего.

В результате исследования выявлено, что более сильный второй импульс с двухгорбым профилем, который резонансен переходам $K=0, \pm 1, J=1 \leftrightarrow 2, +\leftrightarrow - u - \leftrightarrow +,$ и слабый одногорбый импульс, резонансный переходу $K=0, J=0\leftrightarrow 1$, дают начало связанному состоянию, имеющему те же длительностиимпульсов и скорости. Чем сильнее вторая волна и большее расстояние между горбами, тем более слабой может быть первая. В то время как площадь второго импульса близка к 4π , площадь первого импульса может быть значительно меньшей, чем π . Численные эксперименты подтверждают стабильность таких пар на больших расстояниях, что говорит в пользу формирования симултоновили, по крайней мере,квази-симултонов. Стабильность связанного состояния двух импульсовобеспечивается тем, что двугорбый импульс делает среду прозрачной для одногорбого импульса. Согласно нашим оценкам, огибающаявторого импульса немного отличается от 4π кинка.

В условиях адиабатического переноса населенностей возможны другие симултонные решения. Когда первый импульс - гиперболический секанс с площадью 2π , второй пульс может быть многогорбым с нечетным или четным числом горбов. При этом его площадь кратна 2π . Такие пары импульсов также демонстрируют устойчивое со-распространение на конечные расстояния и являются практически квазисимултонами.

Численные решения показывают, что сильный одногорбый 2π - импульс и слабый импульс в форме бризера могут также сформировать устойчивую симултонную пару, которая стабильна на достаточно больших расстояниях, по крайней мере, до 10 см.

Мы анализируем также со-распространение двух импульсов с небольшим количествомциклов при квазирезонансных условиях. Показано, что в этом случае проблема взаимодействия двух ТГц импульсов с молекулярными парами может быть сведена к векторной модели при адиабатическом переносе населенности в трехуровневой подсистеме. Это делает процедуру поиска симултонных решений более легкой.

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант Ф11Ф-009).

- [1] C. H. Townes and A. L. Schawlow.*Microwave Spectroscopy*, McGraw-Hill, New York, 1955
- [2] H. Harde, J. Zhao, M. Wolff, R.A. Cheville, D.R. Grischkowsky. J. Chem. Phys. 105, A 2001. P.6038-6047
- [3] S. Vidal, J. Degert, J. Oberlé, and E. Freysz.J. Opt. Soc. Am. B, Vol. 27, No. 5/May 2010. P.1044-1050
А. Б. Михалычев¹, Д. С. Могилевцев¹, С. Я. Килин¹

МЕТОДЫ КОГЕРЕНТНОЙ И НЕКОГЕРЕНТНОЙ ЗАЩИТЫ НЕКЛАССИЧЕСКИХ СОСТОЯНИЙ ОПТИЧЕСКОГО ПОЛЯ, ГЕНЕРИРУЕМЫХ НЕЛИНЕЙНЫМИ КОГЕРЕНТНЫМИ ПОТЕРЯМИ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь mikhalychev@gmail.com

Разработка преобразования методов квантовых состояний на основе сконструированной представляет область диссипации исследований, активно развивающуюся в настоящее время. К настоящему времени продемонстрирована возможность создания различных типов нелинейных потерь для ионов в ловушках [1] и предложена концепция защиты квантовых состояний на основе диссипативных процессов [2]. Разработан ряд методов применения специальным образом подобранной диссипации для решения задач обработки информации и конструирования ценных квантовых состояний [3,4]. Центральная идея, лежащая в основе данных методов, заключается в приведении системы в требуемое конечное состояние, определяемое только типом присутствующих диссипативных процессов и практически не зависящее от начального состояния. В данном контексте, диссипация представляет важный квантовый ресурс, а не негативное проявление взаимодействия системы с окружением. Например, специальным образом сконструированные нелинейные когерентные потери позволяют преобразовывать когерентные состояния в одиночные фоковские состояния, а также в конечные и счетные суперпозиции фоковских состояний [5,6].

Несмотря на достигнутые к настоящему времени успехи в области разработки методов создания ценных неклассических состояний на основе нелинейных потерь, большинство существующих подходов не позволяют эффективно бороться с разрушением таких состояний линейными потерями, неизбежно присутствующими в системе. Например, наличие обычных однофотонных линейных потерь делает невозможным генерацию *чистых* неклассических состояний любым типом нелинейных потерь [3]. Таким образом, как и в случае приготовления состояний в результате унитарной динамики, при использовании нелинейных потерь как ресурса для генерации неклассических состояний обычно возникает необходимость максимально возможного снижения скорости линейных потерь.

Для решения задачи защиты неклассических состояний от линейной диссипации предлагается использовать дополнительное когерентное или некогерентное возбуждение исследуемой моды поля. В таком случае динамика описывается уравнением

$$\dot{\rho} = -i[H,\rho] + \Gamma(\overline{n}+1)L(a)\rho + \Gamma\overline{n}L(a^{+})\rho + \gamma L(A)\rho,$$

где $L(X)\rho = 2X\rho X^+ - X^+ X\rho - \rho X^+ X$ - супероператор Линдблада; A = af(n) - деформированный оператор уничтожения, характеризующий нелинейные потери; γ , Γ - скорости нелинейных и линейных потерь соответственно; \overline{n} - среднее число

фотонов в модах теплового резервуара, обеспечивающего некогерентную накачку (при ее наличии); $H = -i\Omega(a - a^+)$ - гамильтониан когерентной накачки (при ее наличии).

На рисунке 1 показаны примеры стационарных неклассических состояний, генерируемых нелинейными когерентными потерями при наличии когерентной или тепловой накачки, обеспечивающих защиту неклассических свойств от разрушения присутствующими в системе линейными потерями. Важным свойством когерентной защиты неклассичности является также возможность генерации субпуассоновских состояний нелинейными когерентными потерями со степенной зависимостью деформирующей функции $f(n) \sim n^{\zeta}$ при произвольно больших, но конечных величинах отношения скоростей линейных и нелинейных потерь $\varepsilon = \Gamma / \gamma$.



Рис. Примеры стационарных неклассических состояний, генерируемых нелинейными когерентными потерями и защищаемых от воздействия линейной диссипации когерентной или некогерентной накачкой. (а) Когерентная защита состояния с четным числом фотонов, генерируемого нелинейными потерями, описываемыми деформированным оператором уничтожения A = af(n), f(n) = n для нечетных чисел фотонов и f(n) = 0 - для четных. (б) Тепловая защита неклассических состояний, генерируемых нелинейными потерями, описываемыми оператором $A = a(n-1)^3$. Параметр $\varepsilon = \Gamma / \gamma$ описывает отношение скоростей линейных и нелинейных потерь.

- Poyatos J. F. Quantum Reservoir Engineering with Laser Cooled Trapped Ions. / J. F. Poyatos, J. I. Cirac, P. Zoller // Phys. Rev. Lett. 1996. Vol. 77. P. 4728.
- [2] Kis Z. Nonlinear coherent states of trapped-atom motion. / Z. Kis, W. Vogel, L. Davidovich // Phys. Rev. A. 2001. Vol. 64. P. 033401.
- [3] Kraus B. Preparation of entangled states by quantum Markov processes. / B. Kraus, H. P. Buchler, S. Diehl, A. Kantian, A. Micheli, P. Zoller // Phys. Rev. A. 2008. Vol. 78. P. 042307.
- [4] Verstraete F. Quantum computation and quantum-state engineering driven by dissipation. / F. Verstraete, M. M. Wolf, J. I. Cirac // Nature Phys. 2009. Vol. 5. P. 633.
- [5] Mikhalychev A. Nonlinear coherent loss for generating non-classical states. / A. Mikhalychev, D. Mogilevtsev, S. Kilin // J. Phys. A. 2011. Vol. 44. P. 325307.
- [6] Mikhalychev A.B. Nonlinear coherent loss. / A.B. Mikhalychev, D.S. Mogilevtsev, S.Ya. Kilin // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. 2011. Vol. 14. P. 241.

Д. В. Новицкий

ВЛИЯНИЕ ФОРМЫ ОГИБАЮЩЕЙ СУБПЕРИОДИЧЕСКОГО ИМПУЛЬСА СВЕТА НА ДИНАМИКУ ДВУХУРОВНЕВОЙ СРЕДЫ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь dvnovitsky@tut.by

Под субпериодическим импульсом света (*sub-cycle pulse*) понимается такой волновой пакет, длительность которого меньше одного периода оптических колебаний. Как известно, когда длительность импульса составляет лишь несколько периодов колебаний светового поля (*few-cycle pulses*) и меньше, перестают выполняться широко используемые в теории взаимодействия света с веществом приближения – приближение вращающейся волны (ПВВ) и приближение медленно меняющихся амплитуд (MMA). Поэтому решение задачи о распространении столь коротких импульсов в двухуровневых средах необходимо искать, не прибегая к этим приближениям. Проведенные ранее исследования (см., например, [1]) выявили ряд особенностей в динамике двухуровневой среды, возбуждаемой сверхкороткими импульсами длительностью в несколько периодов, в частности было обнаружено нарушение так называемой теоремы площадей [2].

В настоящей работе изучается отклонение поведения двухуровневой среды от предсказываемого теоремой площадей в случае субпериодических импульсов, описываемых различными огибающими. Численное моделирование распространения таких волновых пакетов проводилось на основе решения системы уравнений Максвелла – Блоха без использования приближений ПВВ и ММА. Подробности, касающиеся метода расчета и проверки его работоспособности, можно найти в работе [3]. Здесь же ограничимся полученными с его помощью результатами.

Теорема площадей подразумевает, что состояние, в котором оказывается двухуровневая среда после взаимодействия с импульсом света, зависит от площади последнего. Если площадь равна $n\pi$ (n – целое число), среда после прохождения импульса либо останется в исходном (основном) состоянии, либо будет инвертирована (перейдет в возбужденное состояние) в зависимости от того, какие значения принимает число n – четные или нечетные. Ранее было показано [4], что субпериодические 2π -импульсы не возвращают среду точно в основное состояние, теряя небольшую часть своей энергии при распространении. Проведенные нами расчеты показали, что отклонение от теоремы площадей становится гораздо более заметным при увеличении площади субпериодических импульсов (n > 2). Причина состоит в том, что разность населенностей уровней не успевает провести полный цикл возбуждений и девозбуждений при воздействии столь коротких волновых пакетов большой площади.

В результате воздействия субпериодического импульса, характеризуемого целым числом n, среда оказывается в состоянии, промежуточном между основным и инвертированным. Более того, нарушение теоремы площадей сопровождается возникновением зависимости разности населенностей w_f , характеризующей конечное

состояние среды, от формы огибающей импульса. Нами были рассмотрены импульсы двух форм – с гауссовой огибающей (*случай 1*) и с огибающей, описываемой функцией гиперболического косинуса (*случай 2*). Приведем пример. Для 3π -импульсов, содержащих ровно один период, конечная разность населенностей среды совпадает в обоих случаях и равна $w_f \approx 1$ (полная инверсия), что говорит о приблизительном выполнении теоремы площадей. Однако если импульсы содержат лишь полпериода, то в *случае 1* расчет дает $w_f \approx -0.25$, а в *случае 2* – $w_f \approx 0.1$. Результаты вычислений показывают, что при уменьшении длительности импульсов конечное состояние среды быстрее отклоняется от соответствующего теореме площадей в случае гауссовых субпериодических пакетов. Сильную зависимость динамики двухуровневой среды от формы огибающей следует учитывать при проведении экспериментов со столь короткими импульсами. Обнаруженная закономерность также позволяет говорить о дополнительном параметре (форма импульса), позволяющем воздействовать на поведение системы и контролировать ее итоговое состояние.

Более подробное обсуждение этих результатов можно найти в работе [3].

- Ziolkowski R. W. Ultrafast pulse interactions with two-level atoms. / R. W. Ziolkowski, J. M. Arnold, D. M. Gogny // Phys. Rev. A. – 1995. – V. 52. – P. 3082.
- [2] Hughes S. Breakdown of the area theorem: Carrier-wave Rabi flopping of femtosecond optical pulses. / S. Hughes // Phys. Rev. Lett. – 1998. – V. 81. – P. 3363.
- [3] Novitsky D. V. Propagation of subcycle pulses in a two-level medium: Area-theorem breakdown and pulse shape. / D. V. Novitsky // Phys. Rev. A. – 2012. – V. 86. – P. 063835.
- [4] Tarasishin A. V. Evolution of ultrashort light pulses in a two-level medium visualized with the finite-difference time domain technique. // A. V. Tarasishin, S. A. Magnitskii, V. A. Shuvaev, A. M. Zheltikov // Opt. Express. – 2001. – V. 8. – P. 452.

Р. А. Власов¹, А. М. Лемеза¹, М. Г. Гладуш²

РЕЗОНАНСНАЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИЯ ОПТИЧЕСКИ ПЛОТНЫХ АНСАМБЛЕЙ ТРЁХУРОВНЕВЫХ РЕЗОНАНСНЫХ ЦЕНТРОВ В УСЛОВИЯХ АВТОКОЛЕБАНИЙ НАСЕЛЕННОСТИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УРОВНЕЙ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

² Институт спектроскопии РАН, ул. Физическая, 5, 142190 г. Москва, г. Троицк, Российская Федерация mglad@isan.troitsk.ru

При взаимодействии излучения со средой отклик отдельного резонансного центра на внешнее воздействие существенным образом зависит его окружения. Как правило, кристаллическая окружающий резонансный центр диэлектрик, решетка. близкорасположенные резонансные центры такого же типа оказывают существенное влияние на параметры, определяющие его отклик на внешнее воздействие и используемые для описания его динамики во внешнем поле. В рамках самой простой двухуровневой модели резонансного центра динамика системы описывается уравнениями Блоха [1], параметрами в которых являются отстройка частоты Δ возбуждающего поля ω_0 от резонанса двухуровневого резонансного центра ω_{12} , скорости продольной γ_1 и поперечной релаксации γ_2 , частота Раби $\Omega = \mathbf{\mu} \cdot \mathbf{E} / \hbar$, где E - внешнее электромагнитное поле, **µ** - матричный момент дипольного перехода. Вследствие влияния окружения упомянутые параметры становятся функциями атомных переменных.

Динамика населенности энергетических уровней резонансных центров во внешнем поле в условиях их большой концентрации, как правило, определятся как внешним полем, действующим на систему, так и локальным полем наведенных диполей (ближними диполь-дипольными взаимодействиями). Для учета влияния локального поля на динамику оптически плотного ансамбля двухуровневых атомов [2] достаточно формально заменить в уравнениях Блоха макроскопическое поле Е (или \mathbf{E}_{loc} стандартной концепции Лоренца частоту Раби) локальным согласно $E_{loc} \rightarrow E + 4\pi P/3$ [3]. Очевидно, что замена параметров подобного рода привносит нелинейность в материальные уравнения Блоха. В частности, вследствие перенормировки действующего поля в уравнениях Блоха для поляризации появляется член пропорциональный произведению разности населенности на поляризацию среды N·P. Эта нелинейная добавка приводит к новым качественным и количественным изменениям в протекания уже известных физических явлений, а также к появлению эффектов и явлений, наиболее яркие из ряда новых которых: явление внутренней (безрезонаторной) оптической бистабильности и сдвиг Лоренца.

В тоже время, можно показать [4], что влияние локального поля (даже в отсутствие внешней обратной связи) может приводить к более сложной динамике оптически плотных ансамблей многоуровневых резонансных центров в поле электромагнитной волны стационарной интенсивности – возникновению

автоколебаний населенности энергетических уровней. В результате таких автоколебаний спектрально-полевые характеристики ансамбля резонансных центров могут существенно измениться.

В настоящей работе предлагается один из возможных способов обнаружения явления автоколебаний населенности энергетических уровней резонансных центров в оптически плотных ансамблях. Предлагаемый способ основан на измерении спектров резонансной флуоресценции и поглощения плотного ансамбля резонансных центров во внешнем поле стационарной интенсивности. Для предсказания вида наблюдаемых спектров резонансной флуоресценции и поглощения в работе используется метод вычисления, основанный на решении самосогласованных уравнений для материальной и полевой подсистем, получаемых из цепочки уравнений Боголюбова-Борна-Грина-Кирквуда-Ивона одночастичных матриц плотности для И многочастичных корреляционных операторов. С использованием данного метода, при минимуме феноменологических предположений удается получить замкнутую систему уравнений, описывающую как динамику ансамбля резонансных центров во внешнем поле, так и его спектральные характеристики.

Вычисления были проведены для плотного ансамбля трёхуровневых резонансных центров с конфигурацией энергетических уровней V-типа. Расчеты показали, что вследствие автоколебаний населённости энергетических уровней происходит расщепление пиков спектров резонансной флуоресценции и поглощения. Данный факт может быть использован для экспериментального наблюдения и исследования автоколебаний возникающих вследствие влияния локального поля. Важным выводом проведенного исследования является следствие, дающее право утверждать, что описанный эффект может иметь место и для ансамблей резонансных центров с числом энергетически уровней больше трех, а также в иных конфигурациях энергетических уровней трехуровневых атомов.

- [1] Ален, Л. Оптический резонанс и двухуровневые атомы/ Л. Ален, Дж. Эберли //. М.: Мир, 1978.
- [2] Dowling, J.P. Near dipole-dipole effects in lasing without inversion: An enhancement of gain and absorptionless index of refraction/ J.P. Dowling, M.C. Bowden // Phys. Rev. Lett. - 1993. - Vol. 70. - P. 1421-1424.
- [3] Борн, М. Основы оптики / М. Борн, Э. Вольф. Пер. с англ., 2-е изд. Москва: Наука, 1970. 720 с.
- [4] Vlasov, R.A. Dynamical instabilities of spectroscopic transitions in dense resonant media / R.A. Vlasov, A.M. Lemeza, M. G. Gladush // Laser Phys. Lett. - 2013. - Vol. 10 -045401.

УДК 535:621.373.8

О.Х. Хасанов, Г.А. Русецкий

ГЕНЕРАЦИЯ ЛАЗЕРОВ НА КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ: ВЛИЯНИЕ ЭФФЕКТОВ ЛОКАЛЬНОГО ПОЛЯ

ГНПО "Научно-практический центр НАН Беларуси по материаловедению", П. Бровки 19, Минск, Беларусь Grischika@tut.by

Одним из основных свойств квантовых точек (КТ) является квантовое ограничение движения электрона в трех направлениях, которое приводит к дискретному водородоподобному спектру и большой энергии связи экситонов. В этих условиях может в значительной степени проявляться влияние эффектов локального поля, таких как динамический сдвиг частоты поглощения (ДСЧ) и нелинейность фазовой релаксации (НФР) на оптические свойства КТ и на генерацию лазеров на КТ. В данной работе на основе модифицированных уравнений Максвелла – Блоха детально изучены режимы генерации лазеров на КТ. Следует отметить, что влияние ДСЧ на нестабильность лазерной генерации в однородно уширенной плотной среде рассматривалось ранее в работе [1]. В отличие от этой работы мы учитываем оба эффекта локального поля и сравниваем их влияние в целом на режимы генерации лазеров на КТ и на пороги генерации в частности. Нелинейность фазовой релаксации в основной системе уравнений описывается через зависимость ее скорости от населенности верхнего резонансного уровня ρ_{22} : $\gamma_2 = \gamma_{20}(1 + \alpha \rho_{22})$, где параметр α характеризует эту нелинейность. Решая систему уравнений в стационарном случае можно найти четыре стационарных состояния: одно выключенное состояние и три состояния генерации, которые обозначим для удобства 1, 2 и 3 и охарактеризуем позже. Устойчивость стационарных состояний исследовалась путем анализа собственных значений линеаризированой системы уравнений вблизи стационарных значений.

Режимы генерации можно охарактеризовать с помощью параметров накачки, а именно: параметр накачки r_a соответствует первому порогу генерации, когда происходит переход из выключенного состояния в состояние стабильной генерации; параметр r_b соответествует второму порогу генерации, при котором генерация переходит из стабильного в нестабильный режим или в выключенное состояние; и, наконец, параметр r_c , который определяет область нестабильности выключенного состояния.

Как показал анализ, ДСЧ оказывает следующее влияние на генерацию лазеров на квантовых точках. Для уровней накачки меньших чем r_a единственное стабильное состояние лазера на КТ – выключенное. С ростом накачки для $r \ge r_a$ выключенное состояние становиться нестабильным, а состояние №3, наоборот, стабильным, что означает переход в стабильный режим генерации. При интенсивности накачки большей, чем $r = r_b$ состояние №3 становится нестабильным, а лазер на КТ работает в хаотическом режиме. Таким образом, в этом случае r_b соответствует второму порогу генерации. Когда накачка больше r_c , то интенсивность состояния №1 положительна,

однако состояние нестабильно. В то же время становится стабильно выключенное состояние в результате – отсутствие генерации.

Нелинейность фазовой релаксации приводит к дополнительному стационарному состоянию ($\mathbb{N}2$), но это состояние неустойчиво во всем интервале параметров. Более того, для достаточно больших значений α стабильное состояние ($\mathbb{N}2$) может сосуществовать с выключенным состоянием, а хаотический режим генерации становиться невозможным. В лазерах на КТ совместное влияние обоих эффектов локального поля увеличивает диапазон стабильной генерации.

Остановимся на влиянии эффектов локального поля на пороги генерации лазеров на КТ. Важно, что эти эффекты зависят от размеров КТ. Если ДСЧ преобладает в КТ малых размеров с сильным квантовым ограничением взаимодействующих электрондырочных пар, то НФР играет более важную роль в КТ больших размеров в условиях интенсивных экситон-экситонных взаимодействий. В промежуточных случаях оба эффекта могут давать сравнимый вклад. Динамический сдвиг частоты поглощения, приводящий к слабому изменению первого порога генерации, в значительной степени уменьшает второй порог генерации. Вместе с тем значение первого порога зависит от знака отстройки от резонанса. Для отрицательных отстроек порог увеличивается, тогда, как для положительных отстроек он уменьшается по сравнению со случаем, когда эффектами локального поля можно пренебречь.

Нелинейность фазовой релаксации также слегка сдвигает первый порог генерации в сторону больших значений накачки, однако в отличие от ДСЧ приводит к значительному увеличению второго порога генерации.

 Fromager M., Laser instabilities in homogeneously broadened dense media/ M. Fromager, M. Brunel, F. Sanchez // Phys. Rev. – 2000. –V. A61. –P. 053804.

С.Я. Килин, В.П. Степанов

КВАНТОВЫЕ СТАТИСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ИЗЛУЧЕНИЯ ОДНОАТОМНОГО ТРЕХУРОВНЕВОГО ЛАЗЕРА

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>11m1t@mail.ru</u>

Основные результаты по статистическим свойствам одноатомного лазера получены в модели атома с двумя уровнями [1]. Именно в рамках этой модели показано, что состояния генерируемого излучения относятся к обобщенным когерентным состояниям [2]. В данной работе анализируются статистические свойства трехуровневого одноатомного лазера, причем модель одноатомного трехуровневого лазера, исследуемая в данной работе, предполагает наличие промежуточного уровня, связанного только с основным состоянием (так называемая V-конфигурация).

Аналогично работе одноатомного двухуровневого лазера, для которого можно условно выделить четыре режима работы в зависимости от величины накачки \underline{a}^2 (рис. 1): квантового (линейного или нелинейного, что определяется соотношениями других параметров) (I), когерентного (II), режима самотушения (III) и теплового (IV),



Рис. 1: Корреляционная функция $g^{(2)}(0)$ в зависимости от величины некогерентной накачки \underline{a}^2 . Параметры: 1) $r_{ac} = 1$, v = 9.5, $r_{ca} = -0.4$, $\eta = 400$; 2) $r_{ac} = 1$, v = 9.5, $r_{ca} = -0.3$, $\eta = 400$; 3) $r_{ac} = 1$, v = 9.5, $r_{ca} = -0.2$, $\eta = 400$; 4) $r_{ac} = 1$, v = 9.5, $r_{ca} = 1$, $\eta = 400$; 5) $r_{ac} = 0$, v = 9.5, $\eta = 400$.



Рис.2: Распределение матрицы плотности $\rho(n)$ при некоторых параметрах. На врезке значения $g^{(2)}(0)$, $g^{(4)}(0)$, n_b , $\langle a^+a \rangle$ и режим работы лазера для соответствующих кривых. Параметры: 1) $\underline{a}^2 = 50$, $r_{ac} = 1$, v = 9.5, $r_{ca} = 1$, $\eta = 400$; 2) $\underline{a}^2 = 50$, $r_{ac} = 0.1$, v = 1, $r_{ca} = 1$, $\eta = 400$; 3) $\underline{a}^2 = 10$, $r_{ac} = 0.1$, v = -0.49, $r_{ca} = -0.48$, $\eta = 400$; 4) $\underline{a}^2 = 100$, $r_{ac} = 0.3$, v = -0.4, $r_{ca} = -0.3$, $\eta = 400$; 5) $\underline{a}^2 = 6$, $r_{ac} = 0.1$, v = -0.3, $r_{ca} = -0.4$, $\eta = 400$.

для трехуровневого атома также можно выделить подобные четыре режима работы. Однако характерное поведение и статистические свойства создаваемого излучения в этих режимах будут отличаться от двухуровневого варианта (рис. 1, кривая 5 – случай двухуровневого лазера).

Основная особенность рассматриваемого трехуровневого лазера, которая приводит к отмеченным выше особенностям статистических характеристик излучения в сравнении с двухуровневым одноатомным лазером [1], является наличие дополнительного канала излучения, невозмущаемым внутрирезонаторным полем. Для моментов времени нахождения атома в этом состоянии поле изменяется вследствие внутрирезонаторных потерь, и, как следствие, состояние поля стремится к вакуумному. В те же моменты времени, когда атом находится в состояниях, взаимодействующих с резонаторной модой поля, процессы вынужденного и спонтанного испускания, а также процессы потерь фотонов из-за конечной добротности резонатора формируют полевые состояния, для которых наиболее вероятным оказывается ненулевые значения чисел фотонов. Комбинация этих двух каналов формирования излучения приводит к возможности получения бимодальной статистики фотонов (рис. 2), которая не реализуется для одноатомного двухуровневого лазера. Наиболее явно данная особенность проявляется. когда скорость возбуждения невозмущаемого и скорость ухода фотонов из резонатора внутрирезонаторным полем уровня превышают скорость ухода с этого уровня. В этом случае формируется излучение, степень когерентности которого превышает степень когерентности теплового излучения $(g^{(2)}(0)>2)$ (Рис. 1, кривые 1, 2, 3). Такие состояния поля относятся к сверххаотическим [3].

Также в работе показано, что состояние поля в любом из режимов работы лазера описывается универсальным образом через собственные функции деформированных операторов уничтожения [4]. На основе представления уравнений для матрицы плотности в виде трех балансных уравнений, описывающих, соответственно, энергетический баланс фотонов в системе «атом+поле», баланс числа переходов на нерезонансном уровне и баланс по полевой подсистеме, найдены выражения для вероятностей спонтанных внутрирезонаторных переходов, которые в отличие от случая свободного пространства зависят от числа фотонов в резонаторе. Данный результат еще раз подтверждает продуктивность термодинамического (балансного) подхода к описанию процессов взаимодействия света с веществом, активно используемого в работах Б.И. Степанова [5].

- [1] Карлович Т.Б., Килин С.Я. Одноатомный лазер. Когерентные и неклассические эффекты в режиме сильной атомно-полевой корреляции. / Т.Б. Карлович, С.Я. Килин // ЖЭТФ. 2002. Т. 122. № 10. С. 933–950.
- [2] Kilin S.Ya., Mikhalychev A.B. Single-atom laser generates nonlinear coherent states. / S.Ya. Kilin, A.B. Mikhalychev // Phys. Rev. A. - 2012. - T. 85. - V. 6. - P. 063817.
- [3] Килин С.Я. Квантовая оптика: поля и их детектирование / С.Я. Килин // Мн. 1990. С. 60-68.
- [4] Man'ko V. I., Marmo G., Sudarshan E.C.G., Zaccaria F. f-oscillators and nonlinear coherent states. / V. I. Man'ko, G. Marmo, E.C.G. Sudarshan, F. Zaccaria //Phys. Scr. – 1997. – T. 55. – 5. – P. 528.
- [5] Степанов Б.И., Грибковский В.П. Нелинейные оптические явления в системе частиц с тремя уровнями энергии. / Б.И. Степанов, В.П. Грибковский // Известия академии наук СССР. 1960. Т. XXIV. № 5. С. 534–538.

УДК 535 012.2: 621.373.826.038.82

Л.П. Свирина

КИРАЛЬНАЯ И АКИРАЛЬНАЯ СИММЕТРИЯ В ДИНАМИКЕ АНИЗОТРОПНЫХ ЛАЗЕРНЫХ СИСТЕМ

Белорусский национальный технический университет пр. Независимости, 65, 220027, г.Минск, Беларусь Isvirina57@yandex.ru

Лазерная динамика проявила в эксперименте огромное количество математических законов, присущих нелинейным системам, благодаря чему методы качественной теории дифференциальных уравнений вошли в обиход при изучении процессов эволюции в различных областях человеческой деятельности.

Учет векторного характера электромагнитного поля предполагает появление радикально нового свойства – инвариантности оптической и лазерной системы по отношению к преобразованию состояния поляризации излучения. Эффекты симметрии носят междисциплинарный характер, их исследование в оптических и лазерных системах может оказаться полезным для объяснения подобных эффектов в нелинейных системах различного физического происхождения: в биологии, экономике, информатике, медицине, и т.д.

Как показано в [1], в анизотропных лазерных системах, обладающих инволютивной симметрией, которая определяется как $G^2 = id$, где G – преобразование симметрии, возможны периодические колебания с различными свойствами симметрии: симметричный S-цикл и асимметричный М-цикл. Симметрия этих решений аналогична симметрии акиральных и киральных биологических макромолекул (см., напр., [2]). Решения различными свойствами симметрии претерпевают различные с последовательности допустимых бифуркаций, а разложение S-цикла на два М-цикла (возникновение S-цикла в результате слияния двух М-циклов) представляет собой явление нарушения (восстановления) симметрии, которое описывается бифуркацией типа вилки для периодического решения.

Изучение эволюции решений с киральной и акиральной симметрией в анизотропных лазерных системах может оказаться полезным для понимания процессов эволюции в биологии, связанных с происхождением жизни на Земле. Газовые лазеры класса-А, теория которых достаточно хорошо развита, позволяют изучить экспериментально влияние различных физических механизмов, многие из которых существуют или могут быть ассоциированы с механизмами, существующими в природе.

Мы рассмотрим две лазерные системы, модели которых апробированы в эксперименте, и выясним, каким образом конкуренция анизотропии среды и резонатора, продольное магнитное поле, многомодовое взаимодействие, линейная связь генерируемых волн за счет обратного рассеяния, а также случайные флуктуации, оказывают влияние на поведение режимов генерации с киральной и акиральной симметрией [3].

наложении синусоидального продольного При магнитного поля с напряженностью Н и частотой ω_f на активную среду двухчастотного газового лазера Sцикл, возникающий из-за конкуренции анизотропии среды и анизотропии резонатора, существует внутри резонанса (1/1). При увеличении Н и постоянной частоте модуляции происходит нарушение поляризационной симметрии: S-цикл распадается на два Мцикла. Выбор одного из двух М-циклов в генерации регулируется изменением знака поля. Дальнейшее увеличение напряженности магнитного Η приводит к восстановлению поляризационной симметрии, при этом два М-цикла сливаются и исчезают. Далее фиксируется двумерный симметричный S-тор, претерпевающий резонансы высоких порядков, что подтверждается обнаружением долгопериодических сложных колебаний с периодами 7Т и 9Т, где Т – период внешнего воздействия. При наложении помимо синусоидального постоянного продольного магнитного поля на активную среду была обнаружена бистабильность асимметричных предельных циклов I и II рода (с колебаниями интенсивности и эллиптичности и с вращением азимута), а также экспериментально наблюдаемый эффект изменения знака вращения азимута.

В четырехчастотном кольцевом газовом лазере с линейной связью встречных волн с эллиптическими неортогональными состояниями поляризации S-цикл возникает при потере устойчивости режимом генерации двух стоячих волн, а М-цикл – четырех бегущих волн. Спонтанное нарушение фазовой симметрии происходит при переходе от режима генерации стоячих волн к режиму генерации бегущих волн. При этом детерминированного через возможно возникновение асимметричного xaoca последовательность бифуркаций удвоения М- цикла. В области управляющих параметров, где возникает детерминированный хаос, возможно сосуществование аттракторов с различной топологией – мультиистабиильность: в зависимости от начальных условий здесь возможен S-цикл, M- аттрактор Фейгенбаума, а также Mаттрактор, возникающий при пересечении бассейнов притяжения двух аттракторов Фейгенбаума.

При малых величинах коэффициента линейной связи был обнаружен М-цикл II рода с колебаниями интенсивности одной из волн вблизи порога генерации, что вызывало чувствительность этого режима к воздействию случайных флуктуаций. В присутствии δ- коррелированного белого шума при увеличении отстройки вначале возникали стохастические колебания, затем режим асимметричных хаотических колебаний, за которым следовал М-цикл со сложной формой колебаний, далее вследствие бифуркации типа вилки возникал S-цикл, который терял устойчивость и сменялся симметричным хаосом типа перемежаемости, завершаясь стационарным режимом генерации двух стоячих волн.

- [1] Svirina L.P. Polarization symmetry breaking and restoration in vector-field lasers.
 / L.P. Svirina // Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics.- 2001. Vol. 3.
 -P. S133.
- [2] Аветистов В.А. Физические аспекты нарушения зеркальной симметрии биоорганического мира / В.А. Аветистов, В.И. Гольданский // УФН – 1996. – Т. 166. – С. 873.

[3] Svirina L. P. Chiral and achiral symmetry in dynamics of vector-field lasers / L.P. Svirina // Proceedings of SPIE – 2012. – Vol. 8337. – P. 83370H-1.

Спектроскопия

УДК 535.37:[546.21+547.96]

Б. М. Джагаров

ФОТОСЕНСИБИЛИЗИРОВАННОЕ ОБРАЗОВАНИЕ И ИЗЛУЧАТЕЛЬНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ ВОЗБУЖДЁННОГО ЭЛЕКТРОННОГО ¹Д_g СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО КИСЛОРОДА

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь bmd@imaph.bas-net.by

Настоящий доклад автор посвящает памяти своего учителя академика Г.П. Гуриновича (26.04.1933г. – 26.02.1994г.). На протяжении всей своей научной деятельности Г.П. Гуринович проявлял постоянный интерес к изучению молекулярного кислорода – как его собственных спектральных и физико-химических свойств, так и механизма фотоиндуцированных процессов с участием этой молекулы. Г.П. Гуринович был инициатором и самым непосредственным и увлечённым участником целого ряда исследований, приведших к получению принципиально новых результатов.

Молекулярный кислород O_2 играет определяющую и незаменимую роль в природе. Особое место в изучении явлений с его участием занимает установление механизма и динамики фотоиндуцированных процессов и реакций, с участием этой гомоядерной двухатомной молекулы, которая, несмотря на свою сравнительную простоту, обладает целым рядом уникальных свойств, связанных, главным образом, с её электронной структурой в основном триплетном состоянии, обусловленной наличием двух неспаренных электронов, и с присутствием двух низкоэнергетичных электронных синглетных состояний.

В представленном докладе автор будет опираться на результаты, полученные в лаборатории фотоники молекул (ЛФМ) Института физики НАН Беларуси, главным фотосенсибилизированного образом, по изучению процесса образования молекулярного синглетного кислорода, основного химически активного реагента многих реакций, в том числе тех, которые составляют основу фотодинамического разрушения биотканей. В докладе будут представлены основные этапы развития предложенного и реализованного в ЛФМ метода прямой регистрации люминесценции молекулярного синглетного кислорода, с помощью которого были выполнены пионерские исследования спектрально-кинетических характеристик этого вида свечения в различных средах [1-2]. При этом особое внимание будет уделено объяснению физической природы двух сопряжённых процессов: кислородного тушения возбуждённых состояний сложных молекул и фотосенсибилизированного перевода молекулы О₂ в возбуждённое синглетное состояние.

В работах ЛФМ было показано, что практически для всех соединений класса, к которому относится хлорофилл, каждый акт тушения триплетного состояния приводит к одновременному переводу молекулы O_2 в низшее возбуждённое синглетное ${}^1\Delta_g$ -состояние. На основании исследования свыше 100 различных соединений в средах с различными физико-химическими свойствами было установлено влияние спектроскопических и химических свойств молекул сенсибилизатора, вязкости и

полярности на механизм и динамику кислородного тушения люминесценции и триплетного состояния органических молекул.

С помощью лазерной кинетической флуорометрии были определены излучательные константы скорости k_r люминесценции синглетного кислорода O_2 ($^1\Delta_g$) в растворах с закономерно изменяющимися диэлектрическими свойствами. Показано, что наблюдаемые изменения излучательных констант скоростей k_r обусловлены как собственными свойствами излучающей молекулы кислорода, так и свойствами внешней среды, которые определяют фактор локального поля и плотность конечных состояний поля [3].

Теоретические исследования продемонстрировали возможность модификации константы скорости k_r спонтанного излучательного перехода ${}^{1}\Delta_g \rightarrow {}^{3}\Sigma_g^{-}$ вблизи диэлектрических модельных структур (наподобие молекулы гемоглобина). Было показано, что несмотря на небольшие размеры подобного диэлектрического объекта, нельзя пренебрегать влиянием его формы. В результате следует ожидать разгорание или подавление величины k_r как вблизи поверхности биологических макромолекул, так и внутри её белковой матрицы [4].

Специальные эксперименты показали, что при фотодиссоциации молекулы кислорода от гемоглобина и миоглобина не регистрируется появление синглетного кислорода. Это не исключает возможность появления данной активной формы кислорода внутри белка вблизи гемового железа с последующей его безызлучательной дезактивацией, возможность которой обсуждается [5].

В заключении, в докладе будет представлено обсуждение планов будущих исследований фотоиндуцированных и фотосенсибилизированных процессов с участием молекулярного кислорода.

- [1] К.И. Салохиддинов, И.М. Бытева, Б.М. Джагаров Длительность люминесценции синглетного кислорода в растворах при импульсном лазерном возбуждении // Оптика и спектроскопия. 1979. Т. 47, вып. 5. С. 881.
- [2] Лазерный флуорометр с наносекундным разрешением для ближнего И.К.-диапазона / В.А. Галиевский и др. // ПТЭ. 2010. № 4 С. 109.
- [3] Влияние диэлектрических свойств среды на спонтанное излучение молекулярного синглетного кислорода / Б.М. Джагаров и др. // ЖПС 2012. Т.79, № 6. С.869.
- [4] Spontaneous emission of singlet oxygen near dielectric nano-objects and radiative diagnostics of bio-objects / D. Mogilevtsev et al. // J. Fluoresc. – 2012. – Vol. 22. – P.1415.
- [5] Does photodissociation of molecular oxygen from myoglobin and hemoglobin yield singlet oxygen? / S.V. Lepeshkevich et al. // Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology. – 2013. – Vol. 120. – P.130.

УДК 535.373.3: 541.14: 539.19 Е. И. Сагун¹, Э. И. Зенькевич², В. Н. Кнюкшто¹, Н. В. Ивашин¹

СТРУКТУРА И МЕХАНИЗМЫ МЕЖХРОМОФОРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В МУЛЬТИМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСАХ, ОСНОВАННЫХ НА ТЕТРАПИРРОЛЬНЫХ МАКРОЦИКЛАХ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

² Белорусский национальный технический университет, Минск, Беларусь zenkev@tut.by

С начала 80-х годов в лаборатории фотоники молекул под руководством академика Г.П. Гуриновича были начаты систематические экспериментальные и теоретические исследования в области *супрамолекулярной химии* по изучению новых типов структурно-организованных тетрапиррольных ансамблей: химических гомо- и гетеродимеров, связанных мостиками различной природы, а также основанных на направленных координационных взаимодействиях самоорганизованных триадных и пентадных комплексов порфиринов и хлоринов.



Рис. 1. Схематическое представление структур мультипорфириновых комплексов: химический гетеродимер (а), триадный (б) и пентадный (в) комплексы, связанные фенильным (Ph) спейсером

Изучены структура, фотофизика и механизмы межхромофорных взаимодействий в мультипорфириновых ансамблях различного типа. Показано, что спектральноэнергетические свойства таких систем обусловлены экситонными взаимодействиями, эффектами экстра-лигандирования и электронными свойствами спейсеров (связующих молекулярных фрагментов). Установлено, что: (а) образование химически-связанных димеров порфиринов и хлоринов приводит к батохромному смещению спектра поглощения и сопровождается в ряде случае экситонным расщеплением В- и Q-полос поглощения; (б) межхромофорные взаимодействия практически не влияют на свойства и фотофизические характеристики возбужденных S₁- и T₁-электронных состояний хромофоров (отсутствует концентрационное тушение люминесценции).

Оптимизация геометрии комплексов проводилась методом функционала плотности (DFT) с использованием гибридного обменно-корреляционного функционала B3LYP и базиса 6-31g(d). На основании экспериментальных данных и теоретических расчетов установлена структурная организация комплексов, получена информация по энергетике электронных взаимодействий компонент, а также определены константы скорости миграции энергии ($k^{M9} \sim 10^{11} c^{-1}$) и переноса электрона ($k^{\Phi\Pi\Im\pi} \sim 2.7 \cdot 10^9 c^{-1}$) [1].

Энергии нижних возбужденных S₁- и T₁-электронных состояний комплексов были рассчитаны методом ZINDO/S. Показано, что наличие в комплексах идентичных молекул приводит к формированию экситонных состояний с различным вкладом компоненты с переносом заряда. Определены константы скорости миграции энергии и фотоиндуцированного переноса электрона ($k^{\phi\Pi\Im\pi} \sim (1.8 \div 6.0) \times 10^9 \text{ c}^{-1}$), приводящего к формированию в пентаде низколежащего состояния с переносом заряда (ПЗ-состояние). Установлена роль ПЗ-состояния и обменных d- π эффектов в тушении флуоресценции Сu-содержащей пентады. Проведено исследование влияния ориентации взаимодействующих макроциклов, межцентровых расстояний и температуры растворителя на эффективность релаксационных процессов в комплексах [1, 2].

Показано, что константы скорости тушения электронных S_1 - и T_1 -состояний (k_s и k_T) комплексов кислородом зависят от их строения и состава, а также от жёсткости связующего молекулярного фрагмента. Установлено, что стерические препятствия, создаваемые Zn-димерами для контактных взаимодействий π -сопряженной системы порфиринового экстра-лиганда с молекулярным кислородом, уменьшающие константы скорости (k_s и k_T) кислородного тушения («эффекты экранирования»), практически не влияют на значения квантовых выходов генерации синглетного кислорода $\gamma({}^{1}O_{2})$ [3].

Соединение	τ _s , нс	τ_{s}^{0} , HC	$k_{S} \times 10^{9}, M^{-1}c^{-1}$	τ _т , нс	$k_{\rm T} \times 10^9$, $M^{-1}c^{-1}$	γ(¹ O ₂)
Пиридил-замещённые свободные основания порфиринов (экстра-лиганды)						
$H_2P(m-Pyr)_2(Ph)_2$	8.7	11.3	10.1	270	1.4	0.65
$H_2P(m-Pyr)_4$	8.3	10.5	9.7	290	1.3	0.60
Триадные комплексы						
$(ZnHTPP)_2 \otimes H_2P(m-Pyr)_2(Ph)_2$	8.3	10.0	7.9	400	0.9	0.65
$(ZnHTPP)_2 \otimes H_2P(p^Pyr)_2(Ph)_2$	8.2	10.5	10.0	330	1.2	0.68
Пентадный комплекс						
$2(ZnOEP)_2Ph \otimes H_2P(m-Pyr)_4$	-	-	-	680	0.5	0.64

Таблица 1. Времена жизни S₁- и T₁-состояний соединений (τ_s , τ_s^{0} , τ_T) и квантовые выходы генерации ими синглетного кислорода $\gamma({}^{1}O_2)$ в метилциклогексане при 295 К.

- [1] Сагун Е. И. Релаксационные процессы в самоорганизованных триадах на основе Znгетеродимера порфирина. / Е. И. Сагун, Э. И. Зенькевич, В. Н. Кнюкшто, А. М. Шульга, Н. В. Ивашин // Оптика и спектроскопия. – 2009. – Т. 107. – С. 1011.
- [2] Сагун Е. И. Эффекты самосборки и механизмы межхромофорных взаимодействий в пентадах порфиринов. / Е. И. Сагун, Э. И. Зенькевич, В. Н. Кнюкшто, А. М. Шульга, Н. В. Ивашин // Оптика и спектроскопия. – 2010. – Т. 108. – С. 590.
- [3] Сагун Е. И. Влияние экстра-лигандирования на спектрально-кинетические характеристики и процессы тушения возбужденных состояний мультипорфириновых комплексов молекулярным кислородом. / Е. И. Сагун, Э. И. Зенькевич, В. Н. Кнюкшто, А. М. Шульга // Оптика и спектроскопия. – 2011. – Т. 110. – С. 271.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке ГПНИ «Электроника и фотоника - 2.3.03» и ГПНИ «Конвергенция - 3.2.08».

А. С. Старухин

ТОНКОСТРУКТУРНАЯ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ МОЛЕКУЛ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПЕРЕСТРАИВАЕМЫХ ЛАЗЕРОВ НА КРАСИТЕЛЯХ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь astar@imaph.bas-net.by

Практически одновременное создание лазеров на растворах органических молекул в ряде лабораторий мира (включая известные разработки Института физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси) привело к революционным изменениям в возможностях и методиках регистрации спектральных параметров молекулярных систем. Такие уникальные свойства генерации лазеров на красителях как плавная перестройка длинны волны излучения в широком спектральном диапазоне, возможность использования непрерывного и импульсного излучения, а также получение линии генерации с высокой стабильностью и полуширинами нескольких МГц были реализованы в целом ряде коммерчески выпускаемых и лабораторных лазерных комплексах.

В средине прошлого века стало очевидно, что реализация и применение источников возбуждающего излучения в узких спектральных интервалах, основанного на использовании свечения ламп (ксеноновые, ртутные и т.д.) в сочетании с монохроматорами для возбуждения спектров молекул является бесперспективным в связи с низкой плотностью мощности на выходе. Именно лазеры на растворах органических соединений стали незаменимыми, когда требовалось перестраивать возбуждающее излучение и получать спектрально узкие (от 0,1 нм и менее) линии возбуждения с высокой плотностью мощности.

Впервые лазеры на красителях стали использоваться для узкополосного возбуждения компонентов мультиплетов в тонкоструктурных спектрах молекул, помещенных в матрицы Шпольского. Наиболее часто узкополосное возбуждение использовалось для селективного возбуждения свечения отдельных типов центров [1]. Новым применением узкополосного лазерного излучения было его использование для выжигания «провалов» в тонких линиях спектра поглощения порфиринов. В этих условиях была определена однородная ширина линий и по соотношению неопределенностей была оценено время жизни вибронных состояний как 3÷5 pc [2].

Открытое в начале 70^{ых} годов прошлого века явление сужения линий в спектрах люминесценции молекул [3] при гелиевых температурах при селективном возбуждении центров потребовало применения излучения лазеров на красителях для селективного возбуждения свечения центров в неоднородно уширенных спектрах. В связи с исследованиями молекулярных систем с различным положением 0-0 переходов требовалось узкополосное возбуждающее излучение в широком спектральном диапазоне. Для регистрации колебательной структуры спектров флуоресценции оказалось достаточным использование лазерных ситсем с полуширами линии

генерации около 0,1 нм, что обусловлено достаточно большим значением однородной ширины вибронных переходов.

Оказалось, что спектры флуоресценции молекул при селективном возбуждении существенно зависят от длины волны возбуждающего света. Зависимость спектров от длины волны возбуждающего света может быть использована для регистрации частот колебаний в первом возбужденном состоянии. Структура в неоднородно уширенных спектрах поглощения может быть также выявлена и при регистрации спектра возбуждения для узких спектральных интервалов спектра флуоресценции.

Возможен более универсальный метод выявления тонкой структуры в спектрах поглощения основанный на регистрации так называемых "спектров выжигания". В основу метода положен тот факт, что селективное возбуждение способно видоизменять ("выжигать") в неоднородно уширенной системе сайты, поглощающие лазерное излучение.

Спектры фосфоресценции (переход $T_1 \rightarrow S_0$) молекул остаются размытыми при селективном возбуждении в канале S_0 - S_1 . При прямом $S_0 \rightarrow T_1$ были зарегистрированы тонкая структура в спектрах фосфоресценции была зарегистрирована. Проявление тонкой структуры в спектре фосфоресценции только при возбуждении в канале $S_0 \rightarrow T_1$ и ее отсутствие при $S_0 \rightarrow S_1$ возбуждении можно объяснить эффектом потери корреляции в энергиях для одного и того же сайта в S_1 - и T_1 - электронных состояниях.

Описанные выше методы низкотемпературных исследований молекул позволяют изучать молекулярные ансамбли, состоящие из огромного количества молекул. При стандартных условиях эксперимента в зону регистрации попадают около 10¹⁰ молекул. Принципиальным шагом в исследованиях молекул при низких температурах явился переход от регистрации спектров молекулярных ансамблей к изучению оптических характеристик индивидуальных сложных молекул. Для детектирования спектров возбуждения флуоресценции одиночных молекул необходимы лазерные источники с чрезвычайно узкими линиями возбуждения (порядка нескольких МГц), что обусловлено наносекундными временами жизни синглетных состояний. Так для свечения более чем 50 одиночных молекул Mg-TAП в твердой матрице ксенона спектральные профили возбуждения хорошо аппроксимируются контуром Лоренца и распределение по полуширинам линий охватывает область от 20 до 130 МГц с максимумом около 50 ± 10 МГц. При этом низкочастотный край распределения имеет значение около 30 МГц, что коррелирует со временем жизни молекулы в первом синглетном состоянии. При регистрации свечения одиночных молекул реально достигается предел чувствительности методов молекулярной спектроскопии.

- Platenkamp, R.I. Site selection and Zeeman spectroscopy of the S₀ ↔ S₁ transition of magnesium porphin in *n*-octane at 4.2 K / R.I. Platenkamp, M. Noort // J. Mol. Phys.-1982.- Vol. 45. - P. 97.
- [2]. Volker S. Laser photochemistry and hole-burning of chlorine in crystalline *n*-alkane at low temperatures / S. Volker, R. M. Macfarlane // J. Chem. Phys. -1980. - Vol. 73. - P. 4476.
- [3]. Персонов, Р.И. Возникновение тонкой структуры в спектрах флуоресценции сложных молекул при лазерном возбуждении / Р.И. Персонов, Е.И. Альшиц, Л.А. Быковская // Письма в ЖЭТФ.- 1972.- Т. 15. С. 609.

УДК 543.424+535.375

С.Н. Терехов

СПЕКТРОСКОПИЯ РЕЗОНАНСНОГО И ГИГАНТСКОГО КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА ТЕТРАПИРРОЛЬНЫХ МОЛЕКУЛ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь terekhovr@imaph.bas-net.bv

Тетрапиррольные соединения играют огромную роль в природе, участвуя в важнейших биохимических процессах, протекающих в организме человека и фотосинтезе растений. Для изучения свойств тетрапирролов, систем и процессов с их участием широко привлекается метод спектроскопии комбинационого рассеяния (КР), который позволяет селективно (особенно в случае резонансного КР – РКР) получать информацию как о структуре и физико-химических характеристиках порфириновых соединений, так и их взаимодействии с другими молекулами в водных нативных системах.

В докладе будут представлены основные направления исследований тетрапиррольных соединений, которые выполнялись в лаборатории фотоники молекул НАН Б с привлечением методов спектроскопии комбинационного рассеяния света. Коротко будут охарактеризованы наиболее интересные результаты, полученные при изучении с помощью резонансного КР:

- анионных и анион-радикальных форм металлопорфиринов;
- структурных и электронных эффектов периферического замещения, а также неплоскостных искажений в стерически напряженных молекулах;
- взаимодействия водорастворимых катионных порфиринов с ДНК и модельными нуклеиновыми кислотами.

Отдельное внимание будет уделено спектроскопии гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) – направлению, которое интенсивно развивается в лаборатории в последние годы. Спектроскопия ГКР, обладая всеми достоинствами, присущими обычному КР, характеризуется чрезвычайно высокой чувствительностью. Она достигается за счет значительного повышения сечения рассеяния для молекул, адсорбированных на «шероховатых» металлических поверхностях, так называемых ГКР-активных субстратах. При этом сигнал комбинационного рассеяния усиливается в миллион и более раз.

В докладе будут представлены данные по оптимизации методики формирования ГКР-активных материалов на основе посеребренного пористого кремния и анодного оксида алюминия, исследованию их параметров, таких как фактор усиления, однородность и стабильность во времени. Тетрапиррольные молекулы использовались при этом в качестве соединений-аналитов. Кроме того, в докладе будут продемонстрированы возможности метода ГКР для изучения взаимодействия порфиринов с плазмонными структурами (геометрии сорбции, эффектов металлизации), а также для детектирования следовых количеств тетрапиррольного фотосенсибилизатора хлорина е6.

С.Л. Бондарев¹, В.Н. Кнюкшто²

ФЛУОРЕСЦЕНЦИЯ И ФОСФОРЕСЦЕНЦИЯ ФЛАВОНОИДОВ

¹Минский государственный высший радиотехнический колледж, пр. Независимости, 62, 220005, Минск, Беларусь <u>bondarev@imaph.bas-net.by</u> ²Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси,

пр. Независимости, 68, 220072, Минск, Беларусь

Флавоноиды (ФВ) представляют широкий класс природных полифенольных соединений, которые участвуют в реакциях световой фазы фотосинтеза зеленых растений и являются эффективными светофильтрами, защищающими хлоропласты от солнечной радиации [1]. Кроме того, ФВ участвуют в физиологических процессах человека и животных, а также они используются в медицине, фармакологии и пищевой промышленности [2]. В связи с этим необходимо понимание механизмов взаимодействия световой радиации с ФВ, входящих в пигментный слой многих растений и живых организмов. Одним из проявлений такого взаимодействия является свечение ФВ из электронно-возбужденных синглетных и триплетных состояний.

В данной работе исследованы спектроскопические и фотофизические свойства двух известных природных ФВ кверцетина (КВ) и рутина (РУ), а также синтетического дифлавоноида (ДФВ) в растворах, пленках и поликристаллах при комнатной температуре и 77 К. Использовались РУ и КВ из Aldrich, синтез 3,7-дигидрокси-2,8-ди(4-метоксифенил)-4H,6H-пирано[3,2-g]хромен-4,6-диона (ДФВ)описан в [3].



Рис. 1. Молекулярные структуры кверцегина (а), рутина (б) и ДФВ (в)

Из представленных на рис. 2 и 3 спектров поглощении и флуоресценции видно, что если спектр флуоресценции РУ в метаноле характеризуется одной полосой со стоксовым сдвигом 4000 см⁻¹, то в спектре КВ в ацетонитриле наблюдаются две полосы





Рис. 2.² Спектры поглощения (1), флуорес-а, в Рис. 3. Спектры поглощения (1,2) и флубрес-им ценции (2) и фосфоресценции (3) рутина ценции (3,4) кверцетина (1,3) и ДФВ (2,4)

со сдвигами 3400 см⁻¹ и 9500 см⁻¹, а для ДФВ в толуоле зарегистрирована только одна полоса, но с аномально большим стоксовым сдвигом в 9900 см⁻¹. В случае РУ

спектр флуоресценции обусловлен свечением однополосный из синглетновозбужденного состояния S₁ - формы, которая изображена на рис. 1. Для КВ наряду с коротковолновым свеченим при 410 нм наблюдается также полоса при 550 нм, которая может быть обусловлена таутомером с внутримолекулярно перенесенным протоном (ВПП) в S₁ - состоянии от гидроксильной группы 3-ОН к карбонильной группе в положении 4 или таутомером в кето – форме с ВПП от группы 5-ОН к карбонилу в положении 4. Аномально смещенный в длинноволновую область спектр флуоресценции ДФВ в толуоле (рис. 3), полимерной пленке полиметилметакрилата и поликристаллах обусловлен кето - формой с двумя перенесенными протонами в S₁ состоянии. Ранее нами было показано [3], что процесс ВПП в этом ФВ происходит последовательно в две стадии: первый перенос протона осуществляется за 600 фс, а второй протон переносится в течение 3.1 пс.

Отсутствие батохромно смещенной полосы в РУ можно объяснить образованием водородной связи (ВС) между O(4) и OH-группой в положении 2" глюкозы, в результате чего блокируется образование ВС между 5-OH- и O(4)-группами и таким образом процесс ВПП в S_1 – состоянии молекулы РУ не реализуется. Образование конформации с участием дисахарида в процессах образования ВС с карбонильной группой в положении 4 и OH - группой в положении 3' подтверждается расчетами [4], которые показали наличие глобального минимума для такой конформации.

Для РУ также была обнаружена необычная спектральная зависимость от $\lambda_{B036.}$. Так, спектр флуоресценции (кривая 2, рис. 2) зарегистрирован при $\lambda_{B036.} = 340$ нм в длинноволновой полосе поглощения I, а при $\lambda_{B036.} = 220$ и 260 нм в коротковолновых полосах поглощения II и III свечение отсутствует. Наблюдаемый нами экспериментальный факт можно объяснить тем, что в молекуле РУ отсутствует сопряжение между кольцами В и А, С, и полосы поглощения II и III связаны с переходами в высоколежащие электронные состояния, из которых происходит дезактивация энергии электронного возбуждения, минуя S_I –состояние.

При 77 К в этаноле и метаноле в спектре свечения РУ помимо интенсивной полосы флуоресценции, не показанной на рис. 2, нами обнаружена малоинтенсивная полоса с максимумом при 540 нм, которая отнесена к $T_1 \rightarrow S_0$ - фосфоресценции (кривая 3, рис. 2). Интенсивность фосфоресценции в 14 раз меньше интенсивности флуоресценции, а длительность и частота 0-0 – перехода составляют соответственно величины 0.33 с и 19600 см⁻¹. Столь длинное время жизни T_1 – состояния позволяет отнести наблюдаемое свечение к фосфоресценции (π,π^*) – типа.

На основании полученных данных обсуждаются механизмы безызлучательной дезактивации энергии электронного возбуждения, которые в значительной мере обусловлены внутримолекулярными процессами взаимодействия между активными группами в исследованных флавоноидах. В случае РУ обнаружено усиление безызлучательной дезактивации при возбуждении в высоколежащие состояния, что указывает на высокую эффективность защитных функций этого биологически важного флавоноида при воздействии на хлоропласты растений солнечной радиации.

- [1] J.B. Harborne, C.A. Williams // Phytochemistry. 2000. V. 55. P. 481.
- [2] A. Coghlan // New Sci. 1998. V. 14. P. 14.
- [3] С.Л. Бондарев, В.Н. Кнюкшто, А.Н. Пырко //ОС.-2012. Т. 113.- С. 444.
- [4] P. Matteini, A. Gott, G. Agati // Monatsh. Chem. -2010. V.141. P. 793.

УДК 577.3 + 54:530.145 +539.194+541.2

Н. В. Ивашин, Е. Е. Щупак

РОЛЬ СТРУКТУРНОГО ФАКТОРА В ФОРМИРОВАНИИ ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ И ПУТЕЙ ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНА В ФОТОСИНТЕТИЧЕСКИХ РЕАКЦИОННЫХ ЦЕНТРАХ

Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь ivashin@imaph.bas-net.by

В докладе отражены основные результаты работы авторов по исследованию механизмов первичного разделения заряда и переноса электрона (ПЭ) в фотосинтетических реакционных центрах.

Молекулярно-орбитальная теория использована расчета значений для электронных матричных элементов Н₁₂ взаимодействия состояний, вовлеченных в ПЭ участках различных электрон-транспортных цепей в бактериальных на фотосинтетических реакционных центрах (РЦПб), а также в реакционных центрах фотосистемы I (РЦ ФСІ) и фотосистемы II (РЦ ФСІІ). Полученные данные позволяют объяснить направленность ПЭ в ряде РЦ, предложить механизмы, способствующие предотвращению перехода системы в триплетное возбужденное состояние. Использование молекулярно-орбитальной теории позволило получить изображения молекулярных орбиталей в переходных состояниях ПЭ и тем самым, по сути, "визуализировать" его траектории. На этой основе установлена функциональная роль бикарбонат-иона, негемового железа (Fe²⁺) и ТугD в РЦФСІІ, подтверждена возможность циклического переноса электрона в РЦ ФСП, как способа защиты от фотоингибирования. Выяснены основные структурные элементы РЦ ФСП. вовлеченные в ПЭ на стадиях цитохром $b_{559} \rightarrow (\beta - \kappa a potuh)^+$ и $Q_B^- \rightarrow (цитохром b_{559})^+$. Показано, что в РЦ ФСІ комплекс двух аминокислотных остатков (Arg^{A728} и Trp^{B673}) может выступать в роли акцептора электрона, что определяет различие в константах скорости ПЭ для двух почти идентичных А- и В-ветвей переносчиков электрона.

Для понимания механизма ПЭ в фотосинтетических РЦ большой интерес представляет рассмотрение вопросов, связанных с его колебательной динамикой. В РЦПб она проявляется в частности в наблюдении когерентных осцилляторных компонент в кинетиках вынужденного испускания спецпары Р и заселения состояний Р⁺В_A⁻ и Р⁺Н_A⁻. С целью выяснения природы колебательных мод, вовлеченных в ПЭ, нами с использованием метода теории функционала плотности (DFT) были проведены расчеты геометрии, энергии реорганизации и колебательных спектров молекул бактериохлорофилла (BCl a), а также полуэмпирические расчеты электронных состояний молекул, вовлеченных в процесс ПЭ. Полученные данные позволили показать, что низкочастотные колебания BCl a, преимущественно связанные с торсионными, неплоскими и плоскими деформационными колебаниями боковых заместителей кольца I BCl a, а также с колебанием всего макроцикла относительно имидазольного экстралиганда, связанного с белком, действительно вовлечены в ПЭ. Изменение положения отрицательно заряженного атома кислорода ацетильной группы в процессе колебаний эффективно влияет на энергию состояния с переносом заряда и место локализации электрона после возбуждения Р.

Наиболее интенсивная осцилляторная компонента в кинетиках образования состояния Р⁺В_A⁻ в РЦПб Rhodobacter Sphaeroides связана с вращательной модой молекулы воды W-A, расположенной между Р и В_А. Рассмотрение механизма активизации вращения W-A в процессе первичного разделения заряда потребовало: (a) расчетов точного положения и энергии водородных связей (BC) молекул воды (W-A и W-B), расположенных между первичным донором и акцепторами электрона (B_A и B_B), в основном состоянии РЦ и в состояниях с переносом заряда; (б) моделирования электронных и колебательных состояний возможных продуктов восстановления бактериохлорофилла в растворе и в реакционном центре; (в) расчетов потенциального барьера двойного переноса протона с участием молекулы воды W-A; (г) расчетов редокс-свойств молекул бактериохлорофилла, вовлеченных в первичное разделение заряда: (д) моделирования конформационных состояний РЦ и динамики молекулы воды W-A в состояниях с переносом заряда. На этой основе нами показано, что проявление вращательной моды молекулы W-A при 32 см⁻¹ в кинетиках заселения состояний $P^+B_A^-$ и $P^+H_A^-$ может быть связано со структурной гетерогенностью РЦ и наличием конформации, в которой молекула W-А преимущественно вовлечена в одну ВС (с В_А). Вращение молекулы W-A с фиксированным положением ее атома H, вовлеченного в BC с кето-карбонильной группой В_А, инициируется в результате разделения заряда между половинками спецпары Р и образования состояния P_A⁺P_B⁻. Наличие в РЦ молекулы W-A уменьшает энергию состояния P⁺B_A⁻ на ~600 см⁻¹. Это немного меньше влияния аминокислотного остатка Tyr^{M210} (~870 см⁻¹) и хорошо коррелирует с существенным уменьшением константы скорости ПЭ в мутантных формах РЦ, у которых молекула W-A отсутствует (GM203L) и Туг^{M210} заменен на Phe (YM210F).

Важной предпосылкой выяснения механизмов разделения заряда в РЦ ФСП является установление природы его возбужденных состояний. В докладе представлены результаты проведенного исследования структурных и физико-химических факторов, способствующих локализации возбужденных состояний и определяющих природу первичного донора и акцептора электрона в РЦ ФС II. Продемонстрирована важность учета в квантово-химических расчетах (с использованием нестационарной теории функционала плотности) энергии Q_v-перехода молекул хлорофилла и феофитина влияния ближайшего белкового окружения в радиусе ≤10 Å. Рассчитанные с учетом ЭТОГО обстоятельства экситонные состояния позволяют провести корректное моделирование спектральных свойств нативного РЦ ФСП и ряда его химически модифицированных форм в основном и триплетном состояниях. Показано, что самое нижнее экситонное состояние РЦ ФСІІ формируется с участием возбуждений молекул хлорофилла В_А и феофитина Н_А однако с учетом структурной гетерогенности системы и высокой плотности экситонных состояний велика вероятность локализации возбуждения на спецпаре Р и последующего ПЭ на В_А. Рассчитанные значения H₁₂ и энергии молекулярных орбиталей, вовлеченных в ПЭ, позволяют предположить, что константа скорости разделения заряда между ВА и НА больше, чем между Р и ВА и ПЭ в неактивной В-ветви РЦ ФСІІ блокирован на участке B_B – H_B.

Авторы выражают благодарность ГПНИ «Электроника и фотоника» (задание 2.3.03) и БРФФИ за долговременную финансовую поддержку работ в данном направлении, проф. С. Ларссону (Chalmers University of Technology, Швеция) за многолетнее сотрудничество, а также Вычислительному центру ОИПИ НАН Беларуси за предоставленные вычислительные ресурсы и полезные консультации.

УДК 535.343.32+541.141.7

С. В. Лепешкевич

КИНЕТИКА СВЯЗЫВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО КИСЛОРОДА ГЕМОГЛОБИНОМ ЧЕЛОВЕКА

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь lepeshkevich@imaph.bas-net.by

Гемоглобин – это гемсодержащий белок, обратимо связывающий молекулярный кислород. Гемоглобин является главным компонентом эритроцитов и выполняет две важнейшие биологические функции: транспорт во все органы и части тела молекулярного кислорода (O₂), поглощающегося в легких, и перенос углекислого газа (CO₂) от периферических тканей к дыхательным органам для последующего выведения из организма.

Используя технику лазерной кинетической спектроскопии с микросекундным временным разрешением и позволяющую регистрировать изменения оптической плотности вплоть до 5.10⁻⁶ единиц, были впервые измерены как константы скорости бимолекулярной ассоциации, так и квантовые выходы диссоциации О2 для α и β субъединиц в составе тетрамера оксигемоглобина [1]. Показано, что константы скорости ассоциации и квантовые выходы диссоциации О2 для α и β субъединиц в составе оксигемоглобина заметно отличаются. Предложен и реализован метод измерения сродства О₂ к α и β субъединицам как в изолированном состоянии, так и в составе тетрамера гемоглобина [2]. Преимущество предложенного метода заключается в измерении констант скоростей ассоциации и диссоциации одновременно на одной и той же технике с использованием одних и тех же образцов, что позволяет избежать ошибки отнесении измеренных констант скоростей определенным В К конформационным формам белка. Исследовано влияние природных аллостерических эффекторов (протонов, хлорида натрия и фосфатов) на бимолекулярную оксигенацию а и β субъединиц в составе оксигемоглобина [3,4]. Показано, что уменьшение сродства α и β субъединиц в составе оксигемоглобина под влиянием аллостерических эффекторов проявляется различным образом. Наблюдаемое изменение параметров бимолекулярной оксигенации β субъединицы в присутствии эффекторов было объяснено увеличением внутреннего барьера, контролирующего связывание О2 из области гемового кармана за счет структурных изменений вблизи лиганд связывающего сайта (перемещение Val67(E11) В субъединицы по направлению к атому железа гема) [3]. Были впервые измерены как константы скорости бимолекулярной ассоциации, так и квантовые выходы диссоциации О2 для α и β субъединиц в составе оксигемоглобина инкапсулированного в нанопоры прозрачной золь-гель матрицы [4]. На основании этих данных было показано [4], что изменения параметров бимолекулярной оксигенации α и β субъединиц в составе оксигемоглобина в присутствии аллостерических эффекторов [3,4] обусловлены изменением третичной структуры оксигемоглобина в Rконформации. Применение трех экспериментальных установок лазерной кинетической спектроскопии с пико-, нано- и микросекундным временным разрешением, позволило дать кинетическое описание связывания О2 из внутренних областей гемоглобина насчитывающие два используя при Этом упрощенные модели, состояния, соответствующие положению фотодиссоциированной молекулы О2 во внутренних сайтах белка [5]. Впервые были определены параметры, описывающие геминальную оксигенацию α и β субъединиц в составе оксигемоглобина [5]. Кроме того, методом молекулярной динамики были выполнены расчеты процесса миграции молекулы O₂ в изолированных α и β субъединицах гемоглобина в первые 25 нс после диссоциации [6]. В данной теоретической работе был обнаружен ряд каналов миграции О2 внутри изолированных цепей гемоглобина, а также полости, в которых лиганд находится значительное время в процессе своего движения. Среди этих полостей есть так называемые ксеноновые сайты.

- [1] Лепешкевич С.В., Коновалова Н.В., Джагаров Б.М. Исследование методом лазерной кинетической спектроскопии бимолекулярных стадий реакции оксигенации α- и βсубъединиц гемоглобина человека в R-состоянии // Биохимия. – 2003. – Т. 68. – С. 676-685.
- [2] Dzhagarov B.M., Lepeshkevich S.V. Kinetic studies of differences between α- and βchains of human hemoglobin: an approach for determination of the chain affinity to oxygen // Chem. Phys. Lett. – 2004. – Vol. 390. – P. 59-64.
- [3] Lepeshkevich S.V., Dzhagarov B.M. Mutual effects of proton and sodium chloride on oxygenation of liganded human hemoglobin: oxygen affinities of the α and β subunits // FEBS J. – 2005. – Vol. 272. – P. 6109-6119.
- [4] Lepeshkevich S.V., Parkhats M.V., Stepuro I.I., Dzhagarov B.M. Molecular oxygen binding with α and β subunits within the R quaternary state of human hemoglobin in solutions and porous sol-gel matrices // Biochim. Biophys. Acta. – 2009. – Vol. 1794. – P. 1823-1830.
- [5] Lepeshkevich S.V., Karpiuk J., Sazanovich I.V., Dzhagarov B.M. A kinetic description of dioxygen motion within alpha- and beta-subunits of human hemoglobin in the R-state: geminate and bimolecular stages of the oxygenation reaction // Biochemistry. – 2004. – Vol. 43. – P. 1675-1684.
- [6] Lepeshkevich S.V., Biziuk S.A., Lemeza A.M., Dzhagarov B.M. The kinetics of molecular oxygen migration in the isolated α chains of human hemoglobin as revealed by molecular dynamics simulations and laser kinetic spectroscopy // Biochim. Biophys. Acta. - 2011. – V. 1814. – P.1279-1288.

UDC 537.35

M. Kruk¹, V. Knyukshto¹, V. Savva¹, A. Starukhin¹, W. Maes^{2,3}, T. Ngo⁴, W. Dehaen³

OPTICAL PROPERTIES OF THE FREE BASE CORROLES

¹ B. I. Stepanov Institute of Physics of National Academy of Sciences, pr. Nezavisimosti 68, Minsk 220072, Belarus

kruk@imaph.bas-net.by

² Design & Synthesis of Organic Semiconductors (DSOS), Institute for Materials Research (IMO-IMOMEC), Hasselt University, Universitaire Campus, Agoralaan 1 - Building D, B-3590 Diepenbeek, Belgium

³ Molecular Design and Synthesis, Department of Chemistry, KU Leuven, Celestijnenlaan 200F, B-3001 Leuven, Belgium

⁴ Institut für Chemie und Biochemie - Organische Chemie, Freie Universität Berlin, Takustrasse 3, D-14195 Berlin, Germany

Corroles, contracted tetrapyrrolic macrocycles lacking one *meso*-carbon atom, have emerged as attractive porphyrinoid materials, notably during the last decade, in which novel synthetic pathways toward *meso*-triaryl-substituted corroles and numerous postmacrocyclization functionalization protocols have considerably enlarged the set of available corrole structures and their potential applications. Corrole-based materials are nowadays extensively studied as novel catalysts, antitumor treatment and imaging agents as well as active materials in the design of new sensors and optoelectronic devices.

Asymmetry of the tetrapyrrolic corrole macrocycle (one direct C_{α} - C_{α} dipyrrole linkage instead of the methine C_{α} - C_{m} - C_{α} bridge) leads to lover molecular symmetry of free base corrole (C_s) as compared to that of free base porphyrin (D_{2h}). This can result in two different positions of the three protons in the core of a free-base corrole, i.e. two NH tautomers are not more equivalent and can contribute to the optical properties of free base corroles.

An experimental study has been undertaken to disclose the individual absorption and fluorescence profiles of the two NH tautomers of 10-(4,6-dichloropyrimidin-5-yl)-5,15dimesitylcorrole [1,2]. The bands in the fluorescence spectra at room temperature and below have been assigned to the individual NH tautomers. The Stokes shift between the peaks of the 0-0 transition in absorbance and fluorescence at room temperature was found to be larger for the long wavelength T1 tautomer compared to the short wavelength T2 tautomer (270 cm^{-1} vs. 165 cm⁻¹), indicating that the T1 tautomer structure seems to be more flexible and undergoes slightly larger rearrangements in the excited singlet S_1 state as compared to the T2 tautomer. At low temperatures (4.2–77 K), the solid solution prevents conformational relaxation and no Stokes shift was observed. It was found that the fluorescence from the long wavelength T1 tautomer dominates in the total emission spectrum at room temperature, in contrast to the situation at low temperatures, where the short wavelength T2 tautomer dominates. This phenomenon of temperature-controlled "switching" between the fluorescence emissions from the two corrole NH tautomers is observed for the first time and was explained by a reduced $T2 \rightarrow T1$ tautomerization rate with a decrease in temperature. Energy level diagrams explaining the excitation energy deactivation channels at different temperatures are proposed.

H/D substitution of the core pyrroles also led to a substantial decrease in the NH tautomerization rate, resulting in an increase in the contribution of the T2 tautomer to the total fluorescence spectrum at the expense of the T1 tautomer. A temperature dependence of the fluorescence spectra in the temperature range 277–332 K was observed and used to evaluate the spectral profiles for the individual NH tautomers. The pronounced increase in the overall fluorescence quantum yield upon going from 332 to 277 K was explained in terms of the difference in fluorescence quantum yields of the individual tautomers. The fluorescence quantum yield of the T1 tautomer was found to be as low as 0.045 and 0.065 in EtOH and EtOD solutions, respectively. On the other hand, values of 0.155 and 0.175 were calculated for the T2 tautomer.

The solvent dependence of the absorption and emission spectra of 10-(4,6dichloropyrimidin-5-yl)-5,15-dimesitylcorrole has been studied in a series of solvents [3]. It was shown that dramatic changes in the absorption spectrum in MeCN, acetone, DMF and DMSO are due to the formation of deprotonated $H_2AB_2^-$ corrole species. The relationship of the formation of deprotonated species with physico-chemical solvent properties is discussed in detail, concluding that there is no observable correlation with a single solvent parameter and either multiparameter correlations or specific interactions between the corrole and the solvent molecules should be considered. The possible contribution of the two corrole NH tautomers to this issue has also been considered. The fluorescence properties of the deprotonated *meso*-pyrimidinylcorrole have been characterized. In contrast with previous observations made for other corrole derivatives, it was found that the fluorescence quantum yield of the deprotonated form decreases as compared to the free-base species.

The obtained results demonstrate that pronounced solvent dependent spectral changes in corroles probably originate from several factors. In addition to the contribution due to NH tautomerization, in several cases the free base – deprotonated corrole equilibrium can contribute or even be dominating factor. For future detailed analysis of the photophysical properties of free-base corroles, the contribution of the separate corrole NH tautomers and possible deprotonation should always be taken into account. The results allow clarifying previously observed problems in the interpretation of absorption and fluorescence spectra of both *meso*-pyrimidinylcorroles and, in a more general sense, probably the whole family of *meso*-triarylcorroles, as well as on the understanding of their luminescence properties as a function of temperature.

- [1] Ivanova Y. B. Corrole NH Tautomers: Spectral Features and Individual Protonation / Y. B. Ivanova, V. A. Savva, N. Zh. Mamardashvili, A. S. Starukhin, Th. H. Ngo, W. Dehaen, W. Maes, M. M. Kruk // Journal of Physical Chemistry, A. 2012. Vol. 116, № 44. P. 10683 10694.
- [2] Kruk M. M. Unraveling the Fluorescence Features of Individual Corrole NH Tautomers / M. M. Kruk, Th. H. Ngo, P. Verstappen, A. S. Starukhin, J. Hofkens, W. Dehaen, W. Maes // Journal of Physical Chemistry, A. – 2012. - Vol. 116, № 44. - P. 10695 - 10703.
- [3] Kruk M. M. Solvent-Dependent Deprotonation of meso-Pyrimidinylcorroles: Absorption and Fluorescence Studies / M. M. Kruk, Th. H. Ngo, V. A. Savva, A. S. Starukhin, W. Dehaen, W. Maes // Journal of Physical Chemistry, A. – 2012. - Vol. 116, № 44. - P. 10704 - 10711.

A. Starukhin ^{1,2}, A. Gorskii ², S. Gawinkowski ², L. Gladkov ³, N. Chizhova ⁴, N. Mamardashvilli ⁴, I. Scheblykin ⁵, J. Waluk ²

RESONANCE RAMAN AND IR SPECTRA OF Mg-PORPHYRAZINES

¹ B.I. Stepanov Institute of Physics of Nat. Acad. of Sci., Nezalejnosti Av., 68, 220072, Minsk, Belarus <u>astar@imaph.bas-net.by</u>

² Institute of Physical Chemistry, Polish Acad. of Sci., Kasprzaka 44/52, 01-224, Warsaw, Poland ³ Higher State College of Communication, Skariny Str., 8-2, 220114, Minsk, Belarus

⁴ G.A. Krestov Institute of Solution Chemistry of Russian Academy of Sciences, Akademicheskaya st.1, 153045, Russia

⁵ Lund University, Department of Chemical Physics, Getingevagen, 60, S-221 00, Lund, Sweden

Metallocomplexes with various tetrapyrrollic ligands are of great interest because of their high electronic delocalization, biological significance and numerous potential technological applications. The metallocomplexes of porphyrazines (MePz) and their derivatives are of considerable interest due to many possible applications in various differing fields such as for use in gas sensors, liquid crystals, photovoltaic and other types of solar cell, electrochromic displays.

The basic properties of sublevels structure in vibronic spectra of Pz's in comparison with vibrational modes of porphyrins has not been adequately explored yet. Although the replacement of the *meso*-CH groups in porphyrin by N atoms has pronounced effects on the electronic structure, the set of vibrational modes of Pz's and porphyrins in their electronic ground states, as would be expected, remains very similar. This is because of practically identical nuclear skeleton. Nonetheless, the modification of Pz's structure leads to essential changes of the spectral features.

In this contribution, Raman microscopy and FT-IR spectra of Mg-tetraazaporphyrin (MgTAP) and Mg-tetraazaoctaphenylporphyrin (MgTAOPP) in solid crystal powder at ambient temperature have been recorded and analyzed. Quantum-chemical calculations of the frequencies and the forms of vibrational modes of these compounds were performed. Based on the experimental data and calculations spectral assignments of vibrational modes wasproposed. Special features of the orientation of the aryl rings and its influence of the spectra of MgTAOPP and *meso*-substituted Zn-tetraphenylporphyrin were identified and discussed also.

The structural formulae of MgTAP and MgTAOPP are shown in Figure 1.



Fig. 1. Chemical structures of MgTAP (I) and MgTAOPP (II)

Resonance Raman and FTIR- spectra were recorded for solid powder crystals and for samples, where the compounds have been embedded in KBr pellets. FT-IR spectra were collected from 400 to 3500 cm⁻¹ for solid powder crystals with using Bruker FT-IR ALPHA spectrometer. The Raman spectrum was recorded from 100 to 3500 cm⁻¹, using Renishaw InVia microscopic system. The Ar⁺ (Stellar Pro Modu-Laser, LLC) laser and a He-Ne laser (Renishaw) emitting at 514.5 and 632,8 nm lines, correspondingly, were used for excitation RRS spectra. With a 100^X microscope objective the laser light was focused on a sample; the laser power at the sample was less than 5 mW. The Raman scattered light was recorded by the 1024x256 pixel Peltier-cooled RenCam CCD detector.

It should be noted that RRS spectra of MgTAP should show active vibrations of the A_{1g} , B_{1g} , A_{2g} and B_{2g} even types of symmetry (D_{4h} group). The incorporation of phenyl groups leads to essentially lowering of the symmetry of MgTAOPP in comparison with MgTAP, that caused by orientation of the phenyl groups. However, the set of normal modes can be analyzed in framework of D_{4h} symmetry group, because such approximation is often used for metallocomplexes of porphyrins.

For MgTAP in the spectral range 0-500 cm⁻¹ the frequencies of modes 260, 386, 422 μ 452 cm⁻¹ are increased in comparison with the similar modes of Mg-porphine (221, 362, 402 and 419 cm⁻¹). The main reason of this effect is strengthening of the MeN bond involved in the previously named modes. The modes in spectral range above 1545 cm⁻¹ are absent in Raman spectra of MgTAP, that can be interpreted as decreasing of frequencies of valence modes of C_aN_m bonds. For example, totally symmetric vibration in spectra of Mg-porphine with frequency 1559 cm⁻¹ have similar nature as mode with frequency 1405 cm⁻¹ in MgTAP spectra. It should be noted, that the greatest values of frequencies in the Raman spectrum of MgTAP have the modes involving to C_bC_b bonds.

The symmetry for many normal modes of MgTAOPP has the above mentioned type of symmetry for displacements of the macrocycles atoms only, because in the normal modes the displacements of the porpyrazin core takes place together with the atoms of the phenyl groups. For MgTAOPP the torsion distortion is relatively weak. However even such small torsion has an influence as revealed by the calculations. The above mentioned coupling of inplane and out-of-plane vibrations of MgTAOPP takes place for modes in the range from 400 to 920 cm⁻¹. The lines with frequencies 417, 435, 534, 880 µ 901 cm⁻¹ we assign to modes with participation of phenyl groups. These modes are manifested in RRS as relatively weak lines in the range 500-600 cm⁻¹ and also around 900 cm⁻¹, which are inactive in spectra of MgTAP and metallocoplexes of the porphyrins with alkyl substitutions. The main spectral features of the RRS spectra of MgOPTAP - intensive lines at 1580 и 1602 cm⁻¹, came as a surprise because analogues lines are absent in the TAP spectra and spectra of MgTAP described above. To our opinion these lines correspond to CphCph vibrations of the phenyl groups. This assignment is based on the similarity of frequencies for the valence $C_{ph}C_{ph}$ modes and absence of other modes in this vibrational range in the calculated. High activity of the vibrational modes of phenyl substituents is surprising. The electronic transitions of porphyrins in the visible spectral range have $\pi - \pi^*$ -character and, therefore, the modes of the conjugated macrocycle are activated in Raman spectra under resonant excitation. As was established early, the modes of substituents can be manifested in spectra with noticeable intensities as a result of mixing with the modes of the macrocycle.

A. S. Starukhin¹, M. M. Kruk¹, O. L. Gladkova², I. Scheblykin³

SPECTRAL MANIFESTATION OF DIACID FORMATION FOR OCTALKYLPORPHYRINS IN FLUORESCENCE LINE NARROWING SPECTRA

¹ B.I. Stepanov Institute of Physics of Nat. Acad. of Sci., Nezalejnosti Av., 68, 220072, Minsk, Belaru

astar@imaph.bas-net.by

² Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, 6, P. Browka str., 220013 Minsk, Belarus

<u>olga_gladkova @ tut.by</u>

³ Lund University, Department of Chemical Physics, Getingevagen, 60, S-221 00, Lund,

Sweden

ivan.schebblykin@chemphys.lund.se

Many porphyrins moieties in their natural protein environment are highly distorted from planarity have been observed several years ago. As a result of this interest in the properties of nonplanarity of naturally occurring porphyrins, numerous synthetic model porphyrins have been made which mimic these distortions. The spectroscopic investigations of porphyrins at low temperatures may be very effective for studies of distortions of their planar structure under influence of matrices, different kinds of substitution in structure of porphyrin macrocycle, etc. For molecule of porphine with Mg(II), Zn(II) and Pd(II) ions the effect of stabilization of different spectral forms in solid matrices was recently demonstrated in fluorescence spectra [1].

It is well known that free base porphyrins are transformed in mono- and diprotonated (diacids) forms, when compound reacted with acids [2]. Under such procedure the porphyrin ring is to protonate the one or two available nitrogens and the free base form of the porphyrins are transformed to forms, when the porphyrin macrocycle have a +1 or +2 charges, additionally.

At ambient temperature mono- and diprotonated forms may be easily formed, but at low temperatures only the diprotonated forms of tetrapyrrolic compounds are realized. As well known, the vibronic structure is not manifested in fluorescence spectra of porphyrins in solid solutions even at liquid helium temperature. Upon narrow band laser excitation in the range of the $S_0 \rightarrow S_1$ transition of absorption spectrum at liquid helium temperatures, the inhomogeneous broadening in fluorescence spectra is removed and spectrum is transformed in set of narrow lines. This method was named the fluorescence line narrowing (FLN) procedure [3] and was used successfully for the study of tetrapyrrolic compounds in the different kinds of solid amorphous glasses.

In this work we recorded highly resolved FLN spectra of diprotonated forms of octamethylporphyrin (H_4OMP^{2+}), their *meso*-deuterated derivative ($H_4OMP^{2+}-d_4$), octaethylporphyrin (H_4OEP^{2+}) and its derivatives with exchanging of central protons on deuterium atoms (D_4OMP^{2+} , $D_4OMP^{2+}-d_4$ and D_4OEP^{2+}) in solid acid solutions at liquid helium temperature.

Quantum-chemical calculations of frequencies and forms of in-plane and out-of-plane modes for the diprotonated forms for above mentioned compounds were also performed. The molecules of free base porphyrins (for example, H_2OMP) belongs to the D_{2h} symmetry group,

but under diacids formation macrocycle is distorted and diprotonated forms $(H_4 OMP2^+)$ belongs to the D_{2d} symmetry group.

Combined discussion of the experimental data and the results of quantum-chemical calculations of the normal modes for our compounds starts from the comparison of the data for free base octamethylporphyrin (H₂OMP) and it's diacid form (H₄OMP²⁺). The frequencies of many modes in the FLN spectrum of H₄OMP²⁺, in particular, in the range up to 1000 cm⁻¹ have the values similar to that in the spectrum of H₂OMP.

The lines about 1592 cm⁻¹ in the FLN spectra H_4OMP^{2+} belong to the modes with participation of the C_aC_m bonds. In contrast to the situation in the spectrum of H_2OMP these vibrations are sensitive to hydrogen of atoms at central positions on atoms of deuterium of H_4OMP^{2+} . The changing value of the line with frequency 1635 cm⁻¹ upon deuteration arises from the motion of nitrogen atoms, because the deformation shift of C_aC_m atoms for B_2 mode is forbidden in symmetry. As a result, the nitrogen atoms will shift hydrogen atoms along axes passing through the nitrogen atoms of opposite pyrrolic rings. Calculated modes are not shifted upon deuteration and it means that the contribution of nitrogen atom will be more than the theoretical calculation predicts. Similarly, the lines with frequencies 322, 348, 723, 962, , 1316 and 1378 cm⁻¹ in the spectrum of H_2OMP^{2+}).

The formation of the diprotonated form with four hydrogen atoms in the center of the porphyrin macrocycle leads to the stronger changes in vibrational frequencies. In the spectral range below 900 cm⁻¹ in the FLN spectra of H_4OMP^{2+} , a set of new lines with frequencies 322, 348, 408, 539, 563, 763 and 871 cm⁻¹ is revealed. The corresponding lines are absent in the FLN spectrum and in the theoretical calculations for the in-plane modes of H_2OMP . In the FLN spectrum of H_2OMP several lines with frequencies in the range of 430-900 cm⁻¹ are absent, but at the same time, one of the most intensive lines (539 and 871 cm⁻¹) appears in the FLN spectra of H_4OMP^{2+} and D_4OMP^{2+} . In according to the results of quantum chemical calculations, the line at 539 cm⁻¹ belongs to the practically pure out-of-plane displacement of the *meso*-carbon of the methine bridges. Intensity of this line is very high, what is due to maximum out-of-plane displacement of the *meso*-carbon atoms of the bridges (quantum-chemical calculation). The line at 563 cm⁻¹ corresponds to the mode with out-of-plane displacements of the nitrogen atoms of the pyrrolic rings. Out-of-plane vibration with frequency 871 cm⁻¹ is due to out-of-plane motion of the hydrogen atoms at meso-positions and the corresponding line is absent in the FLN spectrum of H₂OMP with planar structure.

- Starukhin A. Distorted forms of metalloporphyrins probed by methods of highly resolved spectroscopy. / A. Starukhin, M. Kruk // J. Porphyrins and Phthalocyanines. - 2009, - V. 13. – P. 963.
- [2]. Personov R.I. Manifestation of fine structure in fluorescence spectra of complex molecules upon laser excitation. / R.I. Personov, E.I.Al'shits, L. A. Bykovskaya // Pis'ma v JETF. - 1972. - V. 15. - C. - 609.
- [3]. Starukhin A.S. Transformations in the Fluorescence Line Narrowing Spectra of Porphine upon the Formation of Diprotonated Species. / A.S.Starukhin, M.M. Kruk, O.L. Gladkova, W. Maes // Macroheterocycles / 2011. -V. 4. -P. 85.

УДК 535.37+535.338.42

А. П. Блохин

АНИЗОТРОПИЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ НЕРАВНОВЕСНЫХ АНСАМБЛЕЙ В ГАЗАХ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь lsfm@imaph.bas-net.by

В процессах фотодиссоциации сразу после распада молекул в газах, в силу законов сохранения углового момента вращательное распределение фрагментов неравновесно. В результате в поляризации люминесценции проявляется, как оптически индуцированная анизотропия, так и вращательная неравновесность. Этот процесс обнаружен и изучен, как для двухатомных фрагментов, так для многоатомных молекул. В то же время при исследовании процессов образования молекулярных комплексов методами поляризационной спектроскопии, например, Ван-дер-ваальсовских комплексов при охлаждении в сверхзвуковой струе, вращательное распределение полагают больцмановским. В данном исследовании показано, что в газах при образовании молекулярных комплексов в результате сохранения полного углового момента также возникает неравновесное распределение, которое имеет гауссовский вид и в зависимости от стереодинамики процесса может сильно отличаться от больцмановского. Это приводит к изменению динамики ориентационной релаксации анизотропии люминесценции, по сравнению со случаем свободных молекул. Существуют два возможных сценария: 1) оптическое возбуждение создает анизотропию в ансамбле молекул с равновесным распределением, затем в процессе образования комплекса изменяются главные моменты инерции и ориентация системы главных осей инерции, а регистрируется люминесценция неравновесного ансамбля молекулярных комплексов; 2) неравновесный ансамбль образуется уже до возбуждения. Для таких ситуаций рассчитана кинетика ориентационной релаксации анизотропии флуоресценции r(t) в зависимости от инерционных параметров молекулы - $\chi = 1 - I_{A,z} / I_{A,x}$ и комплекса $\chi' = 1 - I_{AB,z} / I_{AB,x}$, соотношения инерции исходных молекул $I_{A,x}I_{A,z}$ и образовавшихся комплекмоментов сов I_{AB.x}, I_{AB.z} и ориентации дипольных моментов электронных переходов. Чтобы проанализировать основные тенденции в изменении поляризационного отклика неравновесного ансамбля молекулярных комплексов по сравнению с кинетикой свободных молекул, ниже приведена зависимость анизотропии $r(\infty)$ для стационарных условий эксперимента от параметров χ, χ' , образовавшегося молекулярного комплекса. Как видно из рис. 1(а-б), увеличение вытянутости эллипсоида инерции комплекса, может приводить как к уменьшению, так и к увеличению анизотропии. Примечательным является то, что возникают области значений параметров χ' , в которых анизотропия при образовании комплекса существенно выше, чем для свободных молекул (штриховые линии лежат выше сплошных линий). Например, такое может происходить при образовании Вандер-ваальсовых комплексов в сверхзвуковых струях, когда к исследуемой многоатомной молекулы "примораживаются" один или несколько атомов постороннего газа. В некоторых ситуациях для вытянутых волчков анизотропия может увеличиться в несколько раз.



Рис. 1. Зависимость $r(\infty)$ от χ' , 1а - $\chi = -1.0$, 1б - $\chi = 0.5$. Кривые 1 – если комплекс образуется в возбужденном состоянии, 2 – если комплекс образовался до оптического возбуждения. Сплошные линии - анизотропия для исходных молекул

Временная кинетика (рис.2а,б) также испытывает значительные изменения, как для плоских, так и для вытянутых молекулярных волчков. Причем для перпендикулярных ориентаций моментов переходов, анизотропия будучи отрицательной в начальный момент времени, может в дальнейшем даже менять знак в зависимости от соотношения инерционных параметров исходной молекулы и образовавшегося комплекса. Ван-дерваальсовы комплексы



Рис.2.Временная кинетика анизотропии $\mathbf{r}(t)$ для параллельных - 2a и перпендикулярных – 2б моментах переходов, $\chi = -1$, (Кривые 1 – $\chi' = -1$, 2 - $\chi' = -0.5$, 3 - $\chi' = 0.1$, 4 - $\chi' = 0.9$)

обычно изучаются вращательного квантового эха, возникающего при когерентном возбуждении фемтосекундным импульсом электронно-колебательных полос молекулярных газов в сверхзвуковых струях. При этом основное внимание уделяется периоду повторения, но не его виду. Приведенные на рис 2а,б зависимости определяют форму когерентного оптического отклика и представляют интерес для изучения структуры комплексов и возникающей вращательной неравновесности. УДК 544.032.65

М. В. Корольков

ФОТОФРАГМЕНТАЦИЯ ИОНОВ DCI⁺ В ПОЛЕ ДВУХ ЛАЗЕРНЫХ УКИ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь korolkovm@Yahoo.com

Рассмотрены возможности управления продуктами распада и эффективностью фотофрагментации в случае воздействия на ион двух одинаковых, но сдвинутых по времени, ультракоротких лазерных импульсов фемтосекундной длительности. Формирующееся интерференционное поле и форма его огибающей зависят от задержки между импульсами и несущей фазы каждого из них. Совместное влияние задержки между импульсами и, прежде всего, значения несущей фазы второго импульса, проявляется в формировании диссоциации из переходного состояния колебательного волнового пакета, сформированного первым импульсом. К началу второго импульса этот волновой пакет, движущийся в определенной пространственной зоне и локализованный в окрестности энергий нескольких колебательных состояний, определяет новые начальные условия. Положение этого пакета на потенциальной кривой основного электронного состояния меняется и начальное состояние зависит от задержки между импульсами. Это приводит к зависимости резонансных частот электронных переходов от времени и существенно усложняет колебательную динамику волновых пакетов в каждом из электронных состояний, индуцируя переходы между ними в широком диапазоне координат от почти равновесного состояния ядер до состояния практически полной диссоциации [1-3]. Нами продемонстрировано, что применение двух сдвинутых по времени когерентных лазерных импульсов является мощным инструментом, обеспечивающим дополнительные возможности управления процессами возбуждения и фотодиссоциации, приводящим к перемешиванию процессов электронной и ядерной динамики [1, 2].

Моделирование процессов фотофрагментации иона DCl⁺ в поле двух интерферирующих лазерных импульсов базируется на развитом нами ранее подходе описания фотофрагментации иона в поле одного УКИ [4,5]. Мы полагаем, что ось иона и плоскость поляризации лазерного поля параллельны. Для случаев «а» и «б» по классификации Хунда только переходы между состояниями одной симметрии возможны. Поскольку начальное колебательное состояние принадлежит электронному состоянию X²П, то благодаря возбуждению лазерными импульсами ИК диапазона возможны переходы только между ²П состояниями (электронно-колебательные) и (колебательные). внутри них В этих предположениях анализ динамики фотофрагментации DCl⁺ проводится на основе численного решения системы трех уравнений Шредингера, учитывающих три канала диссоциации [1,2].

В качестве примера рассмотрена фотодиссоциация иона DCl^+ , протекающая в интерференционном поле двух идентичных лазерных импульсов с несущей частотой $\omega = 0.375 \ 10^{15} \Gamma$ ц ($\lambda = 800$ нм) и длительностью 20 фс и 7 фс, как функция временной задержки между этими импульсами. В зависимости от величины задержки между

Δt характерные импульсами можно выделить три области динамики фотофрагментации. Первая область соответствует почти полному перекрытию лазерных импульсов. В ней формирование продуктов распада периодически изменяется осцилляцией величины эффективной в соответствии с интенсивности интерференционного поля $W(\Delta t) = \int |E(t) + E(t+\Delta t)|^2 dt$. Когда время задержки достигает величины сравнимой с длительностью импульса ситуация меняется. Могут возникать качественные изменения зависимости результатов фотофрагментации от времени задержки. Например, локальные максимумы продуктов фотофрагментации, соответствующие локальным максимумам функции W(Δt), могут переходить в локальные минимумы. Для таких величин Δt происходит наибольшее перепутывание электронной и колебательной динамик и когерентная интерференция вкладов всех частей возникающих волновых пакетов по времени и координате в каждом электронном состоянии и определяют результирующую фотофрагментацию иона [1, 2]. В этих условиях электронная и ядерная динамики становятся взаимно зависимыми и их существенно влияние друг на друга приводит к большой чувствительности результатов фотофрагментации от параметров УКИ и задержки Δt между импульсами.

При дальнейшем увеличении задержки Δt возникает периодическая зависимости эффективности фотофрагментации с периодом характерным для колебательного движения иона. Причиной этого являются периодические начальные условия, обусловленные движением волнового пакета внутри основного электронного состояния после окончания первого УКИ и до начала действия второго. Фотофрагментация протекает с аналогичной эффективностью, когда время задержки Δt совпадает с периодом движения волнового пакета.

Формирование ионов Cl⁺ и D⁺ в противофазе - это ещё одна особенность молекулярной динамики, наблюдающаяся при больших задержках Δt . Причиной формирования конкурирующих продуктов фрагментации в противофазе является пространственная локализация электрона в ионе в момент фотофрагментации.

Таким образом, использование двух одинаковых сдвинутых по времени когерентных импульсов позволяет эффективно управлять процессом многофотонной диссоциации и реализовывать интересные режимы фотофрагментационной динамики.

- Korolkov M.V. Control of competing dissociation channel by femtosecond interferometry: aspects of electron and nuclear dynamics. / M.V. Korolkov, K.-M. Weitzel // Chemical Physics Letters - 2010. – Vol. 487. – P. 209.
- [2] Korolkov M.V. Femtosecond interferometry of molecular dynamics the role of relative and absolute phase of two individual laser pulses. / M.V. Korolkov, K.-M. Weitzel Zeitschrift fuer Physikalische Chemie. – 2011. – Vol. 225. – P. 1073.
- [3] Su Q. Quantum control of multi-photon dissociation of HCl⁺ with intense femtosecond laser pulses. / Q. Su, Y. Han, S. Cong // J. Chem. Phys. 2013. Vol. 138. P. 024304.
- [4] Korolkov M.V. On the control of product yields in the photofragmentation of deuteriumchlorid ions (DCl+) / M.V. Korolkov, K-M. Weitzel // Journal of Chem. Phys. -2005. -Vol.123. - P. 164308.
- [5] Korolkov M.V. Laser pulse control of photofragmentation in DCl+: The effect of carrier envelope phase / M.V. Korolkov, K-M. Weitzel // Chemical Physics. -2007. -Vol.338 – P. 277.
УДК 535.37

В. С. Павлович

ФЛУКТУАЦИИ ОРИЕНТАЦИОННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ, СОЛЬВАТО-ХРОМИЯ, БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНЫЕ ПЕРЕХОДЫ В РАСТВОРАХ КРАСИТЕЛЕЙ. ДОСТИЖЕНИЯ ТЕОРИИ И ПЕРСПЕКТИВЫ

Республиканский центр проблем человека, Белорусский государственный университет ул. Курчатова, 7, 220045 Минск, Беларусь u.s.paulovich@tut.by

Для описания сольвахромных эффектов и закономерностей уширения вибронных спектров полярных органических соединений в растворах предложена стохастическая модель зонного строения электронных уровней [1]. Модель позволяет рассчитать сольватохромное смешение спектров, вызванное диполь–дипольными взаимодействиями и взаимодействиями типа диполь–индуцированный диполь среды, а также учесть работу на электронную поляризацию среды, выполняемую в акте поглощения и испускания света. Найдена *средняя величина* случайного электрического поля в пустых полостях неупорядоченных систем – жидкостей или полимеров. Такие полости отвечают за транспорт и рассеяние *p-n*-экситонов в активных средах полимерных солнечных элементов, фотосенсоров и OLED устройств.

В рамках названной модели разработана теория [1], позволяющая описать влияние полярности и объемной поляризуемости окружающей среды на константу скорости *k* безызлучательной дезактивации возбужденных состояний с внутримолекулярным переносом заряда. Теория апробирована путем обработки известных литературных данных для большого числа красителей и органических соединений:

 $\Delta f \ln (k \sqrt{\Delta f}) = A + B \Delta f_{1/2}, \ \Delta f = f_{\varepsilon} - f_n = (\varepsilon - 1)/(2\varepsilon + 1) - (n^2 - 1)/(2n^2 + 1), \ \Delta f_{1/2} = f_{\varepsilon} - f_n/2, \ \varepsilon$ и *n* – диэлектрическая проницаемость и показатель преломления. Предложен метод определения дипольного момента μ_1 в S₁ состоянии для молекул симметрии C_{2v} :

$$\mu_1 = 5.865 \cdot 10^{-3} B \sqrt{-a^3 T/A}$$
 (D),

a – онзагеровский радиус (Å), T – температура (К). Показано, что метод может успешно применяться в случае слабого связывания электронных состояний и сильного ориентационного уширения спектров. Отклонения наблюдаются при внутреннем эффекте тяжёлого атома, при проявлении колебаний, вызывающих тушение флуоресценции, а также при дейтерировании растворителя. Следует надеяться, что новые исследования позволят аналитически описать влияние на константу скорости k и перечисленных выше эффектов. Наиболее сложной задачей является учет эффекта тяжелого атома, который следует рассматривать как случай сильного спин-орбитального связывания.

Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ – проект Ф11-083.

 Pavlovich V. S. Solvatochromism and nonradiative decay of intramolecular chargetransfer excited states: Bands-of-energy model, thermodynamics, and self-organization // ChemPhysChem. – 2012. – V. 13. – P. 4081. УДК 541.64

А. А. Шагинян¹, П. К. Акопян¹, Л. Г. Арсенян¹, А. Г. Погосян¹, В. С. Вихренко², Я. Г. Грода²

КОНФОРМАЦИОННЫЕ И ДИФФУЗИОННЫЕ СВОЙСТВА МОЛЕКУЛ ПОЛИ-ВИНИЛСПИРТА И ПОЛИВИНИЛПИРРОЛИДОНА В ВОДНОМ РАСТВОРЕ

¹ Международный научно-образовательный центр НАН Республики Армения, ул. Маршала Баграмяна, 24д, 0019 Ереван, Армения <u>paruyr.hakobyan@gmail.com, levon.arsenyan@gmail.com, poghosyan@gmail.com</u> ² Белорусский государственный технологический университет, ул. Свердлова, 13а, 220006 Минск, Беларусь <u>vvikhre@bstu.unibel.by</u>, <u>groda@bstu.unibel.by</u>

Поливиниловый спирт, или поливинилспирт (ПВС, $(C_2H_4O)_n)$ и поливинилпирролидон (ПВП, $(C_6H_9NO)_n)$ являются одними из наиболее широко используемых в различных областях науки и промышленности полимерных соединений. Оба указанных полимера активно используются в медицине. В частности, первый из них используется в качестве лубриканта при изготовлении глазных капель и растворов для контактных линз и в качестве эмболизирующего агента при нехирургическом лечении онкологических заболеваний. В свою очередь, наиболее известным медицинским применением ПВП является его использование в качестве заменителя плазмы крови. Препарат обладает высокой стойкостью и может вводиться больным вне зависимости от группы их крови. В последние годы макромолекулы ПВС рассматриваются в качестве возможных транспортных агентов по доставке лекарственных препаратов в живых организмах.

Учитывая интерес к указанным полимерам с научной и промышленной точек зрения, большую важность приобретает исследование их конформационного и динамического поведения. В то же время следует отметить, что физический эксперимент не предоставляет возможности получения полной детальной картины системы, позволяя сделать лишь общие предположения о ее макроструктуре. Методы же компьютерного моделирования, в частности, молекулярной динамики, дают возможность исследовать структуру системы, особенности ее динамики как визуально, так и при помощи анализа различных характеристических макро- и микропараметров.

В настоящей работе приводятся результаты анализа данных молекулярнодинамического моделирования, позволяющие оценить конформационные особенности и диффузионные характеристики исследуемых макромолекул.

Для моделирования молекул ПВС и ПВП методом молекулярной динамики (МД) были построены модели систем ПВС–вода и ПВП–вода. Построение моделей проводилось в несколько этапов. На первом этапе на основе общеизвестных кристаллографических параметров (длины валентных связей, величины валентных и торсионных углов и т. д.) были построены модели мономеров. На втором этапе методом репликации мономеров были построены полимеры ПВС и ПВП, состоящие из 1024 и 408 мономерных звеньев, соответственно, с общей молекулярной массой около 45 000 г/моль каждый.

Каждая модель была внедрена в водную среду, состоящую из 31000 молекул воды. В итоге были получены модели двух систем – ПВС/вода и ПВП/вода – с массовым концентрационным соотношением $C_{\Pi BC}/C_{BOДA} = C_{\Pi B\Pi}/C_{BOДA} = 1:13$. Моделирование проведено при комнатной температуре (*T*=300 K) и давлении в одну атмосферу. Его длительность соответствует 100 нс биологического времени при временном шаге интегрирования 0.5 фс.

Моделирование показало, что макромолекула ПВС имеет близкую к сферической форму с радиусом $2.5 \div 2.7$ нм, в то время как форма молекулы ПВП близка к эллипсоиду вращения с полуосями примерно 2.0 и 3.5 нм. При этом можно отметить, что компактизация обоих полимеров происходит достаточно быстро – в течении начальных $15 \div 25$ нс. Различие равновесных форм полимеров обусловлено различием атомных групп, присоединяемых к углеродному скелету макромолекулы. В случае ПВС это достаточно малые ОН-группы, тогда как в ПВП присоединяется значительно больший радикал NC₄H₆O.

Радиусы инерции обоих полимеров достаточно резко изменяются в течение первых нескольких наносекунд, после чего выходят на свои стационарные значения, равные 1.97 и 2.16 нм для ПВС и ПВП, соответственно.

Для изучения статических корреляций в рассматриваемой макромолекуле на основе данных о положении каждого ее атома была предложена процедура конструирования ортонормированного базиса, связанного с каждым мономером.

Это позволило установить, что плоскости отдельных мономеров ориентированы друг относительно друга хаотическим образом. Полученный результат свидетельствует о высокой относительной подвижности мономерных звеньев, практически свободно вращающихся вокруг связей, соединяющих отдельные мономеры. В то же время угол между углеродной связью в мономере ПВС и связью между мономерами является практически постоянным вдоль полимерной цепи и равным приблизительно 70°.

На основании данных о положении атомов полимера исследована эволюция положения его центра масс и определен коэффициент трансляционной диффузии, значения которого оказались равными 0.03 нм²/нс в случае ПВС и 0.008 нм²/нс для ПВП.

Помимо этого был вычислен тензор осевых моментов инерции и собственный кинетический момент каждой из макромолекул в системе координат, связанной с ее центром масс, что позволило численно решить уравнение вращательного движения и оценить средний угол поворота макромолекулы вокруг каждой из координатных осей и тем самым определить коэффициент вращательной диффузии (0.01 и 7.10⁻⁶ рад²/нс для ПВС и ПВП, соответственно).

Молекулярно-динамическое моделирование показало, что диффузионные свойства молекул полимеров ПВС и ПВП существенно различаются. Поступательное и вращательное движение молекулы ПВС соответствует представлениям об обычной диффузии, тогда как молекула ПВП демонстрирует субдиффузионое поведение с показателем степени, близким к 0.5. Это обусловливает снижение подвижности молекулы ПВП на рассматриваемых временных масштабах. Сопоставление результатов моделирования с гидродинамическими оценками показывает, что гидродинамическая теория недооценивает вклад эффектов трения при рассмотрении движения молекулы ПВС и оказывается неприменимой в случае молекулы ПВП.

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант № Х11АРМ-002) и Государственного комитета по науке Министерства образования и науки Армении. УДК 535.555

В. В. Могильный¹, А. И. Станкевич¹, А. В. Трофимова¹, А. А. Муравский², А. А. Муравский²

ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ ПОЛИМЕРЫ ДЛЯ ПОЛЯРИЗАЦИОННО-ФАЗОВОЙ ОПТИЧЕСКОЙ ЗАПИСИ И ОРИЕНТАЦИИ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ

¹Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь mogilny@bsu.by

²Институт химии новых материалов НАН Беларуси, ул. Ф.Скорины, 36, 220141 Минск, Беларусь

alexander.muravsky@ichnm.basnet.by

Эффекты поляризационно-фазовой записи в объеме полимерного материала и ориентации жидких кристаллов (ЖК) его поверхностью обязаны своим возникновением образованию анизотропных по поляризуемости молекулярных (макромолекулярных) структур. Устойчивость последних к физико-химическим воздействиям (тепло, свет, жидкие среды и др.) во многом определяет эксплуатационные возможности полимерных материалов в элементах и устройствах различного назначения. Способностью существенно увеличивать устойчивость к влиянию внешних факторов в результате светового воздействия известны фотосшиваемые полимеры. В настоящей работе приводятся результаты исследования поляризационно-фазовой фоточувствительности (фотонаведенного двулучепреломления) новых фотосшиваемых полимеров с боковыми бензальдегидными группами и их способности ориентировать ЖК, возникающей под действием линейно-поляризованного и неполяризованного УФ излучения.

Последовательность превращений бензальдегидных групп, приводящая к формированию сшивок между макромолекулами, представлена на рисунке 1.



Рис. 1. Схема фотопревращения бензальдегидных групп

От молекулы-донора к электронно-возбужденной карбонильной группе бензальдегида осуществляется перенос водорода и возникает пара радикалов, которые затем рекомбинируют, образуя ковалентную связь. Фотопродукты оказываются закрепленными между макромолекулами и малоподвижны в твердом полимере.

Под действием линейно-поляризованного УФ излучения в полимерном слое последовательно возникают отрицательное и положительное фотонаведенное двулучепреломление, которое связывают с двумя типами молекулярных фотопродуктов [1]. Когда донорами водорода (RH) служат алифатические группы полимерного окружения, образуются структуры с меньшей относительно бензальдегида анизотропией поляризуемости. В этом процессе более анизотропные остаточные бензальдегидные группы формируют отрицательное двулучепреломление, которое, однако, не является устойчивым и довольно быстро релаксирует благодаря вращательной подвижности фоточувствительных фрагментов. Если донором водорода служит альдегидная группа другого бензальдегида, образуется сшивка, включающая два бензольных кольца, с анизотропией поляризуемости большей, чем у бензальдегидной группы. Ансамбль сшивок такой структуры и создает положительное двулучепреломление (до 0,001), устойчивое к действию тепла, оптического излучения видимого и ближнего ИК диапазонов, а также жидких сред.

Обнаружено, что линейно-поляризованное УФ излучение создает на поверхности слоев бензальдегидных полимеров анизотропию межмолекулярных взаимодействий с ЖК материалами, т.е. вызывает эффект их фотоориентации. Направление оси фотоанизотропии при этом совпадает с направлением электрического вектора активирующего излучения, как и для положительного двулучепреломления. Измеренная азимутальная энергия сцепления фотоориентанта порядка ~10⁻⁵ Дж/м², ее величина нечувствительна к переэкспонированию при записи и нагреву слоя после нее.

Сопоставление свойств фотонаведенного двулучепреломления в слоях полимеров с боковыми бензальдегидными группами и фотоориентации ЖК их поверхностью указывает на общий механизм образования фотоориентации и положительной составляющей двулучепреломления [2]. В качестве молекулярных структур, ответственных за оба эти явления, предложены анизотропные продукты фотопревращения димеров бензальдегидных групп, образующие сшивки между макромолекулами, что создает устойчивость фотоанизотропии к тепловому воздействию и влиянию жидких растворителей.

Недавно нами обнаружено новое свойство бензальдегидных полимеров, позволившее увеличить энергию азимутального сцепления ЖК более чем на порядок. Оно заключается в многократном усилении ориентирующей способности натертой поверхности полимерного слоя после облучения неполяризованным или поляризованным УФ светом. В сочетании в фотосшиванием этот эффект позволяет создавать многодоменную ориентацию ЖК с более высоким качеством по сравнению с фотоориентацией [3].

[1] Mahilny, U. V. A new mechanism of stable optical birefringence recording under polarized UV radiation in photocrosslinking polymeric materials. / U. V. Mahilny, A. V. Trofimova // J.Opt. -2011. - V.13, N 10. -105601 (7 pp.).

[2] Mahilny, U. New photocrosslinking polymeric materials for liquid crystal photoalignment. / U. Mahilny, A. Trofimova, A. Stankevich, A. Tolstik, A. Murauski, A. Muravsky. // Book of Abstracts of 6th International Conference – School Foundations & Advances in Nonlinear Science, September 24-28, 2012 and International Symposium Advances in Nonlinear Photonics, September 24-26, 2012, Minsk, Belarus. – P. 51.

[3] Mahilny, U. V. Novel polymer as liquid crystal alignment material for plastic substrates. / U. V. Mahilny, A. I. Stankevich, A. A. Muravsky, A. A. Murauski. // J. Phys. D: Appl.Phys. – 2009. – V. 42. – 075303.

УДК 29.31.26/13.20.25

М. В. Бельков, С. Н. Райков

РАЗРАБОТКА И ПРИМЕНЕНИЕ МОБИЛЬНЫХ ЛАЗЕРНЫХ СПЕКТРАЛЬНЫХ АНАЛИЗАТОРОВ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь raikov@imaph.bas-net.by

Во многих практических случаях необходимо проведение измерений с выездом на место экспертизы, что особенно важно при анализе объектов, не подлежащих транспортировке. Созданные лазерные системы (модель 2011 г. с ламповой накачкой активной среды и модель 2012 г. с диодной накачкой) разработки Института физики НАН Беларуси имеют функциональные преимущества перед зарубежными аналогами (прототипами): двухимпульсный режим абляции (рост уровня полезного сигнала на один два порядка) и повышенная энергетика (возможность анализа любых твердотельных материалов). Характеристики обеих систем примерно одинаковы, однако лазер с диодной накачкой существенно более легкий и компактный чем с ламповой накачкой, что делает лазерную систему более универсальной и функциональной. Системы выполнены по модульному принципу, что дает возможность разборки, транспортировки, сборки и эксплуатации одним оператором.

Разработанная мобильная лазерная аппаратура активно используется на протяжении двух последних лет для экспертизы химического состава материалов с выездом на место измерений. Ниже приведем несколько характерных примеров.

Так, апробирована на практике лазерная материаловедческая экспертиза послойного химического состава материала промышленных конструкций в полевых условиях в труднодоступных местах на сооружении с целью определения по результатам измерений степени деградации коррозионностойкой стали и железобетонных материалов в агрессивных условиях.

В частности, проведено детальное обследование поврежденных конструкций действующего и весьма популярного аквапарка 2004 г. постройки (первый в Беларуси полноценный аквапарк). Была поставлена задача провести определение марок конструкционной корозионностойкой стали в различных зонах аквапарка непосредственно на месте экспертизы без транспортировки фрагментов конструкций в Институт физики НАН Беларуси или другие аналитические центры.

Химсостав материала сильно корродировавшего стального каркаса купола, на котором крепятся стеклопакеты, соответствует марке коррозионностойкой стали 12Х18Н10Т, легированной титаном (по зарубежной классификации AISI 321). Аналогичные результаты получены при экспертизе химсостава сварных швов на каркасе купола. Подобные результаты получены при экспертизе химсостава материала перилл и сварных швов на них (см. фото ниже) – материал стали 08Х18Н10 (AISI 304). Данная коррозионностойкая сталь является одной из самых экономичных. Однако она не подходит для условий эксплуатации в аквапарке вследствие хлоридной коррозии, как и сталь AISI 321 (купол). На практике в подобных сооружениях следует

использовать сталь с молибденовым легированием 316 или 317 серий. Присутствие молибдена на много порядков по величине замедляет скорость процесса хлоридной коррозии даже в более жестких условиях эксперимента, чем в нашем случае.



Разработанная аппаратура также использована для текущего мониторинга и установления степени коррозии бетонных конструкций и материалов (карбонизация, хлоридная коррозия, сульфатизация); определения наличия, состава и толщины огнезащитных покрытий на строительных конструкциях; контроля уровня загрязнения окружающей среды, в частности, биосистем хлором (в обычной практике трудноопределяемый элемент).

Проводится технологическая экспертиза в режиме реального времени историкохудожественных ценностей в музейных и полевых условиях (Минск, Полоцк, Несвиж, Мир).

Так для послойного микроанализа гетманской булавы в Национальном историкокультурном музее-заповеднике «Несвиж» использовалась мобильная версия лазерного эмиссионного спектрального анализатора.

Проведена полная материаловедческая экспертиза всех металлических деталей и слоев, присутствующих на булаве. Микроскопические исследования поверхности (структуры, рельефа, дефектов), наряду с полученными материаловедческими свидетельствуют данными, 0 сравнительно старой ИЛИ недостаточно удовлетворительной технологии выплавки стали. Концентрация ртути в локальных местах лазерного воздействия на рукояти более высокая, чем по технологии и составляет около 25%. Это обстоятельство, вероятно, вызвано несовершенством (не доведением до конца) технологического процесса огневого золочения – выпаривания ртути. Второй слой на украшении рукояти – стандартная технология – чеканка по серебру. Состав пластины также традиционный: примерно 80% серебра и 20% меди.

Для Национального исторического музея Республики Беларусь выполнена материаловедческая экспертиза большого полотна «Смерть гетмана Чернецкого».

УДК 621.382

М. И. Маковийчук

ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ ФЛИККЕР-ШУМОВОЙ СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

Ярославский филиал Физико-технологического института РАН, ул. Университетская, 21, 150007 Ярославль, Россия <u>makoviychuk@rambler.ru</u>

К настоящему времени известно несколько типов химических сенсоров, однако, в целом, эти сенсоры не удовлетворяют, по крайней мере, одному из необходимых требований: чувствительность, селективность, быстродействие, высокая воспроизводимость результатов измерений, возможность легкой и доступной смены газочувствительного элемента или частей сенсора. Совокупность этих требований является основополагающим для проведения повторяющихся и непрерывных измерений. Фундаментальная проблема всех существующих систем, заключается в создании работоспособного газочувствительного элемента сенсора, т.е. той части прибора, в которой осуществляется преобразование концентрации детектируемого газа в измеряемый электрический сигнал. Многие из этих сенсоров неконкурентоспособны вследствие низкой селективности и/или недолговечности.

В настоящее время преобладающее большинство твёрдотельных газовых сенсоров изготавливается на основе полупроводниковых материалов, работающих при высоких температурах. Газовая селективность этих сенсоров достигается путем варьирования рабочей температуры или при использовании различных поглотителей для мешающих (сопутствующих) компонентов. Однако, результаты, как правило, неудовлетворительны, например, вследствие ограниченности ассортимента используемых материалов.

На поверхности полупроводника, т.е. на границе двух фаз, происходит взаимодействие газовых молекул, которые приходят на поверхность из газовой фазы; и свободных электронов и дырок, приходящих на поверхность из глубины полупроводника. Будучи границей двух фаз, поверхность полупроводника находится во взаимодействии с обеими фазами. Чтобы получить полную информацию о поверхностных процессах, необходимо рассматривать ее в совокупности с обеими фазами, границей между которыми она является. Именно такой подход к поверхности взят за основу при разработке технологии кремниевых фликкер-шумовых газовых сенсоров (ФШГС), газоанализатора, в котором они будут функционировать и физико-химического количественного анализа процессов, протекающих на поверхности ФШГС при заборе пробы из газовой среды.

Генерируемые при неэквивалентном обмене флуктуации динамических переменных твердофазной системы даже в условиях внешнего «термодинамического равновесия» (система в «термостате», электрический ток отсутствует), обусловливают разнообразные активационные процессы. Для их анализа разработан метод импульсной фликкер-шумовой спектроскопии [1]. Уменьшение размеров исследуемых структур увеличивает информативность метода фликкер-шумовой спектроскопии за счет возможности исследования параметров локальных центров в кремнии на основании анализа поведения отдельных лоренцианов при изменении температуры.

Прогресс развития человечества, рост производства, образование инфраструктуры (транспорт, связь и т.п.) привели к резкому возрастанию обмена веществ и энергии между человеческим обществом и биосферой. Воздействия человека на окружающую среду – это антропогенное воздействие.

Одним из видов антропогенного воздействия является антропогенное загрязнение. В виде энергии окружающая среда загрязняется теплом, ионизирующим излучением, электромагнитными полями (ЭМП), световой энергией (в том числе ультрафиолетовым и инфракрасным излучением), акустическим шумом, вибрацией, ультразвуком. С точки зрения экологии ЭМП – это один из видов энергетического загрязнения окружающей среды.

В последнее время появилось множество научных подтверждений явлению повышенной биологической активности магнитных полей промышленной частоты малых уровней. Есть результаты научных исследований, позволяющие считать, что такие поля являются причиной некоторых видов онкологических заболеваний.

В результате исследований воздействия импульсных магнитных полей (ИМП) на Si кристаллы методом фликкер-шумовой спектроскопии (ФШС) обнаружен эффект долговременного изменения физико-химических свойств их поверхности.

Термодинамические и кинетические особенности наблюдавшихся магнитопластических эффектов дали основание считать, что неравновесность, существующая в кристалле исходно или непрерывно подпитываемая извне тем или иным способом, является необходимым и важнейшим фактором, обеспечивающим высокую чувствительность дефектной структуры к внешним или внутренним магнитным полям.

Таким образом, в результате исследований воздействия ИМП на кремниевые кристаллы методами ФШС обнаружен эффект немонотонного долговременного изменения физико-химических свойств их поверхности, включающий повышение адсорбционной способности и ее последующее снижение до уровня ниже исходного значения. Полученные результаты подтверждаются исследованиями, проведенными методами СТМ и микроволновой спектроскопии.

Магнитопластические эффекты открывают возможность проведения работ по мониторингу электромагнитного загрязнения окружающей среды.

[1]. Маковийчук М.И. Физические принципы импульсной фликкер-шумовой спектроскопии низкоразмерных кремниевых структур. // Тезисы докладов XXIV конференции «Современная химическая физика» (20 сентября - 1 октября 2012г., Туапсе). - М.: «Парк - медиа», 2012. - С.88.

УДК 535.24.07/08;551.510.5

А.М. Людчик

ПОЧЕМУ «ОРТОГОНАЛЬНАЯ» СПЕКТРОСКОПИЯ ЛУЧШЕ «ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ»?

Национальный научно-исследовательский центр мониторинга озоносферы Белгосуниверситета, 220064 Минск, Беларусь *nomrec@bsu.by*

В последние десятилетия для мониторинга загрязнений атмосферы широчайшее распространение получил метод трассовых спектрофотометрических измерений концентраций различных газовых компонент атмосферы. В основе метода лежит закон Бугера-Ламберта-Бэра ослабления прямого излучения, распространяющегося в среде,

$$I(\lambda) = I_0(\lambda) \exp[-\tau(\lambda)],$$

где $\tau(\lambda)$ - оптическая толщина среды, через которую прошло излучение. Для получения количественных результатов необходимо измерить интенсивности выходящего на трассу $I_0(\lambda)$ и регистрируемого после прохождения трассы $I(\lambda)$ излучений. В лабораторных условиях задача легко решается посредством измерения интенсивности излучения в присутствии и при отсутствии анализируемой смеси газов в кювете, через которую распространяется излучение. В случае реальной атмосферы трасса зондирования составляет сотни и тысячи метров, и невозможно освободить такую «кювету» от присутствующих в атмосфере ослабляющих излучение составляющих.



Рис.1. Выделение «дифференциальной» оптической толщины (вверху) и «дифференциального» сечения поглощения (внизу) в методе ДОАС осуществляется посредством сглаживания.

В качестве решения проблемы был предложен метод дифференциальной оптической абсорбционной спектроскопии (ДОАС). Идея состоит в выделении из спектров поглощения излучения отдельными компонентами смеси газов «дифференциальной» части. «нечувствительной» к спектру зондирующего излучения (рис. 1). Попросту говоря, из зарегистрированного спектра зондирующего излучения исключаются гладкие бесструктурные составляющие. имеющие различную природу. Задача решается посредством разделения логарифма спектра

излучения, измеренного после прохождения трассы, на гладкую и структурную составляющие с использованием процедуры сглаживания. В

результате концентрации компонент смеси, у которых сечения поглощения обладают структурными особенностями, могут быть определены, несмотря на отсутствие информации о гладком бесструктурном спектре источника излучения и присутствие в

регистрируемом спектре трудно определяемых, но достаточно гладких вкладов за счет разных эффектов (рис. 2).



Рис. 2. Пример извлечения «дифференциального» спектра ослабления излучения и его сравнения с «дифференциальным» спектром поглощения SO₂.

В докладе рассматриваются теоретические ЛОАС основы измерений, определяются условия применимости И возможные последствия невыполнения этих условий. Строго обосновывается более общий метод, свободный от большинства ограничений ДОАС. Предлагаемый подход позволяет интерпретировать природу и оценить влияние ряда источников погрешностей, свойственных ДОАС технике и не получивших до сих пор внятного объяснения. По аналогии с ДОАС новый метод назван «ортогональной оптической абсорбционной спектроскопией» (OOAC) [1].

Метод ООАС также базируется на разделении сечений поглощения излучения отдельными компонентами смеси на две составляющие, однако в отличие от ДОАС для разделения используется не процедура сглаживания, а процедура ортогонализации по отношению к заранее заданному набору функций длины волны.

Наиболее распространенная версия ДОАС, использующая полиномиальную регрессию качестве процедуры В сглаживания. является частным случаем набора метода ООАС, где в качестве

функций, по отношению к которым осуществляется ортогонализация сечений поглощения, фигурируют степенные функции длины волны. Однако в общем случае ООАС ничем не ограничивает выбор таких функций и, поэтому, предоставляет более широкие возможности.

[1] Людчик А.М. Теоретическое обоснование методов дифференциальной и ортогональной оптической абсорбционной спектроскопии. / А.М. Людчик // ЖПС. – 2013. – Т. 80. - № 1. –С. 85-91.

Г.А.Пицевич, О.В.Новиченок

ЗD РАСЧЕТЫ КОЛЕБАНИЙ О-Н ГРУППЫ В КОМПЛЕКСЕ ТРИХЛОР-УКСУСНОЙ КИСЛОТЫ И ПИРИДИНАЗОТОКСИДА В АЦЕТОНИТРИЛЕ.

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

Pitsevich@bsu.by

Как известно, колебания легких атомов, особенно таких как атом водорода, являются ангармоническими. Это связано с большой амплитудой колебаний этих атомов в возбужденных колебательных состояниях. Квадратичное представление потенциальной энергии приемлемое для описания колебаний большинства атомов, оказывается неудовлетворительным. Учет третьих и четвертых производных от потенциальной энергии и использование теории возмущения позволяет существенно уточнить значения частот колебаний С-Н и О-Н связей в свободных молекулах. Однако, как показал ряд исследований [1,2] при образовании комплексов с водородной связью ангармоническое приближение неспособно верно предсказать значения частот колебаний О-Н группы.

Для адекватного решения этой проблемы необходимо получить более точное представление поверхности потенциальной энергии. В соответствии с подходом развитым в [3], расчет колебаний гидроксильной группы проводился в предположении того, что движение атома водорода происходит в поле, создаваемом остальными неподвижными атомами комплекса. На основании этого приближения трехмерная потенциальная поверхность рассчитывалась для различных смещенных положений гидроксильного протона без оптимизации геометрии по остальным структурным параметрам. Расчет энергии проводился в приближении B3LYP/cc-pVTZ при помощи квантовохимического пакета GAMESS [4]. Значения потенциальной энергии рассчитывались в некоторых узлах трехмерной решетки для интервалов смещения гидроксильного атома водорода из положения равновесия от-1 Å до +0.3 Å вдоль оси X, от -0.5 Å до +0.5 Å вдоль оси Y и от -0.7 Å до +0.7 Å вдоль оси Z. Для значений ∆Х равных -1 Å, -0.8 Å, -0.5 Å, -0.2 Å, 0 Å, +0.1 Å и +0.3 Å (а) рассчитывалась энергия в узлах, находящихся в плоскостях перпендикулярных к оси Х. Таким образом, потенциальная энергия была рассчитана более чем 700 точках. Далее путем интерполяции энергия рассчитывалась во всех узлах паралелипипида с размерами $\Delta X \cdot \Delta Y \cdot \Delta Z = 1.4 \cdot 1.1 \cdot 1.5$ Å³ и с шагом 0.1 Å по каждой из осей. Дальнейшие расчеты проводились в соответствии с [5]. Значения рассчитанных частот оказались в удовлетворительном согласии с данными ИК спектров комплекса в ацетонитриле, зарегистрированных при различных температурах.

[2] M. V. Vener, O. Kuhn, and J. M. Bowman // Chem. Phys. Lett. – 2001. –V. 349. – P. 562.
[3] G.Pitsevich, A.Malevich, V.Sablinskas, I.Doroshenko, V.Pogorelov, V.Balevicius // Jour. Spectrosc. Dyn. – 2013. – 3: 19.

[4] http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html

[5] G. A. Pitsevich, A. E. Malevich // OPJ – 2012. – V. 2. – P. 332.

^[1] J. Antony, G. von Helden, G. Meijer // J. Chem. Phys. - 2005. - V. 123. - P. 014305.

Г.А.Пицевич, Е.Ю.Слепцов

АНГАРМОНИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ГОРЯЧИХ ЛИНИЙ КР МОЛЕКУЛЫ СН3СN.

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск,

Беларусь <u>Pitsevich@bsu.by</u>

Экспериментальные исследования колебательных спектров ацетонитрила выявили сложную форму контуров ряда полос поглощения и линий рассеяния в ИК и КР спектрах. Для объяснения этих фактов авторы [1] ссылаются на формирование устойчивых комплексов исследуемых молекул, концентрация которых практически не зависит от температуры. В то же время авторы [2] особенности экспериментальных спектров связывают с присутствием горячих полос, обусловленных наличием низкочастотного (380 см⁻¹) деформационного колебания $\delta_{C-C=N}$ типа Е. Перераспределение интенсивности в сложных спектральных контурах с ростом температуры свидетельствует скорее в пользу гипотезы [2]. Однако, сегодня есть возможность проверить справедливость этой гипотезы, выполнив гармонические и ангармонические расчеты колебательных спектров молекулы ацетонитрила. Приняв нумерацию колебаний в соответствии с [2] отметим, что дополнительные максимумы, наблюдаемые для линий *v*₄=920 и \tilde{v}_{2} =2248 см⁻¹, обусловленных валентными колебаниями С-С и С=N связей, расположены на высокочастотной и низкочастотных сторонах контуров соответственно. Это значит, что частоты горячих полос $\tilde{v}_4 + \tilde{v}_8 - \tilde{v}_8$ и $\tilde{v}_2 + \tilde{v}_8 - \tilde{v}_8$ ($\tilde{v}_8 = 380$ см⁻¹) соответственно больше и меньше фундаментальных (\tilde{v}_4 и \tilde{v}_2) на 4-7 см⁻¹. Поскольку частоты фундаментальных колебаний определены выражением:

$$\tilde{v}_{i}^{fund} = \omega_{0i} + 2\chi_{i,i} + \frac{1}{2}\sum_{j>i}^{N}\chi_{i,j}$$
(1)

где ω_{0i} - гармоническая частота *i*- ого колебания, $\chi_{i,j}$ - элементы матрицы постоянных ангармоничности, а частота составного колебания определена соотношением:

$$\tilde{v}_{ij}^{comb} = \omega_{0i} + \omega_{0j} + 2\chi_{i,i} + 2\chi_{j,j} + 2\chi_{i,j} + \frac{1}{2}\sum_{k>i;k\neq j}^{N}\chi_{i,k} + \frac{1}{2}\sum_{k>j;k\neq i}^{N}\chi_{j,k}$$
(2)

то разность частот составного \tilde{v}_{i+8} и фундаментального \tilde{v}_i колебаний (*i*=2,4) равна:

$$\tilde{\nu}_{i+8} - \tilde{\nu}_i = \chi_{i8} \tag{3}$$

Очевидно, $\chi_{4,8}$ должно быть положительным, в то время как $\chi_{2,8}$ - отрицательным и, кроме того $|\chi_{4,8}| \approx |\chi_{2,8}| \approx 5,5 \text{ см}^{-1}$. Гармонические и ангармонические расчеты колебательных спектров молекулы ацетонитрила были выполнены в приближении B3LYP/ сс-pVTZ. Значения частот фундаментальных колебаний составили: $\tilde{v}_2 = 2249 \text{ см}^{-1}$; $\tilde{v}_4 = 921 \text{ см}^{-1}$ и $\tilde{v}_8 = 383 \text{ см}^{-1}$. При этом, рассчитанные значения искомых постоянных ангармоничности оказались равными: $\chi_{4,8} = 6.02 \text{ см}^{-1}$ и $\chi_{2,8} = -5.26 \text{ см}^{-1}$. Эти данные убедительно свидетельствуют в пользу предположения авторов [2].

- [1] A.Loewenschuss, N.Yellin // Spectrochim.Acta. 1975. V. 31A. P. 207.
- [2] G.Fini, P.Mirone // Spectrochim.Acta. -1976. V. 32A. P. 439.

Г.А.Пицевич¹, И.Ю.Дорошенко², В.Е.Погорелов², О.Л.Рудая¹

ДЛИННОВОЛНОВЫЕ СПЕКТРЫ КР РЯДА НОРМАЛЬНЫХ СПИРТОВ.

¹Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск,

Беларусь Pitsevich@bsu.by

²Киевский национальный университет, ул. Владимирская, 60, Киев, Украина.

Межмолекулярные колебания в комплексах с водородной связью в газовой [1], жидкой [2] и в матричной изоляции [3] привлекают внимание исследователей. Однако, спектральный диапазон их проявления (длинноволновая область спектров) попрежнему недостаточно изучен. Зачастую, область частот 30-500 см⁻¹ проще зарегистрировать в спектрах КР. При этом, можно ожидать, что межмолекулярные колебания должны сопровождаться существенным изменением компонент тензора поляризуемости. Исходя из этого, мы зарегистрировали длинноволновые спектры КР ряда нормальных спиртов в жидкой фазе (Рис.1).



Рис.1 Длинноволновые КР спектры некоторых нормальных спиртов.

Как видно из Puc.1 имеет место монотонное смещение линий КР в спектральном интервале 400 – 200 см⁻¹ в низкочастотную область с ростом размеров молекул спиртов. Для интерпретации спектральных данных с помощью пакета [4] в приближении B3LYP/cc-pVTZ были выполнены расчеты строения и спектров КР димеров некоторых молекул спиртов. Были определены частоты межмолекулярных колебаний и рассчитана их интенсивность в спектрах КР.

[1] C.Lassegues, J.Lascombe in J.R.Durig Vibrational Spectra and Structure v.11. -1982.

[2] H.Ratajczak Molecular Interection v.1. - 1980

[3] A.Engdahl Intermolecular Interections in Hydrogen bonded molecular complexes. A matrix Isolation Study. – 1997.

[4] http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html

Г.А.Пицевич, Д.Н.Довгаль

ИССЛЕДОВАНИЕ С ПОМОЩЬЮ МАТРИЧНОЙ ИЗОЛЯЦИИ И DFT РАСЧЕТОВ ИК СПЕКТРОВ И СТРУКТУРЫ КОМПЛЕКСА СН₃ОН И СО₂.

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

Pitsevich@bsu.by

Как показали недавние исследования [1], матричное окружение оказывает влияние на величины барьеров внутреннего вращения в молекуле метанола, что в свою очередь проявляется в изменении, обусловленного туннелированием, расщепления торсионных состояний. Ранее [2] при интерпретации FTIR спектров метанола, зарегистрированных при температуре 10 К в аргоновой матрице, подобный эффект рассматривался в качестве одного из возможных механизмов, ответственных за возникновение дублета полос 1033.25 и 1036.5 см⁻¹, обусловленных валентными колебаниями С-О связи. Однако согласно результатам расчетов [3] влияние аргоновой матрицы на внутреннее вращение в молекуле метанола ведет к увеличению расстояния между торсионными уровнями и снятию вырождения в случае Е состояний, что не согласуется с экспериментом и, следовательно, имеется иная причина расщепления полосы 1035 см⁻¹. Поскольку расщепление наблюдалось при соотношении молекул метанола и атомов аргона 1:3000 и отсутствовало при соотношении 1:1000, мы предположили, что исследуемый эффект обусловлен образованием комплексов молекул метанола с примесными молекулами. Кроме того, при соотношении 1:3000 наблюдался интенсивный дублет полос поглощения в области 2350 см⁻¹, в то время как при соотношении 1:1000 в этой области наблюдалась менее интенсивная одиночная полоса поглощения. Дополнительные аргументы в пользу данной гипотезы были получены при проведении неэмпирических расчетов взаимодействия молекул СН₃ОН и CO₂. В приближении B3LYP/cc-pVTZ была оптимизирована по всем внутренним параметрам геометрия гетеродимера двух молекул. Как показал расчет ИК спектра гетеродимера, частота валентного колебания С-О связи CH₃OH в комплексе на 4,5 см⁻¹ больше, чем в свободной молекуле. В то же время, частота антисимметричного валентного колебания C=O связей в молекуле двуокиси углерода на 1 см⁻¹ ниже, чем в молекуле. Ho. согласно экспериментальным данным. именно свободной высокочастотная компонента (1036,5 см⁻¹) исчезает при соотношении количества молекул метанола и атомов аргона 1:1000, также как и низкочастотная компонента дублета вблизи 2350 см⁻¹. Согласие теоретических и экспериментальных данных позволяет утверждать, что именно накопление молекул СО₂ в сильно разбавленном образце метанола в аргоне ведет к возникновению их гетерокомплекса, ответственного за расшепление ряда полос поглощения в ИК спектре.

- [1] Y.-P. Lee, Y.-J. Wu, R.M. Lees, J. T. Hougen // Science. 2006. V. 311. P. 365.
- [2] G. Pitsevich, I. Doroshenko, V. Pogorelov, D. Umrejko // J. Spectrosc. Dyn. 2011. -1: 9.
- [3] G. Pitsevich, M.Shudalou // J. Spectrosc. Dyn. 2012. 2: 15.

УДК 53

С. В. Гапоненко 1 , С. Г. Кожух 2

КОМПАКТНЫЙ ТЕСТЕР НА ОСНОВЕ СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОНННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

s.gaponenko@ifanbel.bas-net.by

² Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь siarhei.kozhukh@gmail.com

В настоящее время существует большое количество спектроскопических методов анализа состава материалов и химических соединений. Среди них важное место занимает спектроскопия комбинационного рассеяния. Одной из задач спектроскопии комбинационного рассеяния света является идентификация веществ путем анализа их спектра и сравнения его с базой уже известных спектров. Для решения данной задачи используются спектрометры комбинационного рассеяния. Однако их высокая стоимость, сложность эксплуатации и обслуживания серьезно ограничивают массовое применение методов спектроскопии комбинационного рассеяния на практике.

Ориентирование на решение конкретных практических задач позволяет отказаться от использования дорогостоящего и значительно ослабляющего полезный сигнал решеточного монохроматора (спектрографа), заменив его специально изготовленным многополосным избирательным фильтром, выделяющим информативные, специфичные для каждого вида анализа полосы в спектре рассеянного излучения [1]. Контроль сигнала в информационных полосах позволяет также упростить систему идентификации веществ. Использование металло-диэлектрических наноструктур позволяет чувствительность надежно повышать анализа комбинационного рассеяния в тысячу и более раз.

Компактный тестер на основе комбинационного рассеяния, предназначенный для решения одной или нескольких конкретных практических задач, может состоять из полупроводникового лазера, отрезающего фильтра, набора избирательных светофильтров, полупроводникового детектора простейшего И дисплея, отображающего результат анализа. Таким образом, масса такого тестера будет менее 1 кг, а размеры, примерно равные размеру наладонных компьютеров. Такой компактный тестер может быть использован в медицине, для диагностики различных заболеваний, в криминалистике, для определения взрывоопасных веществ и наркотиков, а также в искусстве, для проведения экспертиз предметов живописи и культурных ценностей, и в промышленности, для проведения контроля качества продукции.

 [1] Design of high-transmission multiband multilayer filters for Raman spectroscopy. / S.Kozhukh, S.Gaponenko, S.Zhukovsky, I.Yurkevich, S.Stepkova, et al.// J. Nanophoton. - 2012. - 6(1) - 061704. УДК 535.317

С. С. Ануфрик, В.Н. Комар, И. А. Лявшук, А.М. Ляликов

ЛАЗЕРНЫЕ ИНТЕРФЕРОМЕТРЫ ДЛЯ ПРОИЗВОДСТВЕННОГО КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА ОПТИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ

Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, ул. Ожешко, 22, 220023, Гродно, Беларусь amlialikov@grsu.by

Лазерная интерферометрия нашла свое применение для контроля качества различных оптических элементов в производственных условиях [1]. Благодаря высокой точности и чувствительности интерферометры оказались незаменимы при контроле качества эталонных мер, оптических элементов, предназначенных для изготовления интерферометров. Для производственных условий устройства контроля качества оптических элементов должны быть сравнительно просты в обращении.

В докладе рассмотрены схемы устройств оптического контроля, содержащие лазерный интерферометр бокового сдвига [2], обеспечивающие пониженную чувствительность к вибрациям и, позволяющие проводить контроль качества оптических элементов в производственных условиях.

Оптические схемы рассмотренных лазерных интерферометров обязательно включают три основных части: осветительную систему формирования коллимированного зондирующего светового пучка с высококогерентным лазерным зондирующего светового пучка, с эталонным источником света, ветвь И контролируемым элементами, содержащую оптическим дополнительно полупрозрачное зеркало, и оптическую систему формирования бокового сдвига.

Оптическая система формирования бокового сдвига может быть выполнена в различных вариантах, но для производственных условий рекомендовано такую оптическую систему строить на основе дифракционной решетки. Применение оптической системы формирования бокового сдвига интерферирующих пучков, а также развязка ее и ветви зондирующего светового пучка обеспечивает низкую чувствительность устройства к вибрациям, что очень важно при контроле оптических элементов в производственных условиях. Второй особенностью применения дифракционной решетки является простота в обращении и сравнительная дешевизна изготовления устройства оптического контроля.

В докладе приведены результаты апробации такого интерферометра для оценки качества оптических элементов как пропускающего, так и отражательного типа.

Приведены интерферограммы, характеризующие результат контроля для широкого класса оптических элементов: зеркал, длиннофокусных линз, дифракционных элементов и т.п.

- [1] Оптический производственный контроль / Под ред. Малакары Д. М.: Машиностроение, 1985.- 400 с.
- [2] Ляликов А.М. Универсальное устройство интерферометрического контроля качества оптических элементов / Ляликов А.М.// Письма в ЖТФ. – 2009. – Т. 35, №4. – С. 66.

УДК: 543.423

В.И. Журавлева

ЛАЗЕРНЫЙ ЭМИССИОННЫЙ СПЕКТРАЛЬНЫЙ МЕТОД ДИАГНОСТИКИ МАТЕРИАЛА ПРИ ФАЗОВОМ ПЕРЕХОДЕ

Военная академия Республики Беларусь пр. Независимости, 220, 220057 Минск, Беларусь val.zhr@gmail.com

С помощью лазерного эмиссионного спектрального метода проверено соответствие элементного состава материала исходного порошка (на основе иттрия, алюминия и самария) и стекла, полученного из него методом плавления. Стекла, содержащие ионы самария являются перспективными материалами для квантовой электроники. Получение таких стекол открывает новые возможности для управления их спектроскопическим поведением и оптическими свойствами [1].

Для получения экспериментальных использован данных частотный двухимпульсный Nd:YAG лазер с параметрами лазерного излучения: длиной волны 1,06 мкм, длительностью 10 нс и энергией одиночных импульсов 0,04-0,05 Дж, временном интервале 8 мкс, частотой 10 Гц, плотностью мощности лазерного излучения в зоне воздействия около 1,7×10¹¹ Вт/см². В качестве спектрального прибора использовался спектрограф ДФС-458С, с блоком регистрации на базе ПЗС-линеек. В качестве образцов использованы прессованные таблетки порошка и стекла с известными концентрациями (самария: 0,5; 1; 2; и 4 %), кроме основных элементов в составе с примесью бора и магния. Для контроля содержания элементов в образцах использовались линии Sm 330,64 нм, Sm 330,95 нм, Sm 329,81 нм, Sm 321,69 нм, Sm 328,06 нм, Y 242,22 нм, Y 241,46 нм, Al 281,16 нм. Для оценки условий возбуждения спектральных линий элементов и определения температуры плазмы использовались линии Mg 279,56 нм (4,43 эВ), Mg 279, 08 нм (8,86 эВ), Mg 285,21 нм (4,34 эВ), Mg 280,27 нм (4,42 эВ), Mg 277,88 нм (7,18 эВ). Погрешность измерения интенсивности линий составила около 6 %.

Установлено, что при воздействии сфокусированного лазерного излучения с плотностью мощности 1,7×10¹¹ Вт/см² на образцы, интенсивность линий элементов основы и примесей в эмиссионных спектрах плазмы порошков в 1,5-2 раза выше, чем интенсивность тех же линий в спектрах образцов стекла. Различие в интенсивности линий элементов до 2 раз в спектрах обоих материалов обусловлено влиянием (пористости) материала порошковых образнов структуры [2]. Отношение интенсивности спектральных линий самария и линий элемента основы -алюминия в спектрах образцов порошка и стекла сохраняется практически постоянным, что отражает сохранение отношения концентраций двух компонент образца (Рис.1). Оценка условий возбуждения аналитических спектральных линий в плазме показала, что температура плазмы, полученной при лазерном возбуждении вещества порошков и образцов стекла составляет 12650 К и 10600 К.



Рис.1 Отношение интенсивности линий Sm 330,64 нм, Sm 330,95 нм и линии элемента основы Al 281,6 нм в спектрах плазмы, полученной при воздействии лазерного излучения на порошковые таблетки и образцы стекла

Найдены условия лазерного возбуждения элементов, позволяющие контролировать соответствие элементного состава материала исходного порошка на основе алюминия, иттрия и самария и стекла, полученного из него методом плавления.

- [1] Подденежный Е.Н., Бойко А.А. Золь-гель синтез оптического кварцевого стекла. Учреждение образования «Гомельский государственный технический университет имени П.О. Сухого», Гомель, 2002. – 210 с.
- [2] V.I. Zhuravleva. Influence of porosity of material on the efficiency of laser emission spectral analysis // VII International Conference Plasma Physics and Plasma Technology, Minsk, Belarus, September 17-21, 2012. Contributed papers V 1, P. 259-262.

УДК 535.37

В.И.Попечиц

НЕРАЗРУШАЮЩИЙ КОНТРОЛЬ МАТЕРИАЛОВ И ИЗДЕЛИЙ С ПОМОЩЬЮ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ РАСТВОРОВ КРАСИТЕЛЕЙ

Научно-исследовательское учреждение "Институт прикладных физических проблем имени А.Н. Севченко" Белорусского государственного университета, ул. Курчатова, 7, 220045, Минск, Беларусь <u>papechyts@bsu.by</u>

В работах [1-3] было показано, что под воздействием ионизирующего излучения многокомпонентные растворы красителей изменяют цвет. Изменение цвета раствора зависит от исходной концентрации и химической природы красителей, физикохимических свойств растворителя, спектрального состава и дозы воздействовавшего на раствор ионизирующего излучения. Если между источником ионизирующего излучения и многокомпонентным раствором красителей поместить материал или изделие любого состава и структуры, то изменение цвета раствора в определенном месте будет коррелировать с радиационной дозой воздействовавшей на данный участок раствора. Следовательно, по цветовой структуре отпечатавшегося на растворе изображения материала или изделия можно судить о внутренней структуре объекта исследования (о наличии полостей, вкраплений и других дефектов) [3].

В данной работе исследованы спектрально-оптические свойства необлученных и облученных многокомпонентных растворов красителей различных классов с целью создания на их основе регистрирующих сред, наиболее пригодных для применения в дефектоскопии материалов и изделий. Многокомпонентные растворы красителей облучались на гамма-установке "МРХ γ -25М" (источник гамма излучения ⁶⁰Со). Мощность дозы облучения изменялась в диапазоне 2 – 0,5 Гр/с. На спектрофотометре PV 1251 "Solar" перед облучением, непосредственно после облучения и через определенное время после облучения записывались спектры поглощения растворов. Максимальная оптическая плотность необлученных растворов составляла 2,2 – 2,5.

В качестве примера на рисунке 1 представлены спектры поглощения водного раствора двух красителей трипафлавин + малахитовый зеленый необлученного и облученного в течение различного времени, из которого видно, что при увеличении времени облучения раствора (дозы облучения) изменяется его цвет, приближаясь к цвету раствора более радиационно-стойкого красителя (в данном случае – трипафлавина).

При использовании трехкомпонентного раствора красителей в качестве регистрирующей среды для целей дефектоскопии необходимо, чтобы красители в данном растворе имели существенно различающиеся скорости радиационной деструкции (в этом случае изменения цвета соседних участков раствора будут наиболее чувствительны к изменению величин радиационной дозы, воздействовавших на эти участки), обладали низким фэдингом, т.е. чтобы изменения цвета облученных участков раствора после прекращения воздействия радиации были минимальными, чтобы красители в растворах химически не взаимодействовали друг с другом и с образующимися в растворе продуктами радиационной деструкции. По этим параметрам из исследованных водных и водно-этанольных трехкомпонентных растворов наиболее пригодными для использования в качестве регистрирующих сред при проведении дефектоскопии материалов и изделий оказались растворы следующих пар красителей: трипафлавин + малахитовый зеленый, кислотный алый + метиленовый голубой, фуксин основание + метиленовый голубой, флуоресцеин + метиленовый голубой, эозин + малахитовый зеленый, эозин + кислотный зеленый антрахиноновый H2C, родамин C + малахитовый зеленый, родамин C + бриллиантовый зеленый.



Рис. 1. Спектры поглощения раствора трипафлавин + малахитовый зеленый в воде необлученный раствор (1), облученный в течение 5 (2), 10 (3), 15 (4) мин. Мощность экспозиционной дозы облучения – 0,63 Гр/с.

- [1] Гончаров, В.К. Исследование воздействия высокоэнергетического излучения на вещество с целью создания новых материалов и технологий / В.К.Гончаров, К.В. Козадаев, В.И.Попечиц, М.В.Пузырев // Вестник БГУ. Серия 1. – 2010. – № 1. – С. 3 – 10.
- [2] Попечиц, В.И. Визуализаторы ионизирующих излучений на основе растворов арилметановых красителей / В.И.Попечиц // Прикладные проблемы оптики, информатики, радиофизики и физики конденсированного состояния: Материалы Международной научно-практической конференции, посвященной 40-летию НИИПФП им. А.Н. Севченко БГУ / НИИПФП им. А.Н. Севченко БГУ. – Минск, 2011. – С. 57 – 58.
- [3] Попечиц, В.И. Применение многокомпонентных растворов красителей для неразрушающего радиационного контроля материалов и изделий / В.И.Попечиц // Взаимодействие излучений с твердым телом: Материалы 9-й Международной конференции / Белорусский государственный университет. – Минск, 2011. – С. 444 445.

УДК 535.65.5+535.36

Г. В. Синицын, М. А. Ходасевич

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОКТАНОВОГО ЧИСЛА БЕНЗИНА С ПОМОЩЬЮ ХЕМОМЕТРИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ СПЕКТРОВ ОПТИЧЕСКОЙ ПЛОТНОСТИ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь g.v.sinitsyn@gmail.com

Современные бензины изготавливаются смешиванием компонентов, полученных путем прямой перегонки, термического и каталитического крекинга и реформинга, коксования, гидрокрекинга, полимеризации, изомеризации и других процессов переработки нефтяного сырья и могут содержать до 240 различных углеводородов. Для потребителя единственно доступной ему характеристикой топлива является октановое число (ОЧ). На сегодняшний день актуальна проблема разработки безмоторных методов и устройств оценки качества автомобильных топлив, обеспечивающих оперативность. точность мобильность. высокую анализа бензина, имеюших применения характеризующихся возможность массового И экономической доступностью для широкого круга потребителей. Информационными параметрами бензина, коррелирующими с ОЧ, могут быть диэлектрическая проницаемость [1], напряженность электрического пробоя, скорость ультразвука [2], спектр пропускания, спектр флуоресценции в сине-зеленой области [3], спектр пропускания бензина, маркированного биологическим пигментом продегиозином и др. При проведении тестирования бензинов необходимо доказать отсутствие в них большого количества антидетонаторов, что превращает однопараметрическую задачу определения ОЧ в многопараметрическую задачу подтверждения качества бензина.

Сложность задачи и требуемая точность определения концентраций добавок обуславливают предпочтительность применения ИК-спектроскопии. На спектре, полученном с помощью спектрофотометра Shimadzu UV 3101 (см. рисунок 1а) видно, что наиболее информативным для определения распространенных марок бензина и, соответственно, значений ОЧ является диапазон длин волн 2140-2200 нм. Однако экспрессный характер, требуемое высокое быстродействие и возможность применения оптики с погружными зондами обуславливают целесообразность волоконной применения более простых спектрометров, например Ocean Optics USB650 (спектральное разрешение 1 нм, погрешность не более $\pm 2\%$). Для него (см. рисунок 1б) различия в оптической плотности бензинов АИ-92 и АИ-95 проявляются наиболее существенно в двух диапазонах спектра (500-830 нм и 950-1050 нм) и вблизи пика на 914 нм. Спектральный анализ наличия каждого из огромного разнообразия углеводородов в бензине затруднен в связи с существенным перекрытием индивидуальных спектров поглощения. Спектры оптической плотности бензинов проявляют неаддитивную зависимость от массовых долей исходных компонентов, что показывает бесперспективность раздельного поиска каждой антидетонационной добавки и необходимость решения многопараметрической задачи по всем добавкам

одновременно. Такая задача часто возникает при идентификации товара определенной товарной марки или качества. Не один или несколько показателей, а целый «образ» формирует признак товара. После создания калибровочной модели исследуемых товаров следует применить методы теории распознавания образов, позволяющие с большой степенью достоверности выявить заведомую подделку. При разработке калибровочных моделей определения показателей качества бензинов на основании данных ИК-спектроскопии среди методов многопараметрического анализа наибольшее распространение получили хемометрические методы – регрессия на главные компоненты и проекция на латентные структуры [4]. Это методы обработки данных большой размерности, для которых заранее не известна зависимость между снятой характеристикой – спектром (предикторными переменными) и определяемыми качеством и ОЧ (независимыми переменными), направлены на отыскание такого линейного соотношения между предикторами и независимость.



Рисунок 1 – Оптическая плотность образцов наиболее распространенных марок бензинов, измеренная на спектрофотометрах Shimadzu UV 3101 (а) и Ocean Optics USB650 (б)

Приборная реализация предложенного метода определения ОЧ бензина с помощью многопараметрического анализа спектров пропускания планируется в ходе выполнения следующих этапов работы: создание калибровочного множества спектров бензинов; разработка модели определения показателей качества бензинов на основе применения хемометрических методов к образам их спектров и апробация модели на образах спектров смесевых бензинов при изменении их рецептуры.

- 1. Способ определения октанового числа автомобильных бензинов : пат. 2196321 Российская Федерация : МПК G 01 N 27/22 / В. М. Пащенко, В. И. Ванцов, В. С. Чуклов, Д. В. Синицын; № 2000122691/28 ; заявл. 29.08.2000 ; опубл. 10.01.2003.
- Способ определения октанового числа автомобильных бензинов : пат. 2189039 Российская Федерация, МПК G 01 N 33/22, G 01 N 29/02 / В. М. Пащенко, В. С. Чуклов, В. И. Ванцов, А. А. Колосов ; – № 2000129830/28 ; заявл. 28.11.2000 ; опубл. 10.09.2002.
- 3. Способ идентификации марки товарного бензина и устройство для его осуществления : пат. № 2137111 Российская Федерация, МПК G 01 N21/64. / С. Л. Бердников, И. С. Бобкова, Я. М. Зеликин; – № 97122132/25 ; заявл. 22.12.1997 ; опубл. 10.09.1999.
- 4. Эсбенсен, К. Анализ многомерных данных : монография \ К. Эсбенсен. Черноголовка: Изд-во ИПХН РАН, 2005. 160 с.

УДК 546.791;542.942

А.И. Комяк, Д.С. Умрейко, Е.В. Вилейшикова, А.П. Зажогин, С.Д. Умрейко

РАЗРАБОТКА ЛАЗЕРНЫХ УЛЬТРА ЧУВСТВИТЕЛЬНЫХ МЕТОДОВ ОПРЕДЕЛЕНИЯ УРАНА В РАСТВОРАХ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ ИСКРОВОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ СО СДВОЕННЫМИ ЛАЗЕРНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

zajogin an@mail.ru

Технологический контроль процессов переработки жидких радиоактивных отходов, а также процессов кондиционирования их обеспечивается постоянным аналитическим сопровождением. Последнее, включает в себя, широкий спектр радиохимических, физических и физико-химических методов анализа. Применяемые методы анализа систематически модифицируются и множатся в соответствии с развитием и вновь возникающими потребностями технологических процессов. Растворы, подлежащие аналитическому контролю, представляют собой многокомпонентные системы. Хотя типичные

концентрации растворов макрокомпонентов достаточно высокие (от $n \cdot \text{мг/л}$ и выше), задача многокомпонентного анализа таких растворов очень сложна. Кроме того, эта задача осложнена высокими уровнями радиоактивности.

Химические методы количественного определения урана, к которым относятся весовые и титриметрические методы, отличаются большим разнообразием, обусловленным тем, что уран принадлежит к числу элементов, способных легко проявлять различную валентность, а также обладает ярко выраженной склонностью к образованию труднорастворимых соединений и комплексов с большим числом различных реагентов. Эти свойства урана находятся в тесной связи со строением его электронной оболочки, а также с легкой поляризуемостью его ионов. Все известные в настоящее время весовые методы определения урана основаны на осаждении его из растворов, в которых он находится в четырех- и шестивалентном состоянии. Кроме того, минимальная концентрация урана, при которой еще возможно его весовое определение с необходимой точностью, равна 0,05 *мг/мл*, что также является намного большей величиной, чем в случае применения других методов.

Существенным недостатком весовых методов определения урана является большая их продолжительность. Вследствие этого, несмотря на большое число разработанных весовых методов определения урана, они находят ограниченное практическое применение.

Целью данной работы являлась разработка методик определения содержания урана в растворах лазерным атомно-эмиссионным методом, обеспечивающих достаточную точность, высокую скорость и безопасность проведения анализов. Для повышения чувствительности анализа использовался метод осаждения иона уранила на бумажном фильтре с помощью ортофосфата калия. Растворимость ортофосфата уранила очень мала, так произведение растворимости его равно 6,2.10⁻²⁴ [1]/

Для проведения исследований использовался лазерный многоканальный атомноэмиссионный спектрометр LSS-1. В качестве источника возбуждения плазмы в спектрометре используется двухимпульсный неодимовый лазер (модель LS2131 DM). Лазер обладает широкими возможностями как для регулировки энергии импульсов (от 10 до 80 мДж), так и временного интервала между импульсами (от 0 до 100 мкс). Для проведения экспериментов кусочек бумажного фильтра диаметром 20 мм наклеивался на поверхность держателя образцов, а затем на поверхность фильтра наносилось и высушивалось по 10 мкл водных растворов 5% К₃РО₄ (в качестве осадителя уранила). Затем поверх соли наносилось по 10 мкл растворов, содержащих различные количество уранилнитрата (0,5 %, 0,1 %, 5.10⁻² %, 10⁻²%, 5.10⁻³ % и 10⁻³ % по урану). Все образцы помещались в герметичные стеклянные контейнеры, в которых и проводился анализ. Определение концентрации урана проводилось по одной из наиболее интенсивных в спектрах ионной линии U II (λ =385,958 нм). Для измерений использованы следующие параметры лазерных импульсов: интервал между импульсами 6 мкс, энергия импульсов 67 мДж.



Рис.1. Зависимость интенсивности линии урана в спектрах от концентрации (a); градуировочный график - (б) по одной точке -1, по сумме пяти – 5, по сумме десяти - 10

Как видно из рис. 1а, предварительное нанесение на подложку ортофосфата калия приводит к существенному уменьшению размера капли и соответствующему увеличению интенсивности линий. Наблюдается хорошая линейная зависимости между интенсивностью и концентрацией рис. 16 для результатов взятых по 1, 5 и 10 точкам.. Для повышения чувствительности можно суммировать результаты по большему количеству точек.

Проведенные исследования показали, что предварительное нанесение ортофосфата калия позволяет значительно уменьшить размеры зоны распределения и тем самым повысить интенсивность линий макроэлементов при их последующем нанесении. Использование фосфатов калия для увеличения интенсивности линий в спектрах высохших капель является перспективным направлением для разработки методик количественного анализа многокомпонентных водных растворов радиоактивных жидких отходов методом лазерной атомно-эмиссионной спектрометрии со сдвоенными лазерными импульсами.

Как видно из этих данных предлагаемая методика позволяет определять содержание урана в высушенных растворах при довольно низких концентрациях его.

 ^[1] Кобец Л. В., Умрейко Д. С. Фосфаты урана. // Успехи химии. - 1983. – Т. LII, вып. 6.
 – С. 897.

УДК 539.192

Е. Б. Дунина¹, А. А. Корниенко², Л.А. Фомичева³

РАСЧЕТ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ИОНА Sm³⁺ В КРИСТАЛЛЕ LiNbO₃

¹ Витебский государственный технологический университет, Московский пр, 72, 210035 Витебск, Беларусь

<u>L.Dun@mail.ru</u>

² Витебский государственный технологический университет, Московский пр, 72, 210035 Витебск, Беларусь

<u>a a kornienko@mail.ru</u>

³ Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П.Бровки, 6, 220013 Минск, Беларусь famichova@mail.ru

Кристаллы LiNbO₃ имеют широкое окно прозрачности от 350 до 1800 нм и находят широкое применение в оптоэлектронных и твердотельных устройствах для преобразования электромагнитного излучения из одного диапазона в другой. Эти кристаллы, активированные различными редкоземельными ионами, являются хорошими активными средами твердотельных лазеров. Поэтому для спектроскопические свойства этих кристаллов хорошо изучены. Наименее изучены спектроскопические свойства кристалла LiNbO3:Sm³⁺ отчасти из-за трудностей по интерпретации экспериментальных данных, вызванных «густым» расположением мультиплетов Sm³⁺, отчасти из-за сильного конфигурационного взаимодействия.

В связи с этим в данной работе выполнено описание сил осцилляторов абсорбционных переходов иона Sm³⁺ в кристалле LiNbO₃ в приближении слабого конфигурационного взаимодействия (D-O) [1,2] и в приближении промежуточного по силе конфигурационного взаимодействия (ICI) [3]. Результаты представлены в таблице.

Переход ${}^{6}H_{5/2} \rightarrow {}^{2S+1}L_{I}$	E_J , см ⁻¹	$f_{\rm expt} \times 10^6$	$f_{\rm CALC} \times 10^6$	$f_{\rm CALC} \times 10^6$
- 5/2 0		[4]	D-O [1,2]	ICI [3]
⁶ H _{13/2}	5073	0.383	0.262	0.221
⁶ H _{15/2} , ⁶ F _{1/2} , ⁶ F _{3/2} , ⁶ F _{5/2}	6678	7.90	7.948	7.913
⁶ F _{7/2}	7937	4.02	4.940	3.746
⁶ F _{9/2}	9152	2.69	2.818	3.348
${}^{6}F_{11/2}$	10490	0.501	0.460	0.690
${}^{4}G_{5/2}$	17800	0.104	0.029	0.028
${}^{4}F_{3/2}$	18797	0.054	0.005	0.014
${}^{4}\text{G}_{7/2}, {}^{4}\text{M}_{15/2}, {}^{4}\text{I}_{9/2}, {}^{4}\text{I}_{11/2}, {}^{4}\text{I}_{15/2}$	20780	3.78	1.406	3.295
${}^{4}F_{5/2}, {}^{4}M_{17/2}, {}^{4}G_{9/2}, {}^{4}I_{15/2}$	22487	0.294	0.209	0.497
${}^{4}M_{19/2}, {}^{6}P_{5/2}, {}^{4}L_{13/2}, {}^{4}K_{11/2}, {}^{4}F_{7/2}, {}^{6}P_{3/2}$	24150	10.20	10.013	10.212
RMS Dev			0.969	0.462

Более адекватный учет конфигурационного взаимодействия (ICI) приводит к уменьшению среднеквадратичного отклонения (RMS Dev) от 0.969 до 0.462 или на 52%.

Возбужденные конфигурации оказывают сильное влияние и на время жизни метастабильного состояния ${}^{4}G_{5/2}$. Вычисленное время жизни этого уровня в приближении ICI 849 мкс меньше времени жизни в приближении D-O 1219 мкс на 30%.

Таким образом, возбужденные конфигурации оказывают сильное влияние на интенсивности f-f переходов иона Sm³⁺ в кристалле LiNbO₃ и только при корректном учете конфигурационного взаимодействия можно получить удовлетворительное описание экспериментальных результатов.

- [1] Judd, B.R. Optical Absorption Intensities of Rare-Earth Ions / B.R. Judd // Phys. Rev. 1962. – Vol. 127, № 3. – P. 750-76.
- [2] Ofelt, G.S. Intensities of crystal spectra of rare-earth ions / G.S. Ofelt // J. Chem. Phys. 1962. – Vol.37, №3. – P. 511-520.
- [3] Kornienko, A.A. Dependence of the line strength of *f*-*f* transitions on the manifold energy. II. Analysis of Pr³⁺ in KPrP₄O₁₂ / A.A. Kornienko, A.A. Kaminskii, E.B. Dunina // Phys. Stat. Sol.(b). 1990. Vol. 157, № 1. P. 267-273.
- [4] Dominiak-Dzik, G. Sm³⁺ -doped LiNbO₃ crystals, optical properties and emission crosssections / G. Dominiak-Dzik // J. Alloys & Compounds. – 2005. – Vol. 391. – P. 26 – 32.

УДК 546.791;542.942

А.И. Комяк, Д.С. Умрейко, Е.В. Вилейшикова, А.П. Зажогин, С.Д. Умрейко

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ФОТОХИМИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ НАНОКОМПЛЕКСОВ УРАНА ПЕРЕМЕННОЙ ВАЛЕНТНОСТИ В АЦЕТОНЕ С ДМСО

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь zajogin an@mail.ru

Возможность использования оптического излучения для стимулирования химических реакций и управления ими привлекает к себе большое внимание. Области применения таких методов (например, экстракция, катализ и др.) чрезвычайно широки. Большой интерес в последнее время проявляется к фотохимии комплексных соединений уранила. В системе уранил—органический растворитель уран может выступать катализатором полимеризации органических соединений.

Несмотря на обилие накопленного экспериментального материала в области исследования процессов комплексообразования иона уранила [], многие важные стороны сложного по физико-химической природе процесса сольватации иона уранила в смесях растворителей остаются пока еще не совсем ясными и требуют всестороннего изучения. Прежде всего, это связано с тем, что при использовании смеси помимо взаимодействий между растворителями и ионом большую роль играет и взаимодействие между молекулами различных растворителей.

Целью настоящей работы являлось исследование процессов фотохимического образования комплексов четырех- и пятивалентного урана при облучении растворов UO₂(ClO₄)·5H₂O в ацетоне (концентрация 0,45 M) с переменным соотношением уранил:ДМСО (от 0 до 7) при светодиодном облучении (430—450 нм) систем. Исследования проводились с помощью спектрофотометра PV производства СП «Солар ТИИ». На рис.1 приведены участки спектров электронного поглощения облученных систем уранилперхлорат-ацетон-ДМСО с разным соотношением уранил-ДМСО.



Рис.1. Спектры электронного поглощения облученной системы уранилперхлорат-ацетон-ДМСО (в рамке соотношение уранил-ДМСО)

Установлено, что при облучении растворов в течение несколько часов в спектрах образцов без ДМСО и с добавкой его до трех молекул ДМСО на ион уранила раствор становится темнокоричневым и наблюдается появление полос, принадлежащих комплексам четырех- и пятивалентного урана (область спектра 600-650 нм). При облучении раствора $UO_2(ClO_4) \cdot 5H_2O$ в ацетоне в течение трех часов скорость образования комплексов четырехвалентного урана пропорциональна времени облучения. При хранении облученного раствора уранилперхлората в ацетоне происходит полимеризация раствора, Также меняются характеристики облученных растворов $UO_2(ClO_4) \cdot 5H_2O$ с большим соотношением уранил-ДМСО. Образуется мелкодисперсный осадок комплексов четырех- и пятивалентного урана, при этом изменения цвета раствора не наблюдается.

Полученные закономерности качественно можно объяснить, используя явление селективной сольватации. Явление селективной сольватации, с одной стороны, существенно осложняет интерпретацию зависимостей от состава, а, с другой, позволяет более глубоко проникнуть в проявление природы межчастичных взаимодействий. Так, изучение сольватации ионов в бинарных смесях растворителей показывает, что соотношение содержания индивидуальных растворителей в сольватной оболочке может значительно отличаться от их соотношения в смеси растворителей. В случае катионов, растворенных в апротонных растворителях (ацетон и др.), второй координационной сферы уже нет. Молекулы, связанные в первой координационной сфере, уже не способны к дальнейшему взаимодействию с образованием соответствующей оболочки, имеющей разную степень организации по сравнению со всей массой растворителя.

На основе координационной модели ионной сольватации процесс замещения молекул одного компонента (H₂O) на молекулы другого компонента (ДМСО) в координационной сфере катиона уранила при постепенном изменении состава смешанного растворителя рассматривается как обратимая реакция, состоящая из отдельных стадий, которая может быть описана уравнением:

Ki

$UO_2^{2^+}$.H₂O+iДMCO \Leftrightarrow UO₂²⁺.(n-i)H₂O.(ДMCO)i

где n - координационное число иона уранила в растворе равное 5, Ki - константа равновесия.

Рассчитанные зависимости концентрации различных типов комплексов от относительной концентрации молекул ДМСО приведены в таблице 1.

Таблица 1. Концентрация (в %) комплексов в образцах уранилперхлората с различным содержанием нейтральных лигандов L, рассчитанная методом повторных испытаний

Вид комплекса	Соотношение UO ²⁺ : ДМСО							
	1:0	1:1	1:2	1:3	1:4	1:5		
$UO_2(ClO_4)_2 \cdot 5H_2O$	100	32	8	1				
$UO_2(ClO_4)_2 \cdot 4H_2O \cdot L$		41	26	8	1			
$UO_2(ClO_4)_2 \cdot 3H_2O \cdot 2L$		20	34	23	5			
$UO_2(ClO_4)_2 \cdot 2H_2O \cdot 3L$		5	23	34	21			
$UO_2(ClO_4)_2 \cdot H_2O \cdot 4L$		1	8	26	41			
$UO_2(ClO_4)_2 \cdot 5L$			1	8	32	100		

Анализируя полученные результаты, можно сделать предположение, что в процессе фотополимеризации ацетона преимущественно участвуют только комплексы уранилперхлората с пятью молекулами воды. УДК 535.37

Н. А. Борисевич, В. А. Поведайло, Д. Л. Яковлев

СПЕКТРЫ ВОЗБУЖДЕНИЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ СТРУЙНО ОХЛАЖДЕННЫХ ОКСАЛИЛ ГАЛИДОВ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр.Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь poved@imaph.bas-net.by

Оксалил галиды (COHal)₂ являются галоген производными глиоксаля, которые содержат в своей структуре фрагмент O=C-C=O. Исследования спектральных характеристик, динамики возбужденных состояний и конформационных перестроек этих соединений как в основном, так и возбужденных электронных состояниях представляют практический и теоретический интерес. В настоящей работе получены спектры возбуждения флуоресценции оксалил фторида и оксалил хлорида охлажденных в сверхзвуковой струе и произведены отнесения колебательных полос к типам симметрии.



Рис. 1. а – спектр возбуждения флуоресценции оксалил фторида, охлажденного в сверхзвуковой струе, б - спектр поглощения в газовой фазе при температуре 25°С <u>Оксалил фторид.</u> На рисунке 1,а представлен спектр возбуждения флуоресценции молекул оксалил фторида, охлажденных в сверхзвуковой струе и спектр поглощения в газовой фазе (1,б) при комнатной температуре [1]. Из анализа спектров возбуждения и поглощения получены частоты максимумов колебательных полос в основном и возбужденном состояниях и выполнено их отнесение к типам симметрии. Приведены вращательные контуры полос со спектральным разрешением 0.05 см⁻¹.

Из полученных данных следует, что флуоресценция оксалил фторида наблюдается при возбуждении молекул излучением частоты чисто электронного перехода и в пределах полосы 7^2 , имеющих симметрию a_g и только при возбуждении в колебательные полосы симметрии b_g . Флуоресценция не обнаружена даже при возбуждении молекул на уровни 4^1 (a_g) и 5^1 (a_g), хотя переходы 4_0^1 и 5_0^1 высоко интенсивны в спектре поглощения в газовой фазе.

глощения в газовой фазе при Paнee [2] высоко интенсивные "запрещенные" потемпературе 25°C лосы были зарегистрированы в спектре возбуждения флуоресценции струйно охлажденного транс-глиоксаля (СОН)₂, что было объяснено заимствованием по механизму Герцберг-Теллера. "Запрещенные" переходы соответствовали полосам (A+B) и А типам, причем частоты этих переходов были расположены рядом с частотой разрешенных переходов С-типа.

Спектральные свойства оксалил фторида несколько отличаются от свойств глиоксаля. При регистрации спектров возбуждения оксалил фторида в сверхзвуковой струе варьировались давление смеси He-(COF)₂, концентрация (COF)₂ в смеси, использовалась смесь Ar-(COF)₂ с различной концентрацией (COF)₂, а также изучали струйно охлажденный оксалил фторид без газа носителя (при давлениях 40÷90 торр). В некоторых спектрах менее охлажденных молекул наблюдались слабо интенсивные горячие переходы 7_1^1 и 7_2^2 , а также их комбинации с переходами $7_0^{1}12_0^1$ и 8_0^1 , но основной результат не изменен в спектрах при струйном охлаждении. За исключением уровней 0^0 и 7^2 (ag) симметрии, флуоресценция оксалил фторида наблю-

далась только при возбуждении молекул на уровни b_g симметрии, но не a_g симметрии, по причине высокой эффективности безызлучательных переходов в последнем случае.

В работе уточнены некоторые частоты колебательных полос оксалил фторида, а также их отнесения к типам симметрии.

<u>Оксалил хлорид.</u> По данным работы [3], частота чисто электронного перехода (26712 см⁻¹) струйно охлажденного оксалил хлорида в спектре возбуждения флуоресценции почти на 500 см⁻¹ отличается от значения в спектре поглощения газовой фазы (27190.9 см⁻¹) [4]. Этот электронный переход п $\rightarrow \pi^*$ типа и следует ожидать большую активность C=O колебаний в возбужденном состоянии. На рисунке 2,а приведен спектр поглощения оксалил хлорида в газовой фазе [4]. Низкочастотная полоса отнесена к электронному S₀-S₁ переходу. Проявляется длинная прогрессия C=O колебаний вплоть до 4 порядка.



Рис. 2. а - спектр поглощения оксалил хлорида в газовой фазе при температуре 25°С, б – спектр возбуждения флуоресценции при сверхзвуковом охлаждении

На рисунке 2,6 представлен спектр возбуждения флуоресценции струйно охлажденного оксалил хлорида. Из спектра определены частоты колебательных полос в электронно возбужденном состоянии: 31, 80, 204, 282, 399 см⁻¹ и выполнено их отнесение к типам симметрии. Прописаны вращательные контуры полос.

Учитывая сходство спектра поглощения и спектра возбуждения флуоресценции, можно отнести полосу 26712 см⁻¹ в спектре возбуждения флуоресценции к переходу типа $7_0^2 8_1^0$. Частота чисто электронного S₀-S₁ перехода равна 27188.9 см⁻¹.

Высокую интенсивность $7_0^2 8_1^0$ полосы в спектре струйно охлажденного оксалил хлорида можно объяснить этим же эффектом и, в дополнение, большой вероятностью перехода $7^2 8_1$.

- Godunov I.A. Analysis of the absorption spectra of oxalyl halides in the gas phase. / I. A. Godonov, N. N. Yakovlev, D. V. Maslov, S. I. Bokarev. // J. Mol. Spectrosc. – 2010. – V. 260. – P. 124.
- [2] Pebay P.E. Fluorescence excitation spectra of trans-glyoxal. / P. E. Pebay, R. Jost // J. Mol. Spectrosc. -1987. - V. 121. - P. 167.
- [3] Yoshi T. Radiative and nonradiative processes in the excited states of jet-cooled oxalyl chloride. / T. Yoshi, M. Kiritani, N. Hirota, M. Baba // J. Phys. Chem. –1996.- V. 100.-P. . 3354.
- [4] Godunov I.A.Absorbtion of oxalyl chloride. / I. A. Godunov, N. N. Yakovlev, S. I. Bokarev; A. V. Abramenkov, D. V. Maslov // J. Mol. Spectrosc. – 2009. – V. 255. – P. 39.

УДК 535.375 + 543.424 + 577.322.2

С.Н. Терехов,¹ А.А. Квасюк,² А.Ю. Панарин,¹ И.А. Ходасевич,¹ Г.К. Жавнерко,² Я.В. Диченко,³ А.В. Янцевич,³ С.А. Усанов ³

СПЕКТРЫ ГИГАНТСКОГО КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ ЦИТОХРОМА Р450 7В1 И ЕГО КОМПЛЕКСА С ДЕГИДРОЭПИАНДРОСТЕРОНОМ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

terekhov@imaph.bas-net.by

² Институт химии новых материалов НАН Беларуси, Минск, Беларусь ³ Институт биоорганической химии НАН Беларуси, Минск, Беларусь

Цитохром P450 7B1 (СҮР7B1) – фермент, катализирующий 6а- и 7агидроксилирование оксистеринов [1]. Основные физиологические функции СҮР7В1 отвечают тканевой локализации фермента и заключаются в синтезе желчных кислот (печень), метаболизме нейростероидов (мозг), лигандов эстрогеновых и андрогеновых косвенно рецепторов. Кроме того, ОН участвует В регуляции синтеза иммуноглобулинов. Мутации гена СҮР7В1 приводят к ряду генетических заболеваний: дисфункция печени у новорожденных и спастическая параплегия 5-го типа (заболевание, характеризующееся параличом нижних конечностей и общей слабостью, вызванной дегенерацией моторных нейронов спинного мозга) у взрослых. В ряде работ установлена связь между низким уровнем экспрессии СУР7В1 в гиппокампе и развитием болезни Альцгеймера.

Функция СҮР7В1 в клетках нервной ткани – метаболизм нейростероидов (нейроактивных стероидов) – стероидов, синтезируемых *de novo* в нервной системе и способных быстро изменять возбудимость нейронов путем взаимодействия с ионными каналами на поверхности клетки. Многие аналоги нейростероидов являются лекарственными препаратами, например, альфаксолон. В настоящее время проходит клинические испытания ганаксалон, аналог аллопрегнанолона, перспективный препарат для лечения эпилепсии. Таким образом, модулируя активность СҮР7В1 можно изменять концентрацию нейростероидов в нервной ткани, и тем самым изменять возбудимость нервных клеток. В связи с этим СҮР7В1 является перспективной мишенью для поиска новых фармакологически активных соединений и создание системы, позволяющей отслеживать присоединение низкомолекулярных веществ к молекуле белка является актуальной задачей.

Одним из субстратов СҮР7В1 является дегидроэпиандростерон (ДГЭА) – многофункциональные стероидный гормон, также относящийся к нейроактивным стероидам. ДГЭА может быть использован как модельный объект, для создания системы детекции образования комплекса белок-лиганд.

В данной работе мы представляем результаты изучения СҮР7В1 и его связывания с ДГЭА с помощью гигантского комбинационного рассеяния света (ГКР). Спектроскопия ГКР является высокочувствительным методом, широко использующимся в аналитической химии и биомедицине, который позволяет получать

детальную структурную информацию о биомолекулах, адсорбированных на наноструктурированных поверхностях из благородных металлов (так называемых ГКРактивных субстратах). Для исследования спектров ГКР СҮР7В1 использованы активные серебряные наноструктуры, сформированные на поверхности пористого кремния (Ag-PSi) методом иммерсионного осаждения серебра.

Иммобилизацию СҮР7В1 на серебряные слои осуществляли тремя способами: путём ковалентного связывания с самоорганизованным монослоем молекул-линкеров (COM) из тиогликолевой или меркаптоундекановой кислот (TGA и MUA); за счет электростатической адсорбции на поверхности подложки, предварительно модифицированной цистамином (ЦА); осаждением непосредственно на пленку из наночастиц серебра. Спектры ГКР образцов регистрировали при возбуждении в полосу поглощения (Соре) гем белка с помощью Не-Сd лазера на длине волны 441,6 нм.

Анализ полученных данных показал, что во всех трех случаях для СУР7В1 соответствующие шестикоординированному наблюдаются спектры ГКР, низкоспиновому феррипорфирину, где атом железа имеет состояние окисления 3⁺. Наиболее интенсивные спектры были получены для белка. осажденного непосредственно на наноструктурированную поверхность серебра. Их интенсивность оказалась почти в два и в пять раз выше, чем в случае образцов, где СУР7В1 был иммобилизован на Ag-PSi посредством ЦА и MUA, соответственно. Это может быть связано с большей удаленностью порфиринового макроцикла за счет монослоя молекул-линкеров от серебряной поверхности, где реализуется наиболее сильное локальное поле. Интересно отметить, что при адсорбции на частицах серебра СУР7В1 деструкции белка не происходит, как это имело место для других цитохромов [2], в частности, для исследованного нами ранее цитохрома b₅. Спектры ГКР таких белков, при адсорбции на немодифицированной поверхности Ag, исчезают, что является свидетельством сильного возмущения нативной структуры аминокислотных цепочек со стороны металлической поверхности.

Присоединение ДГЭА к СҮР7В1, адсорбированному на пленке серебра, а также иммобилизованному на ней посредством ЦА и МUА не приводит к каким-либо изменениям в спектрах ГКР белка. В то же время при добавлении DHEA к СҮР7В1, связанному с молекулами MUA, наблюдается понижение частоты колебания v_4 с 1373 до 1363 см⁻¹. Такое поведение известной в литературе структурно-чувствительной линии v_4 свидетельствует о том, что при связывании с СҮР7В1 стероида DHEA происходит восстановление железа, состояние окисления которого становится 2+. Детальный механизм восстановления гемпорфирина в составе СҮР7В1, индуцированное DHEA, требует дальнейших исследований.

Работа выполнена в рамках задания ГПНИ "Конвергенция 3.2.06".

- [1] CYP7B1: one cytochrome P450, two human genetic diseases and multiple physiological functions / A.R. Stiles [at al]. // J. Biol. Chem. 2009 Vol. 284. P. 28485 28489.
- [2] Smulevich, G. Surface enhanced Raman spectroscopic evidencethat adsorption on silver particles can denature heme proteins / G. Smulevich, T.G. Spiro // J. Phys. Chem. 1985.
 Vol. 89 (№ 24). P. 5168-5173.

УДК 539.19

А. П. Зажогин¹, А. И. Комяк¹, А. А. Сокольский¹, Д. С. Умрейко², М. Б. Шундалов¹

СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОНФОРМЕРОВ ТРИОКСИДА УРАНА

¹ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

shundalov@bsu.by ² НИУ Институт прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко БГУ, ул. Курчатова, 7, 220108, Минск, Беларусь

По данным квантово-химического моделирования в рамках теории функционала плотности установлено, что молекулярный триоксид урана UO₃ имеет две равновесные неэквивалентные конфигурации. Расчеты выполнены с использованием гибридного функционала B3LYP в приближении эффективного остовного потенциала LANL2DZ для атома урана и полноэлектронного базисного набора сс-pVDZ для атома кислорода.

У первой из конфигураций, более устойчивой Ү-формы угол между «ураниловыми» связями О=U=O равен 88.7°; у второй, имеющей энергию на 216 см⁻¹ выше, Т-формы – 156.3°. Потенциальный барьер, разделяющий конфигурации, соответствует углу 120°; его высота равна 2731 см⁻¹.

Интерпретация экспериментальных ИК спектров молекулярного триоксида урана, полученных в условиях низкотемпературной матричной изоляции [1], основана на модели Т-формы. Рассчитанные значения колебательных частот наиболее интенсивных в спектрах [1] полос поглощения для двух конформаций оказываются близкими ($v_2 = 759 \text{ см}^{-1}$ для Y-формы, 757 см⁻¹ для T-формы и 746 см⁻¹ [1]; $v_4 = 877 \text{ см}^{-1}$ для Y-формы, 882 см⁻¹ для T-формы и 853 см⁻¹ [1]) и, таким образом, не могут служить надёжным признаком реализации одного из конформеров. Наибольшее отличие в рассчитанных частотах наблюдается, очевидно, для симметричной деформационной моды, отвечающей изменению угла между «ураниловыми» связями: 312 см⁻¹ для Y-формы и 208 см⁻¹ для T-формы.

Взаимопревращение У- и Т-форм без внешних воздействий за счёт когерентного туннелирования сквозь потенциальный барьер представляется маловероятным вследствие следующих факторов: 1) гипотетические конфигурации триоксида урана не являются эквивалентными, и величина «расширенного» (enhanced) расщепления обусловленного отличием энергий состояний [2], состояний В различных потенциальных минимумах, будет соответствовать разности энергий конформеров (т. е. около 200 см⁻¹); 2) высота потенциального барьера на порядок превышает величину kTдля обычных условий.

Не отвергая полностью возможность искусственного происхождения двух равновесных конфигураций молекулы триоксида урана, связанную с используемыми в расчёте приближениями, мы полагаем, что существование таких устойчивых форм не противоречит квантово-механическим представлениям о строении молекулярных соединений и образовании химических связей, и может быть обусловлено различной формой локализированных молекулярных орбиталей (различной гибридизацией орбиталей атома урана). В случае экспериментального подтверждения существования

устойчивых Y- и T-форм триоксид урана UO₃ представлял бы собой уникальный пример бистабильной молекулярной системы с валентным углом в качестве координаты внутримолекулярного движения с большой амплитудой.

- [1] Hunt R. D. Reactions of pulsed-laser evaporated uranium atoms with molecular oxygen: infrared spectra of UO, UO₂, UO₃, UO₂⁺, UO₂²⁺, and UO₃-O₂ in solid argon. / R. D. Hunt, L. Andrews // J. Chem. Phys. 1993. V. 98. P. 3690.
- [2] Yamada K. M. T. Isomerisation: don't forget the possibility of enhanced tunneling! A simple two-state model for the on-resonance and near-resonance behaviour of enhanced tunneling. / K. M. T. Yamada, S. C. Ross // J. Mol. Struct. – 2006. – V. 795. – P. 84.

УДК 535.37

И. В. Станишевский¹, К. Н. Соловьев², С. М. Арабей¹, В. А. Чернявский¹

ФЕЙДИНГ И АНТИФЕЙДИНГ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ ФОТОСТОЙКИХ ОРГАНИЧЕСКИХ ПИГМЕНТОВ

¹ Белорусский государственный аграрный технический университет, пр. Независимости, 99, 220023 Минск, Беларусь ² Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

Для изучения кинетики фосфоресценции фотостойких молекулярных систем широко используют импульсный и фазово-модуляционный методы [1]. При крайне малом вкладе или отсутствии излучательных $S_0 \leftarrow T_1$ -переходов эти методы неприменимы, и в этом случае может быть использован метод, основанный на эффекте уменьшения интенсивности флуоресценции – фейдинге флуоресценции (*fluorescence fading*) [2,3]. Эффект по своему спектроскопическому проявлению принципиально не отличается от известного фотохимического эффекта фотообесцвечивания [4], который может сопровождаться восстановлением флуоресценции [5]. Однако, в общем случае кинетика таких фотопроцессов сложна и описывается в рамках моделей, имеющих более трех энергетических уровней.

В работе, наряду с детальным изучением эффекта фейдинга, сообщается об комплементарном ему эффекте восстановления флуоресценции – антифейдинге флуоресценции (*fluorescence antifading*), сведения о котором в литературе отсутствуют. Эффект выявлен с привлечением методов аналитического и численного моделирования кинетики флуоресценции [6-8] для трехуровневых (S_0 , S_1 , T_1) молекулярных систем при воздействии прямоугольно-модулированного фотовозбуждения.

Аналитические расчеты показывают, что амплитудные и временные параметры кинетических кривых фейдинга и антифейдинга с высокой степенью точности описываются несложными аналитическими выражениями, в которые входят внутримолекулярные константы. Выражения позволяют определить время жизни метастабильного состояния T_1 . Кроме того, при наличии неспецифического свечения любой природы параметры могут дать точную количественную информацию о вкладе флуоресценции в общую интенсивность свечения.

Фазы спада (фейдинга) и восстановления (антифейдинга) отчетливо видны на рисунке, на котором приведена экспериментальная кинетика интенсивности флуоресценции цинкового комплекса *трет*-бутилзамещенного тетрабензопорфина в поливинилбутирале при комнатной температуре с использованием фотовозбуждения последовательностью двухступенчатых импульсов, разделенных темновой паузой.

Эффекты фейдинга и антифейдинга флуоресценции имеют общее научное и методическое значение и могут найти практические применения, например, для обнаружения долгоживущих (метастабильных) неизлучающих молекулярных состояний и исследования их свойств.


- [1] Лакович Дж. Основы флуоресцентной спектроскопии. / Дж. Лакович // Москва. Мир. – 1986. – С. 496.
- [2] Avarmaa R. Fluorescence detection study of molecular triplet states in chlorophyll and related compounds. / R. Avarmaa // Mol. Phys. 1979. T. 37. C. 441.
- [3] Benthem L. Fluorescence response to triplet state populations in porphyrins. / L. Benthem, R. B. M. Koehorst, T. J. Schaafsma // J. Mol. Struct. – T. 79. – 1982. – C. 455.
- [4] West S. S. Quantitation of fluorescence fading phenomena for identifying intracellular biopolymers. / S. S. West, J. F. Golden, J. M. Menter, L. D. Love // J. Histochem Cytochem. – 1976. – T. 24. – C. 59.
- [5] Axelrod D. Mobility measurement by analysis of fluorescence photobleaching recovery kinetics. / D. Axelrod, D. E. Koppel, J. Schlessinger, E. Elson, W. W. Webb // Biophys. J . - 1976. - T. 16. - C. 1055.
- [6] Станишевский И. В. Моделирование динамики фотовыжигания стабильных спектральных провалов импульсными частотно-периодическими и постоянными источниками. / И.В.Станишевский, К.Н.Соловьев // Журн. прикл. спектр. – 1998. – Т. 65. – С. 532.
- [7] Maxima. http://maxima.sourceforge.net/.
- [8] Scilab. http://www.scilab.org/.

УДК 535.34 + 539.1.047+543.42

Т.Ф. Райченок¹, И.В. Скорняков¹, Г.Б. Толсторожев¹, О.И. Шадыро², О.К. Базыль³, В.Я. Артюхов³, Г.В. Майер³

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ

¹ Институт физики имени Б.И. Степанова НАН Беларуси, <u>gbt@imaph.bas-net.by</u> ²Белорусский государственный университет, 220030 Минск, ³ Томский государственный университет,634050, Россия Томск

Исследования квантово-химических и спектроскопических свойств производных бензойной кислоты (БК), установление особенностей внутри- и межмолекулярных взаимодействий, выявление спектроскопических признаков фармакологической активности соединений этого класса являются актуальными. Бензойная кислота, ее гидроксилированные и метоксилированные производные привлекают особое внимание в плане изучения их биомедицинских свойств. Данные соединения широко распространены в природе, малотоксичны и перспективны для применения в медицине.

В докладе рассмотрены экспериментальные и теоретические результаты изучения строения, электронной структуры, люминесцентных и ИК спектроскопических свойств молекул БК. На основе квантово-химических расчетов, анализа спектральнолюминесцентных характеристик и ИК фурье-спектров [1] всесторонне исследованы электронные структуры биологически активных молекул бензойной кислоты и ее производных. Дана интерпретация электронных полос в спектрах поглощения, определена орбитальная природа флуоресцентного состояния, установлены основные каналы и механизмы фотофизических релаксационных процессов в молекулах исследованных соединений. Для ряда производных БК рассчитаны энергетические схемы электронно-возбужденных состояний и квантовые выходы флуоресценции молекул. Измерение спектров и коэффициентов экстинкции показало, что полосы поглощения данного класса молекул довольно близки по энергии, более заметна интенсивности электронных переходов. разница В Сравнение расчетных экспериментальных спектров поглощения показало, что длинноволноваые полосы поглощения БК и 4-гидроксиБК образованы двумя электронными переходами, при этом $S_0 \rightarrow S_1$ - переход является переходом $n\pi^*$ -типа, связанным с неподеленной парой электронов кислорода группы C=O, а электронный переход $S_0 \rightarrow S_2(\pi \pi^*)$ формирует интенсивность длинноволновой полосы поглощения. У молекул 3,4-дигидроксиБК и метоксилированных производных первым электронным переходом является переход $\pi\pi^*$ - типа. В зависимости от замещения флуоресцентное состояние в молекуле может быть как $n\pi^*$ (молекулы БК и 4-гидрохиБК), так и $\pi\pi^*$ - типа (молекулы 3,4дигидроксиБК, 3-метокси-4-гидроксиБК и3,5- диметокси-4-гидроксиБК). Анализ фотофизических процессов подтверждает этот вывод. Соединение БК флуоресцирует в гексане с квантовым выходом γ =0.01, с длительностью флуоресценции τ = 0.2 нс, λ_{max} = 296 нм. Для растворов 3-метокси-4-гидроксиБК в гексане квантовый выход флуоресценции $\gamma = 0.3$, длительность флуоресценции $\tau = 1.2$ нс, $\lambda_{max} = 315$ нм. В молекуле 3-метокси-4-гидроксиБК флуоресцентное состояние является состоянием

 $\pi\pi^*$ - типа, что приводит к увеличению почти на два порядка константы скорости радиационного распада. Спектрально-люминесцентные измерения проводились при концентрациях молекул < 2 10⁻⁴ М. Спектры возбуждения флуоресценции этих соединений совпадают с длинноволновой полосой поглощения и спектры флуоресценции не зависят от длины волны возбуждения.

Квантово-химические расчеты находятся в соответствии с данными эксперимента.

Известно, что биологическая активность органических соединений предполагает участие молекул в межмолекулярных взаимодействиях. Важным аспектом проявления биологической активности считаются протоноакцепторные свойства молекул. Характеристикой протоноакцепторных свойств биомолекул может быть величина молекулярного электростатического потенциала (МЭСП), являющаяся интегральной характеристикой зарядового распределения в молекуле.

Оценены протоноакцепторные свойства молекул ароматических кислот, содержащих карбоксильную группу СООН, в которой непосредственно связаны между собой карбонильная группа и гидроксил. Их взаимное влияние обусловливает разнообразие физико-химических и биологических свойств, отличных от свойств карбонильных и гидроксильных соединений. На основе расчетов по методу (МЭСП) показано, что протоноакцепторные свойства бензойной кислоты и ее производных формируются, в основном, за счет кислорода группы С=О карбоксильной группы СООН. Введение заместителей в ароматический цикл приводят к возникновению новых акцепторных центров, но более слабых, чем кислород доминирующей карбонильной группы.

Исследованы ИК спектры растворов соединений в диапазонах 3700–2400 см⁻¹ и 1780–1650 см⁻¹. В интервале 3700–2400 см⁻¹ расположены полосы поглощения валентных колебаний свободных и ассоциированных ОН-групп. Полосы в диапазоне 1780–1650 см⁻¹ обусловлены колебаниями групп С=О.

Дана интерпретация различий ИК спектров растворов бензойной кислоты и ее производных в области О–Н и С=О колебаний. В молекулах бензойной кислоты за счет возникновения межмолекулярных водородных связей О–Н…О=С образуются циклические димеры, а в молекулах 3-метокси-4-гидроксибензойной кислоты и 3,5-диметокси-4-гидроксибензойной кислоты реализуются внутримолекулярные водородные связи О–Н…О–СН₃ между гидроксильной О–Н и метокси- группой О–СН₃.

Анализ ИК спектров растворов в CCl₄ и кристаллов БК позволил выявить спектральные признаки, которые обусловлены молекулярными взаимодействиями, идентифицировать их и сопоставить с фармакологической активностью.

Представленные спектроскопические результаты расширяют представления о физико-химических свойствах ароматических кислот, важных для формирования их биологической активности и могут оказаться полезными для направленного синтеза ряда новых фармакологчески эффективных препаратов.

[1] Бельков М. В. Инфракрасные спектры и структура молекулярных комплексов ароматических кислот. / М.В. Бельков, С.Д. Бринкевич, С.Н. Самович, И.В. Скорняков, Г.Б. Толсторожев, О.И. Шадыро // ЖПС. –2011. – Т. 78. – С. 851.

Физика наноструктур

УДК 535.373 + 539

Д. Коверко¹, Ф. Герлах², Д. Тойбер³, Э. Зенькевич⁴, К. фон Борцисковски³

ВРЕМЕННАЯ ДИНАМИКА ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ В РЕЖИМЕ РЕГИСТРАЦИИ ОДИНОЧНЫХ НАНОАНСАМБЛЕЙ НА ОСНОВЕ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК CdSe/ZnS И ОРГАНИЧЕСКИХ ХРОМОФОРОВ

¹Университет Цюриха, Институт неорганической химии, 8057 Цюрих, Швейцария <u>danny.kowerko@physik.tu-chemnitz.de</u>

²Фиботек Фибероптикс, 98617 Мейнинген, Германия f.gerlach@physik.tu-chemnitz.de

³Институт физики, Технический университет Хемнитца, 09107 Хемнитц, Германия <u>borczyskowski@physik.tu-chemnitz.de</u>

⁴Белорусский национальный технический университет, 220013 Минск, Беларусь <u>zenkev@tut.by</u>

Успехи, достигнутые в последние годы в области синтеза полупроводниковых квантовых точек (КТ) с контролируемыми размерами, формой и оптическими свойствами, а также при формировании их наноансамблей с функциональными органическими лигандами, явились основой широкого использования таких наноструктур в современных нанотехнологиях и молекулярной электронике. Для реализации практических задач в этом направлении остается не решенным ряд релаксационных ПУТЯМИ И механизмами вопросов, связанных с процессов, определяющих эффективность экситонной фотолюминесценции КТ в самособирающихся наноансамблях «КТ-органический лиганд»: 1) динамика обмена поверхностными лигандами; 2) влияние органических лигандов на структуру и свойства поверхности КТ; 3) роль полярности и температуры окружения в динамике релаксационных процессов.

Исследование этих вопросов было проведено нами недавно при комбинированном использовании методов стационарной, время-разрешенной кинетической спектроскопии и методов спектроскопии одиночных самособирающихся наноансамблей на основе ТОФО-стабилизированных полупроводниковых квантовых точек CdSe/ZnS и пиридилзамещенных органических молекул (порфиринов и перилен-бисимидов) [1, 2].



Рис. 1. Статистика мерцаний одиночной квантовой точки CdSe/ZnS (A) и одиночного наноансамбля «КТ+порфирин» при молярном отношении x=10 (Б). Образцы получены методом «spin coating» на кварцевой подложке при 295 К. Времена $< t_{off} > (1)$ и $< t_{on} > (2)$ усреднены по 20 объектам, $\lambda_{воз} = 514.5$ нм (лазер)

Формирование наноансамблей «КТ+порфирин» сопровождается тушением фотолюминесценции (ФЛ) КТ за счет процессов туннелирования электрона в условиях квантового ограничения и слабого переноса энергии КТ—порфирин. Сравнительное исследование статистики мерцаний ФЛ одиночных наноансамблей «КТ+порфирин» показывает, что такое тушение проявляется в существенном увеличении времен $< t_{off} > = 0.75$ с по сравнению с $< t_{off} > = 1.2$ с для одиночных КТ (рис. 1), что отражает реализацию дополнительных «темных» состояний, обусловленных тушением ФЛ КТ при связывании с молекулами порфиринов.

При переходе к неполярным средам (вязкий тетракис-2–этил-гексокси-силан, TEHOS) доминирующим процессом тушения ФД КТ в наноансамблях является резонансный безызлучательный перенос энергии на молекулы красителя (периленбисимид, DTPP). Для одиночного наноансамбля обнаружено скоррелированое (в течение нескольких минут) мерцание интенсивностей свечения КТ и молекулы красителя, сопровождаемое спектральными сдвигами свечения обеих компонент, что обусловлено структурной динамикой гибкой молекулы красителя на поверхности квантовой точки (рис. 2). Установлено, что экспериментальные и теоретические значения эффективности переноса энергии находятся в хорошем соответствии.



Рис. 2. Структура и схема ориентации наноансамбля «КТ+периленбисимид» (А), спектральная динамика (Б) и корреляция во временах мерцания (blinking) донорной (КТ) и акцепторной (периленбисимид) компонент (В), одновременно регистрируемых при двух различных длинах волн

Работа поддержана Немецким научным обществом (DFG GRK 829/3), Международным грантом Фольксвагена № 1/79 435 и ГПНИ «Конвергенция - 3.2.08».

- [1] T. Blaudeck. Formation Principles and Ligand Dynamics for Nanoassemblies of CdSe Quantum Dots and Functionalized Dye Molecules. / T. Blaudeck. E. Zenkevich, M. Abdel-Mottaleb, K. Szwaykowska, D. Kowerko, F. Cichos, C. von Borczyskowski // A European Journal of Chemical Physics and Physical Chemistry. – 2012. – V. 13. – P. 959.
- [2] T. Blaudeck. Formation Principles and Ligand Dynamics for Nanoassemblies of CdSe Quantum Dots and Functionalized Dye Molecules. / T. Blaudeck. E. Zenkevich, M. Abdel-Mottaleb, K. Szwaykowska, D. Kowerko, F. Cichos, C. von Borczyskowski // A European Journal of Chemical Physics and Physical Chemistry. – 2012. – V. 13. – P. 959.

УДК 548.0: 535.33

А.П.Низовцев¹ С.Я Килин¹, А.Л. Пушкарчук², В.А. Пушкарчук³, С.А. Кутень⁴, F.Jelezko⁵

СВЕРХТОНКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СИСТЕМАХ NV+¹³С В АЛМАЗЕ: КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТ

¹Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь,

apniz@dragon.bas-net.by

²Институт физико-органической химии НАНБ, ул. Сурганова, 13, 220072 Минск, Беларусь

³ Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П. Бровки, 6, 220013 Минск, Беларусь,

⁴Институт ядерных проблем Белорусского государственного университета, ул. Бобруйская, 11, 220030 Минск, Беларусь

⁵Institute for quantum optics, Ulm University, Albert-Einstein Allee 11, 89069 Germany

Индивидуальные центры окраски «азот-вакансия» (NV центры) в алмазе и их комплексы с ядерными спинами атомов 13 C в наноструктурированном алмазе считаются в настоящее время одним из самых перспективных кандидатов для практической реализации устройств обработки квантовой информации (квантовых компьютеров, квантовой криптографии, квантовой памяти, квантовых репитеров и т.п.) (см., например [1]). При надлежащей функционализации поверхности наноалмазы с NV центрами могут использоваться в качестве наноразмерного датчика для детектирования слабых магнитных полей, что делает возможной регистрацию одиночных электронных и даже ядерных спинов в биологически важных объектах с беспрецедентно высоким пространственным разрешением.

Все эти многообещающие применения требуют точной характеризации и полного понимания спиновых свойств спиновых систем, включающих в себя одиночный электронный спин S=1 NV центра, связанных сверхтонким взаимодействием (СТВ) с ядерными спинами I=1/2 атомов ¹³C, расположенных в различных узлах решетки алмаза. В докладе излагаются результаты моделирования методом функционала плотности структурных и спиновых свойств систем NV+¹³C в пассивированном водородом углеродном кластере C₂₉₁ [NV]⁻H₁₇₂, а также интерпретации на их основе широкого круга имеющихся экспериментальных данных, полученных на одиночных NV центрах и их комплексах как с близкими, так и с удаленными от NV центра ядерными спинами ¹³C.

Для всех возможных положений ядерного спина атома 13 С в кластере рассчитаны матрицы СТВ, которые были использованы в рамках метода спин гамильтониана для моделирования проявлений СТВ в явлениях оптически детектируемого магнитного резонанса (ОДМР). В частности, на Рис. 1 показано сравнение результатов наших расчетов (слева) с экспериментальными данными работы [2] (справа), в которой было выполнено систематическое исследование ОДМР спектров ~400 различных одиночных комплексов NV+ 13 С в алмазе и были измерены величины расщепления за счет СТВ в

нулевом магнитном поле состояний $m_s=\pm 1$ NV центров для разных комплексов NV+¹³C. На обоих рисунках видны дискретные значения величин СТВ расщепления, обусловленные возможными положениями атома ¹³C в решетке алмаза относительно NV центра. Вследствие симметрии NV центра имеется несколько (3 или 6) эквивалентных положений в решетке, образующих семейства, характеризующиеся одинаковой величиной СТВ с NV центром и обозначенные на рисунках буквами английского алфавита.



Рис. 1. Сравнение экспериментально измеренных величин СТВ расщепления для разных систем NV+¹³C с результатами модельных расчетов

Рис. 1 демонстрирует не только качественное, но и количественное соответствие теории и эксперимента. Кроме того, выполненный анализ корреляции характеристик СТВ со структурными параметрами систем NV+13C позволяет определить возможные положения атома 13C относительно NV центра по экспериментально измеренным спектрам ОДМР, что подтверждено анализом конкретной системы NV+13C, изученной в [2].

- [1] Jelezko, F. Quantum information processing in diamond / F. Jelezko, J. Wrachtrup // J. Phys. Condens. Matter. -2006. -V.18. -P. S807.
- [2] Dreau, A. High-resolution spectroscopy of single NV defects coupled with nearby 13C nuclear spins in diamond. / A. Dreau, J.-R. Maze, M. Lesik, J.-F. Roch, and V. Jacques // Phys. Rev. B. -2012. -V. 85. -P. 134107.

УДК 535.34

О.В. Буганов, А.Д. Замковец, А.Н. Понявина, А.Д. Широканов, С.А. Тихомиров

ПЛАЗМОН-ЗАВИСИМАЯ МОДИФИКАЦИЯ СПЕКТРАЛЬНО-КИНЕТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТОНКИХ ПЛЕНОК ФТАЛОЦИАНИНА МЕДИ В ПРИСУТСТВИИ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь, bouganov@imaph.bas-net.by

Сверхбыстрый оптический отклик полупроводниковых тонких пленок и наноструктур является важнейшим обстоятельством, определяющим востребованность и перспективность этих материалов для создания элементной базы нанофотоники и оптоэлектроники. До последнего времени влияние плазмонных наночастиц на свойства полупроводниковых тонкопленочных элементов анализировалось главным образом в плане возможности изменения их спектрально-селективных характеристик, в частности для увеличения эффективности активных элементов солнечных батарей. Было установлено, что допирование функциональных полупроводниковых слоев плазмонными наночастицами может существенно менять их поглощение и проводимость в силу возникающих в таких системах ближнеполевых эффектов, а также за счет дополнительных возможностей для переноса энергии и носителей заряда в таких структурах [1,2].

В настоящей работе в пикосекундном диапазоне времен исследованы спектрально-кинетические характеристики двухслойных и многослойных систем на основе серебра (Ag) и фталоцианина меди (CuPc), полученных в процессе последовательного термического осаждения Ag и CuPc на стеклянные подложки в вакууме. Измерения время-разрешенных дифференциальных спектров проводились по методике «возбуждение-зондирование» с помощью фемтосекундного спектрометра, в основе которого лежит оригинальный генератор фемтосекундных импульсов - лазер на сапфире с титаном с импульсной синхронной накачкой.

На рисунке 1 приведены стационарные спектры оптической плотности двухслойных систем Ag/CuPc, которые представляли собой плотноупакованный монослой наночастиц Ag с полосой поверхностного плазмонного резонанса поглощения (ППРП) в области 450-500 нм, закрытый тонкой пленкой CuPc. CuPc имеет в исследуемой области спектра три полосы поглощения (350, 620 и 700 нм). Как видно из рисунка, в присутствии наночастиц (НЧ) поглощение в слоях CuPc увеличивается, что можно объяснить наличием сильного поля вблизи поверхности плазмонных НЧ [2]. Поскольку ближнее поле с удалением от поверхности плазмонных наночастиц быстро ослабляется, регистрируемый эффект, как это следует из сравнения рисунков 1а и 16, наиболее значителен для толщин полупроводникового слоя, сравнимых с размером плазмонных наночастиц.

Дифференциальные спектры поглощения наноструктур Ag/CuPc, полученные при различных значениях времени задержки, представлены на рисунке 2. Из сравнения рисунков 2а и 26 видно, что в присутствии наночастиц серебра наблюдается

увеличение просветления в спектральной области 550-750 нм, соответствующей длинноволновым полосам поглощения CuPc. Это коррелирует со стационарными спектрами данных образцов и может быть объяснено следующим образом. Известно, что под воздействием мощного возбуждающего лазерного импульса происходит просветление и расширение полосы ППРП [3,4]. Это обусловлено разогревом электронного газа, термализация которого осуществляется за счет электрон-электронного, электрон-поверхностного и электрон-фононного рассеяния. Наведенное изменение ППРП сопровождается ослаблением интенсивности ближнего поля и связанного с этим дополнительного поглощения CuPc, что приводит к более сильному эффекту просветления полос поглощения CuPc в присутствии наночастиц серебра. Плазмон-зависимая природа обнаруженной модификации дифференциальных спектров тонких пленок фталоцианина меди в присутствии наночастиц серебра подтверждается сопоставлением быстрых компонент релаксации наведенного просветления в полосах поглощения CuPc (620 нм) и ППРП (450 нм), приведенных на рисунке 2 в.



Рис. 1. Оптическая плотность пленок CuPc толщиной 25 (1а) и 5 нм (1б) и разностные спектры (D_{Ag/CuPc} - D_{Ag}). Размеры частиц Ag ~ 3- 5 нм, толщина пленок CuPc – 25 (а) и 5 (б) нм



Рис. 2. Дифференциальные спектры нестационарного поглощения пленки CuPc толщиной 25 нм (а) и нанослоя Ag с размерами частиц ~ 15 -20 нм, закрытого пленкой CuPc толщиной 25 нм (б), кинетики структуры Ag/ CuPc (в) на λ=450 нм (кривая 1) и на λ=620 нм (кривая 2)

Полученные результаты могут быть полезными при разработке быстродействующих полностью оптических переключателей и модуляторов, а также других устройств на основе использования гибридных материалов.

- [1] O. Stenzel, S. Wilbrandt, A. Stendhal, et al. // J. Phys. D.-1995. V. 28. -P. 2154
- [2] А.Д.Замковец, А.Н.Понявина // Журн. прикл. спектр. -2012. Т. 79, №6. С.907-912
- [3] S.Link, M.A.El-Sayed // Annu. Rev. Phys. Chem. 2003. V. 54. P. 331-366
- [4] О.В.Буганов, А.Д. Замковец, А.Н. Понявина, С.А.Тихомиров, Л.В.Баран // Журн. прикл. спектр. 2011. Т. 78, № 5. С.735-741

УДК 535.016

С. Н. Курилкина, В. Н. Белый, Н. С. Казак

ГЕНЕРАЦИЯ БЕССЕЛЕВЫХ ПЛАЗМОН - ПОЛЯРИТОНОВ В ТОНКОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛЕНКЕ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь s.kurilkina@ifanbel.bas-net.by

Поверхностные плазмоны (ПП) – это бегущие поверхностные электромагнитные волны, возбуждаемые на поверхности металла при выполнении резонансных условий [1]. Для их генерации используются «традиционные» (например, гауссовы) световые пучки. В последние десятилетия внимание многих исследователей привлекают так называемые квазибездифракционные поля, среди которых особое место занимают бесселевы световые пучки (БСП), дифракционная расходимость приосевой области которых при распространении в среде оказывается значительно меньше таковой для гауссовых пучков [2-4]. В настоящем сообщении рассмотрены особенности генерации плазмонных полей в тонкой металлической пленке при ее облучении бесселевыми световыми пучками.

На основании решения уравнений Максвелла с учетом граничных условий получены выражения для вектора электрической напряженности поля, генерируемого векторным ТМ-поляризованным БСП m-го порядка как внутри, так и вне тонкой металлической пленки толщиной h с показателем преломления n_1 , разделяющей подложку и внешнюю среду с показателями преломления соответственно n_0 и n_2 . Найдено дисперсионное уравнение, определяющее условие существования плазмона в данной структуре.

Установлено, что, в отличие от распространяющихся поверхностных плазмонполяритонов, поле, генерируемое вблизи поверхности металла бесселевым световым пучком при выполнении условия плазмонного резонанса -- так называемый бесселев плазмон-поляритон (БПП) -- является локализованным.

Показана возможность существования двух типов бесселевых плазмонполяритонов, отличающихся характером распределения как продольной, так и поперечной составляющей вектора электрической напряженности \vec{E} в металлической пленке. Установлено, что БПП с антисимметричным (симметричным) относительно центральной плоскости металлической пленки распределением продольной составляющей вектора \vec{E} характеризуются меньшим (большим) радиусом первого максимума R_1 в поперечном распределении интенсивности. Обосновано, что при удалении от поверхности «металл – диэлектрик» на расстояние $\leq \lambda R_1$ практически не изменяется. Обнаружено, что при увеличении толщины металлической пленки имеет место вырождение бесселевых плазмон-поляритонов.

Изучены особенности затухания бесселева плазмон-поляритона внутри металлической пленки. Показано, что в всевозможных радиальных направлениях в сечениях, параллельных поверхности «металл – диэлектрик», БПП испытывает экспоненциальное затухание. При уменьшении же *h* оказывается возможной генерация

БПП, затухание которого в радиальном направлении меньше такового для бесселева плазмон- поляритона, возбужденного на свободной границе «металл – диэлектрик».

Обнаружен новый тип квазибездифракционного поля: бесселев мультиплазмонсуперпозицией поляритон, генерируемый бесселевых световых пучков с противоположными топологическими зарядами. Показано, что поле бесселева мультиплазмона-поляритона характеризуется азимутальной модуляцией интенсивности. Вследствие этого, в распределении интенсивности такого бесселевом мультиплазмон-поляритона содержатся резко выраженные острые наноразмерные пики (см. рис.1).



Рис. 1. 2D (а) и 3D (б) распределение нормированной на свой максимум интенсивности продольной компоненты вектора электрической напряженности бесселева мультиплазмонполяритона в воздухе на расстоянии $z=\lambda/3$ мкм от поверхности золотой пленки толщиной 50

нм структуры "стекло SF10 – слой Au– воздух". Бесселев мультиплазмон-поляритон генерируется суперпозицией бесселевых световых пучков J_3 и J_{-3} с углами конусности

37.5°.

Обсуждены возможности практического использования бесселева мультиплазмон- поляритона для тестирования поверхности одновременно по нескольких каналам. Предложена схема мультизонда, основанного на использовании бесселева мультиплазмон-поляритона.

Рассмотрены перспективы использования БПП при создании оптических пинцетов, для манипулирования наночастицами, в ближнеполевой микроскопии высокого разрешения.

- Raether H. Surface Plasmons on Smooth and Rough Surfaces and on Gratings. Springer-Verlag: Berlin, 1988.
- [2] Durnin J. Exact solutions for nondiffracting beams. I. The scalar theory/ J.Durnin// J.Opt.Soc.Am. - 1987. - V.A4. - P. 651-654.
- [3] Bouchal J. Self-reconstruction of a distorted nondiffracting beam/ J. Bouchal, Z. Wagner, M. Chlup// Opt. Commun. – 1998. – V.151. – P.207-211.
- [4] Kurilkina. S. N. Features of evanescent Bessel light beams formed in structures containing a dielectric layer/ S.N.Kurilkina, V.N. Belyi, N.S. Kazak// Opt. Comm. – 2010. – V.283. – P. 3860-3868.

УДК 53.085.344

А. В. Агашков, В. В. Филиппов

ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ ОТРАЖЕНИИ СВЕТА ОТ СУБМИКРОННЫХ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>a.agashkov@ifanbel.bas-net.by</u>

Одним из интересных применений наноразмерных металлических структур является управление поляризацией света за счет взаимодействия фотонов и поверхностных плазмонов. Технология создания подобных систем все еще является уникальной и не позволяет тиражировать их. Производство субмикронных изделий в настоящее время хорошо налажено. Целью данной работы является исследование поляризационных эффектов при отражении света от планарных металлических структур.

В эксперименте использовался поляризационный микроскоп с лазерным освещением на длинах волн 532 и 633 нм. На Рис. 1 представлены изображения штриховой структуры на алюминиевой пленке с периодом, длиной, шириной и глубиной 1600, 890, 470 и 120 нм, соответственно. Поляризатор ориентирован вертикально, угол (в градусах) между поляризатором и анализатором для каждой пары изображений выше и ниже надписи указан на рисунке. Штрихи верхнего ряда ориентированы под углом 45°, а нижнего – 45° к оси поляризатора. Две серии





снимков были выполнены для того, чтобы исключить возможную аппаратную асимметрию. Как видно из рисунка, максимальное изменение состояния поляризации отраженного света наблюдается в области штрихов при скрещенных поляризаторе и анализаторе. Резко асимметричная картина, наблюдаемая при развороте анализатора от скрещенного положения, объясняется в рамках следующей модели: в области штриха максимальное отражение имеет свет, поляризованный параллельно ему, а в плоскости, перпендикулярной штриху, наблюдается максимальное поглощение, связанное с возбуждением плазмонов за счет дифракции на его границе. Как показал эксперимент, подобная планарная структура эквивалентна обычному поляризатору.

При увеличении размеров канавок до нескольких микрон существенное влияние начинают оказывать интерференционные эффекты, выявляемые в скрещенных поляризаторах. На Рис. 2 представлен ряд изображений структур глубиной ~10 мкм, вытравленных в пластине кремния и покрытых пленкой золота толщиной ~50 нм, съемка с $\lambda = 532$ нм. На Рис. 2a, d эти области ограничены замкнутыми черными кривыми, шкалы на всех фотографиях – 10 мкм. При малом увеличении (Рис. 2b, e) в



Рис. 2

скрещенных поляризаторах наблюдается только модуляция яркости границ структуры. При большом увеличении (Рис. 2с, f) в пределах полостей хорошо заметна тонкая интерференционная структура с периодом полос 0.45-0.7 мкм. Для правильной интерпретации данного явления необходимо проведение дальнейших исследований.

Полученные результаты показывают, что субмикронные металлические структуры представляют интерес для создания планарных устройств, управляющих состоянием поляризации отраженного света.

УДК 614÷620.22:539.2

Н. В. Плешко¹, В. И. Крот¹, Г. В. Крылова¹, В. П. Егорова¹, А. С. Егоров²

МИКРОСКОПИЯ КОМПЛЕКСОВ ДНК С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТРУБКАМИ

¹Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

nadyavp@tut.by

² Институт физиологии НАН Беларуси, ул. Академическая, 28, 220072 Минск, Беларусь

Исследования, направленные на практическое применение углеродных наноматериалов активно проводятся во всем мире. Результаты данных исследований позволяют выделить углеродные нанотрубки (УНТ) как наиболее перспективные объекты, которые положили начало развитию многочисленных биомедицинских разработок: новых типов адсорбентов, систем доставки генов и лекарств, новых материалов для имплантантов, сенсоров на реакцию гибридизации ДНК, миниатюрных электронных и оптических устройств по узнаванию ДНК, белков и других биологических структур. Биосовместимость, возможность использования in vivo, высокая чувствительность УНТ к окружению являются очень важными свойствами, которые расширяют перспективы их использования в разных областях науки [1]. В связи с этим изучение фундаментальных аспектов взаимодействия ДНК с УНТ имеет особое значение.

Одним из методов изучения наноматериалов, позволяющих непосредственно наблюдать исследуемые объекты, является электронная микроскопия (ЭМ). В просвечивающем электронном микроскопе формируемое электронами, прошедшими сквозь образец, изображение позволяет оценить такие характеристики исследуемого объекта, как структурно-конформационное состояние на молекулярном уровне, формирование надмолекулярных комплексных систем, гетерогенность размеров, характер и особенности взаимодействия компонент комплекса в различных условиях. На рис. 1 показаны снимки УНТ и комплексов ДНК-УНТ.



а

Рис. 1. Изображения УНТ (*a*) и комплекса ДНК-УНТ (*б*), полученные с помощью просвечивающей электронной микроскопии.

б

Стрелками на рис. 1 (б) отмечены некоторые из участков обвертывания цепей ДНК вокруг УНТ. В рамках наблюдаемой модели комплексообразования (взаимодействия ДНК с УНТ) определяющая роль принадлежит *π*-стэкингу гетероциклических оснований ДНК с поверхностными ячейками кристаллической структуры УНТ.

Информативным методом исследования оказалась также атомно-силовая микроскопия (ACM). Данный метод обладает рядом преимуществ: неразрушающий характер исследований, высокое пространственное разрешение и возможность проведения экспериментов в жидких средах. Особенно перспективным оказалось применение ACM для изучения структуры и свойств наноструктурированных объектов, в частности рассматриваемых в данной работе комплексов ДНК-УНТ.

На рис. 2 приведены результаты ACM исследуемых образцов на слюде. По перепадам высот на рис. 2 (б) можно судить о характере взаимодействия цепи ДНК с УНТ.



Рис. 2. Изображения ДНК (*a*) и комплекса ДНК-УНТ (*б*), полученные с помощью атомносиловой микроскопии.

Наблюдаемые экспериментальные данные имеют прогностическое значение для понимания того, как именно осуществляется взаимодействие ДНК с УНТ. Существующие несколько моделей взаимодействия ДНК с УНТ [2], включая и иллюстрируемую нашими микроскопическими исследованиями, требуют дальнейшего экспериментального и теоретического изучения как самого процесса комплексообразования, так и влияния на него физико-химических факторов различной природы.

- [1] Довбешко Г. И. Конформационный анализ нуклеиновых кислот и белков при их адсорбции на углеродные одностенные нанотрубки./ Г. И. Довбешко, О. М. Фесенко, Е. Д. Образцова // ЖСХ. – 2009. – Т. 50, №5. – С. 991-998.
- [2] Гладченко Г. О., Карачевцев М. В., Адсорбция однонитевой и двунитевой ДНК на углеродные нанотрубки // Nanotechnologies. 2008. Т. 6, № 4, С. 1237—1245.

УДК 543.426 + 535.341.08 А. П. Войтович¹, В.С. Калинов¹, М.В. Коржик², Л.П. Рунец¹, А.П. Ступак¹

ПОВЕРХНОСТНЫЕ ДЕФЕКТЫ В КРИСТАЛЛАХ ФТОРИДА ЛИТИЯ

¹Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь runets@imaph.bas-net.by

²Научно-исследовательский институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220050 Минск, Беларусь <u>Mikhail.Korjik@cern.ch</u>

Процессы формирования, свойства и характеристики наноразмерных сред и структур, развитие нанотехнологий являются актуальными проблемами и широко изучаются в настоящее время. При создании наноразмерных сред и структур наряду с другими методами используется также радиационная модификация кристаллов и нанокристаллических структур. Радиационные дефекты в них образуются при облучении рентгеновскими или гамма квантами, а также электронами или ионами. Остаются невыясненными многие вопросы радиационного дефектообразования в нанокристаллах и приповерхностных слоях кристаллов: процессы агрегации дефектов, температурные диапазоны их устойчивости, возможности формирования типов дефектов, не наблюдаемых в объемных кристаллах. В данной работе приводятся результаты изучения этих вопросов дефектообразования в нанокристалла.

Кристаллические образцы для исследования приготавливались в виде пластинок размерами (0.7–1.5) х (5–7) х (7–10) мм³, вырезанных из номинально чистого монокристалла фторида лития вдоль плоскости {100}. Механическое дробление тех же кристаллов использовалось для получения нанокристаллов. Размеры нанокристаллов составляли сотни нанометров (d < 1 µm). Для удобства работы нанокристаллы прессовались в таблетки.

Дефекты создавались гамма квантами от источника ⁶⁰Со. Образцы облучались при температуре $T_{irr} = 77$ К жидкого азота (LNT) или при комнатной температуре (RT). В процессе облучения при RT формировались центры окраски (ЦО) различной сложности. Температура 77 К ниже температур подвижности анионных вакансий и дырочных V_k центров, так что эти дефекты оставались неподвижными во время облучения. Поэтому после окончания радиационного воздействия при $T_{irr} = 77$ К в образцах существовали следующие дефекты: междоузельные ионы (I) и атомы (H) фтора, анионные вакансии (v_a), V_k центры, одновакантные F и F⁻ центры (последний центр состоит из вакансии с двумя электронами). Поскольку применялись небольшие дозы радиации, то можно положить, что вероятность создания агрегатных ЦО во время облучения в результате бинарных и более высокого порядка процессов пренебрежимо мала.

После окончания облучения при LNT и извлечения образцов из азота их спектры фотолюминесценции (ФЛ) и оптической плотности измерялись при различных стабилизированных температурах отжига $T_{ann} > T_{v}$, где T_{v} – температура подвижности вакансий. Время, требуемое, чтобы перейти от температуры T_{irr} к температуре измерений T_{ann} , составляло примерно 1.5–2.0 мин, так что V_k центров и свободных электронов в

образце к началу измерений не существовало. Температуры измерений (отжига) изменялись в диапазоне 283–328 К.

Отжиг образцов приводил к образованию агрегатных центров окраски. При определенных температурах T_{ann} временные зависимости интенсивности фотолюминесценции (ФЛ) измерялись в течение нескольких часов для F_2^+ , F_2 и F_3^+ ЦО при длинах волн регистрации $\lambda_{det} = 890$, 680 и 530 нм и при длинах волн возбуждения ФЛ $\lambda_{exc} = 630$, 446 и 420 нм, соответственно. Длины волн возбуждения ФЛ выбирались таким образом, чтобы увеличить селективность возбуждения. Фотолюминесценция регистрировалась на длинах волн, обеспечивающих измерение излучения только одного выбранного типа центров.



Рис. 1. Спектры возбуждения люминесценции на длине волны λ_{det} = 680 нм для кристаллической пластинки (1), таблетки (2), поверхности кристаллической пластинки (3), облученных при T_{irr} = 77 K, а также для таблетки (4), облученной при комнатной температуре. Спектры зарегистрированы после завершения пострадиационных процессов агрегации ЦО.

В спектрах возбуждения ФЛ на длине волны $\lambda_{det} = 680$ нм в таблетках, облученных при LNT, наблюдаются четыре полосы (рис. 1, кривая 2). Одна из них с максимумом при $\lambda \approx 445$ нм принадлежит центрам F₂. Интенсивности трех других полос с максимумами при 393, 497 и 563 нм изменяются одинаковым образом при различных воздействиях на образцы, что позволяет заключить, что эти полосы принадлежат одному и тому же типу центров, формирующихся в нанокристаллах. Эти полосы полностью отсутствуют в спектрах кристаллических пластинок, облученных при LNT или RT. Они наблюдаются с небольшими интенсивностями в спектрах приповерхностного слоя пластинки при T_{irr} = 77 K (кривая 3) и, еще с меньшей интенсивностью, в таблетке, облученной при RT (кривая 4).

Почти все особенности агрегации ЦО в нанокристаллах и в приповерхностном слое кристаллов фторида лития совпадают. Такое совпадение позволяет сделать заключение, что наблюдаемые особенности агрегации ЦО в нанокристаллах обусловлены различием характеристик поверхности и объема кристалла.

УДК 531.19

Г. С. Бокун, В. С. Вихренко, Р. Н. Ласовский

ПОЛУЧЕНИЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ В РЕШЕТОЧНЫХ СИСТЕМАХ

Белорусский государственный технологический университет, ул. Свердлова, 13^a, 220006 Минск, Беларусь <u>gbokun@mail.ru</u>, <u>vvikhre@mail.ru</u>, <u>lasovsky@tut.by</u>

Известно, что при переходе от макроструктур к микроструктурам, размер которых определяется нанометровым масштабом, свойства вещества могут коренным образом изменяться. Так, например, отмечается сильная зависимость диффузионных характеристик от величины зерна в наноструктуре. В целом оказывается, что переход в наноструктурированное состояние определяет коренную перестройку материала не только в масштабном отношении, но и, прежде всего, в свойствах элементов, его образующих, характере их взаимодействия и т.д. [1]. При этом свойства наноструктур определяются не только размером кластеров, но и способами их организации и самоорганизации в нанокластерную структуру.

В данной работе с использованием основного кинетического уравнения сформулированы дифференциально-разностные уравнения эволюции поля концентрации. Для учета межчастичных корреляций используется квазихимическое приближения. Исследована возможность получения с помощью температурных и пространственных возмущений самоорганизованных структур в решеточных системах с различной глубиной потенциальных ям несущей подсистемы.

Эволюция поля концентраций ρ_i в системе исследовалась с помощью уравнения баланса числа частиц

$$\frac{d\rho_i}{dt} = -\sum_{j=1}^z I_{ij} , \qquad (1)$$

где средний поток числа частиц через границу ячеек i и j [2]

$$I_{ij} = w_0 \Big[\exp(\beta \mu_i) - \exp(\beta \mu_j) \Big] F(0_i, 0_j), \qquad (2)$$

где $\beta = 1/k_B T$ – обратная температура, k_B – постоянная Больцмана, T – температура системы, μ_i – химический потенциал в *i*-м узле.

Интенсивность термоактивированных перескоков частиц при предельно низких концентрациях определяется выражением

$$w_0 = v_0 \exp(-\beta u_0), \qquad (3)$$

где *u*₀ – разность энергий потенциального рельефа несущей системы в точке перевала между узлами и в узле решетки,

Для расчета корреляционных функций и химических потенциалов, т.е. замыкания выражения (1), применялось квазихимическое приближение для неравновесных состояний. Вероятность двум соседним узлам быть вакантными (корреляционная функция) определяется выражением

$$F(0_{i}, 0_{j}) = \rho_{0i}\rho_{0j} / K_{ij}, \qquad (4)$$

где ρ_{0i} – концентрация вакансий в *i*-м узле,

$$K_{ij} = \rho_{0j} + \rho_{1j} / \eta_{ij}, \qquad (5)$$

 ρ_{1i} – концентрация частиц в *i*-м узле, а η_{ij} определяется как положительный корень квадратного уравнения:

$$\eta_{ij}^{2} + \eta_{ij} \frac{\rho_{1j} - \rho_{0i} - W(\rho_{1i} - \rho_{1j})}{\rho_{0i}} - \frac{W_{i}\rho_{1j}}{\rho_{0i}} = 0, \qquad (6)$$

где $W_i = \exp(-\beta J_{ij})$, J_{ij} – энергия взаимодействия частиц, расположенных в узлах *i* и *j*. Химический потенциал в произвольном узле *i* определяется выражением:

$$\exp(\beta\mu_i) = \frac{\rho_{1i}}{\rho_{0_i}} / \prod_{j \neq i}^Z \eta_{ji} .$$
⁽⁷⁾

Система уравнений (1)–(7) решалась численно при одно- или двухмерном нарушении симметрии системы в начальный момент времени. Исследовалась эволюция поля концентрации решеточной системы с притяжением ближайших соседей при условии, что в начальный момент концентрация частиц во всей системе была постоянной и соответствовала метастабильному состоянию (значение концентрации находилось между равновесными значениями, соответствующими конденсированной и разреженной фазам). При равномерном распределении концентрации потоки числа частиц (2) через границы любых ячеек системы оказываются равными нулю. Поэтому инициация эволюционного процесса обеспечивалась неоднородностями начального распределения плотности, температурным или энергетическим возмущением.

Показано, что нарушение симметрии системы посредством отклонения концентрации частиц от однородного распределения инициирует волнообразное распространение по системе неоднородностей, имеющих квазипериодический характер, так что в результате в системе устанавливается квазипериодическое распределение концентрации интеркалированных частиц. Отмечено, что при инициализации фазового расслоения системы, как посредством локального температурного возмущения, так и изменением взаимодействия между частицами интеркалянта процесс наноструктуризации протекает аналогично таковому при начальной концентрационной неоднородности.

По результатам анализа полученных решений можно сделать вывод, что в результате эволюции система переходит в новое, тоже метастабильное, состояние, характеризующееся наличием квазипериодического наноразмерного распределения концентрации, причем это распределение является достаточно устойчивым по отношению к возможным не очень сильным возмущениям.

- [1] Колобова, Ю. Р. Зернограничная диффузия и свойства наноструктурных материалов / Ю. Р. Колобова, Р. З. Валиева // Новосибирск: Наука, 2000.– 231 с.
- [2] Lasovsky, R. N. Phase transition kinetics in lattice models of intercalation compounds / R. N. Lasovsky, G. S. Bokun, V. S. Vikhrenko // Solid State Ionics. – 2011. – Vol. 188. – P.15.

УДК 535.34; 539.2

В.В. Ковгар¹, Г.Е. Малашкевич¹, И.А. Ходасевич¹, Е.В. Пестряков²

АНТИСТОКСОВА ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ Yb-, Yb–Ho- И Yb–Eu-СОДЕРЖАЩИХ КРЕМНЕЗЁМНЫХ КОМПОЗИТОВ

¹ Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>vikusha-kovgar@mail.ru</u>

² Институт лазерной физики СО РАН, пр. Лаврентьева, 13/3, 630090, Новосибирск, Россия

Ранее нами в работах [1, 2] с помощью спектрально-люминесцентного анализа Yb–Er-содержащих материалов было доказано формирование в них наночастиц Yb₂O₃, в которых часть ионов иттербия замещалась ионами эрбия. Механизм передачи возбуждения от ионов Yb³⁺ к ионам Er^{3+} осуществлялся как ступенчатым, так и прямым бузызлучательным переносом с виртуального возбуждённого уровня пары Yb–Yb. При этом высокая массовая доля подобных наночастиц позволила отнести синтезированные материалы к стеклокерамике. Полученные материалы могут быть использованы в качестве активных элементов лазеров либо усилителей, функционирующих в полосе антистоксовой люминесценции, и визуализаторов излучения ближнего ИК-диапазона.

Целью настоящей работы был синтез высоколегированного Yb, Yb–Eu и Yb–Ho прозрачного кремнезёмного композита, изучение его структуры и спектральнолюминесцентных свойств в антистоксовой области.

полученных Фазовый анализ образцов контролировался с помощью рентгеновского дифрактометра D8 Advance с использованием СиКа излучения $(\lambda = 1.54184 \text{ Å}).$ Микроструктура исследовалась сканирующим электронным микроскопом LEO-1420REM. Спектры люминесценции регистрировались на спектрометре S100 (Солар ЛС) при возбуждении непрерывным излучением полупроводникового лазера ML-151 ($\lambda \approx 970$ нм).

Опытные образцы с суммарной концентрацией редкоземельных оксидов до 15 масс. % (по синтезу) были получены прямым золь-гель методом. С помощью микроскопического и рентгенографического исследований обнаружить наличие в них кристаллической фазы (наночастиц Yb_2O_3 и Yb_2O_3 :Ln) не удалось. Этот факт позволяет сделать вывод о том, что в случае формирования в синтезированных материалах указанных наночастиц их размеры меньше разрешающей способности используемого оборудования (менее 10 нм).

На рисунке приведены спектры антистоксовой люминесценции полученных материалов в видимой области. Видно, что спектр люминесценции Yb-содержащих характеризуется интенсивной образцов (кривая 1) полосой кооперативной люминесценции ($\lambda \approx 500$ нм) ионов Yb³⁺. Спектр Yb–Ho-содержащих образцов (кривая 2) подобен кривой 1. Тем не менее, разность спектров Yb-Ho-и Yb-содержащих 3) показывает наличие слабой полосы при λ≈ 480 нм, образцов (кривая ${}^{5}F_{3} \rightarrow {}^{5}I_{8}$ ионов Ho^{3+} . Слабая соответствующей переходу интенсивность люминесценции ионов Ho^{3+} позволяет предположить, что они в отличие от ионов Er^{3+} при синтезе не входят в наночастицы Yb2O3, по-видимому, из-за относительно

большого различия в ионных радиусах иттербия и гольмия. Для Yb–Eu-содержащих образцов в спектре люминесценции (кривая 4) кроме кооперативной люминесценции ионов Yb³⁺, также наблюдаются переходы ${}^{5}D_{2} \rightarrow {}^{7}F_{0}$ ($\lambda = 458$ нм), ${}^{5}D_{1} \rightarrow {}^{7}F_{0}$ ($\lambda = 536$ нм), ${}^{5}D_{1} \rightarrow {}^{7}F_{3}$ ($\lambda = 587$ нм) и ${}^{5}D_{2} \rightarrow {}^{7}F_{2}$ ($\lambda = 614$ нм) ионов Eu³⁺. Данный факт свидетельствует о вхождении ионов Eu³⁺ в наночастицы Yb₂O₃. При этом приблизительно одинаковую интенсивность антистоксовой люминесценции ионов Eu³⁺ и пары Yb–Yb, в отличие от упомянутых Yb–Er-содержащих образцов, где интенсивность люминесценции ионов Eu³⁺ многократно превосходит интенсивность люминесценции ионов Eu³⁺.



 $\lambda_{603\tilde{0}} \approx 970$ нм

Рис. Спектры люминесценции Yb- (1), Yb-Ho-(2) и Yb-Eu-(4) содержащие стеклокерамические образцы, разность спектров (3) Yb-Ho-и Yb-содержащих образцов

- Kouhar V. Anti-Stokes luminescence of SiO₂-(Er_xYb_{1-x})₂O₃ glass nanoceramics / V.Kouhar, G.Malashkevich, I.Khodasevich, A.Sukhodola, E.Pestryakov // Book of abstract of 8th International conference on *f*-elements, (Udine, Italy. 26-31August, 2012). – Udine, 2012. – OPT 34P.
- [2] Ковгар В.В. Антистоксова люминесценция плёнок системы SiO₂-(Yb_{1-x}Er_x)₂O₃ / В.В. Ковгар, Г.Е. Малашкевич, И.А. Ходасевич, А.А. Суходола // Лазерная физика и оптические технологии: материалы IX междун. науч. конф. (Гродно, 30 мая 2 июня 2012 года). В 2 ч. Гродно:ГрГУ, 2012. Ч.1. С. 164–168.

УДК 543.426 + 535.341.08

А. П. Войтович¹, В.С. Калинов¹, Е.Ф. Мартынович², Л.П. Рунец¹, А.П. Ступак¹

ИЗОМЕРИЯ ТОЧЕЧНЫХ ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛАХ ФТОРИДА ЛИТИЯ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь kalinov@imaph.bas-net.by

² Иркутский филиал Института лазерной физики СО РАН, ул. Лермонтова, 130а, 664033 Иркутск, Россия femto@bk.ru

Изомерия молекул, как структурная, так и конфигурационная, – широко распространенное явление. Чем больше атомов содержится в молекуле, тем более вероятно наличие изомеров. При определенных соотношениях между разностью минимумов свободных энергий изомеров и высоты ΔG барьера, разделяющего их равновесные состояния (состояния, отвечающие минимумам свободной энергии G), с одной стороны, и величиной тепловой энергии kT, с другой стороны, изомеры могут регистрироваться экспериментально и переходить друг в друга. Дефекты, содержащие три и более вакансии, могут различаться своей структурой. В щелочно-галоидных кристаллах для каждого из собственных радиационных дефектов (центров окраски) F₃ или F₄, состоящих, соответственно, из трех или четырех анионных вакансий, захвативших три или четыре электрона, в работе [1] указаны по две возможные пространственные модели.

В данной работе экспериментально исследуются центры окраски (ЦО) F_3 в кристаллах и нанокристаллах фторида лития. Для этих ЦО ранее найдены две полосы поглощения R_1 и R_2 . Они приписываются модификации центров, у которой вакансии расположены в вершинах равностороннего треугольника в плоскости {111} [1]. Наличие двух полос связывается с переходами из основного уровня на два различных возбужденных уровня. Проведенные нами эксперименты показывают, что центры $F_3(R_1)$ и $F_3(R_2)$, характеризуемые указанными полосами поглощения и фотолюминесценции (ФЛ), являются различными структурными модификациями, т.е. фактически конформационными изомерами. Нами обнаружена третья структурная модификация (третий изомер) центров F_3 , обозначаемая в дальнейшем, как $F_3(R_3)$. Изучаются трансформация изомеров $F_3(R_3)$ в изомеры $F_3(R_1)$ при световом воздействии на кристалл и восстановление их равновесных концентраций после прекращения воздействия. Определяется высота энергетического барьера, разделяющего равновесные состояния изомеров $F_3(R_1)$ и $F_3(R_3)$ и вклад энтропии в высоту барьера.

В кристаллах LiF, облученных гамма квантами, концентрации центров F₃ малы, что затрудняет изучение их преобразований. Для увеличения концентраций облученные гамма квантами образцы подвергались воздействию ультрафиолетовой радиации с длинами волн около 250 нм.

Воздействие на образец интенсивным излучением с длиной волны $\lambda = 350$ нм (а также с другой длиной волны в пределах полосы поглощения центров F₃(R₃)) приводит к увеличению свечения (концентрации) центров F₃(R₁) и к уменьшению свечения (концентрации) центров F₃(R₁). Один из примеров таких изменений ФЛ представлен на

рис. 1, а. Данные рис. 1, а получены при возбуждении ФЛ тем же излучением, которое влияло на концентрации центров. Проведенные эксперименты показывают также, что и прирост, и падение концентраций увеличиваются с ростом интенсивности воздействующего излучения. После прекращения воздействия интенсивным излучением концентрации дефектов $F_3(R_1)$ и $F_3(R_3)$ стремятся к значениям, имевшим место до воздействия. Это демонстрируется данными рис. 1, б, где приведена измеренная кинетика восстановления интенсивностей ФЛ (концентраций) центров $F_3(R_1)$ и $F_3(R_3)$. Используя данные, подобные показанным на рис. 2, определена величина энергетического барьера, разделяющего равновесные состояния изомеров, и вклад энтропии в этот барьер.



Рис. 1. Кинетика ФЛ центров F₃(R₁) (1) и F₃(R₃) (2) во время воздействия на кристалл интенсивным излучением с длиной волны λ = 350 нм (а) и после прекращения воздействия (б); б – точки – результаты измерений, сплошные кривые – аппроксимация результатов экспоненциальными зависимостями. Измерения выполнены при температуре T = 283 K.

Измерения люминесценции центров $F_3(R_2)$ показали, что их концентрация не изменяется ни при воздействии на образец интенсивного излучения, ни после прекращения такого воздействия. Таким образом, дефекты $F_3(R_1)$ и $F_3(R_2)$ в действительности являются различными структурными образованиями.

В кристаллах и нанокристаллах фторида лития, облученных гамма квантами, имеются три изомера дефектов F₃. Для определения конфигураций этих изомеров, необходимы дополнительные исследования, включая расчеты минимумов потенциальных энергий изомеров. Можно с большой степенью вероятности предполагать, что дефекты F₄ также могут иметь различные конфигурации. Наличие изомеров изменяет характеристики кристаллов. Это обстоятельство, также как и имеющие место процессы изомеризации дефектов должны учитываться при применениях кристаллов.

[1] F. Agullo-Lopez, C.R.A. Catlow and P.D. Townsend, Point Defects in Materials, Academic Press, London, 1988, 444 p.

УДК 535.37

А. П. Войтович, В. С. Калинов, А. Н. Новиков, Л. П. Рунец, А. П. Ступак

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ПОВЕРХНОСТНЫХ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ ВО ФТОРИДЕ ЛИТИЯ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь voitovich@imaph.bas-net.by

В работах [1, 2] сообщено о поверхностных радиационных центрах окраски (ЦО) в кристаллах фторида лития, обладающих характеристиками, которые не наблюдаются у дефектов в объеме кристалла. Для выяснения типа обнаруженных дефектов необходимо исследовать их свойства. В данной работе излагаются данные по спектрам фотолюминесценции и ее возбуждения, их изменениям при различных воздействиях на нанокристаллы, поляризации и временам затухания фотолюминесценции (ФЛ), полученные для поверхностных дефектов (ПД).

Исследовались образцы из фторида лития в виде нанокристаллов размерами менее 1 мкм и таблеток, спрессованных из нанокристаллов. Радиационные дефекты создавались гамма квантами от источника ⁶⁰Со, облучение образцов проводилось при температуре жидкого азота ($T_{oбл} = 77$ K). После окончания облучения образцы извлекались из жидкого азота и отжигались не менее суток при комнатной температуре (T = 293 K). Во время отжига формировались агрегатные ЦО. Процессы и кинетика их формирования подробно рассмотрены в [1, 2].

Спектры ФЛ и ее возбуждения регистрировались на спектрофлуориметре SFL-1211 A (SOLAR, Belarus) при температурах 293 и 77 К. Во всех случаях интенсивности ФЛ были пропорциональны концентрациям соответствующих ЦО. Поляризационные измерения с использованием призм Глана в качестве поляризаторов также выполнялись на том же спектрофлуориметре. Определялась степень поляризации $P = (I_{\parallel} - I_{\perp})/(I_{\parallel} + I_{\perp})$ ФЛ, где I_{\parallel} и I_{\perp} – интенсивности ФЛ с поляризацией соответственно параллельной и перпендикулярной поляризации возбуждающего излучения. Кинетика затухания ФЛ измерялась методом коррелированного по времени счета фотонов. При этом ФЛ возбуждалась импульсами излучения светодиодов. По кривым затухания находились времена жизни ФЛ.

Для нанокристаллов LiF, облученных при температуре $T_{06\pi} = 77$ K и затем отожженных при температурах, близких к комнатной, спектр возбуждения ФЛ на длине волны регистрации $\lambda_{per} = 670$ нм содержит в видимой области четыре полосы [1]. Чтобы определить корреляцию изменений интенсивностей этих полос при воздействиях на нанокристаллы, спектры возбуждения регистрировались после дополнительного облучения таблеток различными дозами ультрафиолетовой (УФ) радиации ($\lambda = 260$ нм). УФ радиация уменьшает интенсивности всех полос спектра и, следовательно, концентрации соответствующих ЦО (рис. 1). Нормировка полученных спектров к их максимальным значениям показывает, что полосы с максимумами при длинах волн 564, 493 и 393 нм, принадлежащие поверхностным дефектам, изменяются одинаковым образом при изменении дозы УФ облучения. Это обстоятельство указывает на их принадлежность одному и тому же типу дефектов. Полоса с максимумом при 445 нм обусловлена наличием в образце F_2 -центров и при облучении нанокристаллов УФ радиацией ее интенсивность падает на относительно большую величину, чем интенсивности полос ПД.



Рис. 1. Спектры возбуждения ФЛ таблетки из нанокристаллов LiF (длина волны регистрации $\lambda_{per} = 670$ нм): при различных дозах облучения образца УФ радиацией, стрелка указывает направление увеличения дозы (а); те же, что и в (а), но нормированные к своим максимальным интенсивностям (б)

Люминесцентные характеристики поверхностных радиационных дефектов во фториде лития: спектры люминесценции и возбуждения люминесценции, константа затухания люминесценции – отличаются от характеристик ранее известных радиационных дефектов в этом кристалле. Это свидетельствует о своеобразии электронной структуры и строения ПД. Результаты измерений степени поляризации. ФЛ показывают, что поверхностный дефект содержит более двух анионных вакансий. Для получения более обширных сведений о строении и конфигурации ПД необходимы дальнейшие исследования.

Спектры возбуждения ФЛ F_2 -центров и ПД при одной и той же длине волны регистрации, близкой к длинам волн максимумов полос ФЛ обоих типов дефектов, демонстрируют примерно одинаковую интенсивность. Квантовый выход ФЛ F_2 -центров близок к единице [3]. Нет оснований считать значительно различающимися силы осцилляторов поглощения F_2 -центров и поверхностных ЦО. Отсюда следует, что концентрации обоих типов ЦО в нанокристаллах примерно одинаковы.

Концентрация радиационных дефектов, образующихся на поверхности фторида лития, не изменялась в течение двух лет наблюдений при комнатной температуре. Нагревание нанокристаллов при T = 373 К в течение 5 мин также не приводило к уменьшению концентрации. Для установления пределов температурной стабильности обнаруженных дефектов необходимы дополнительные эксперименты.

- Voitovich A.P. The aggregation and characteristics of radiation induced defects in lithium fluoride nanocrystals. / A.P. Voitovich, V.S. Kalinov, M. V. Korzhik, E.F. Martynovich, A.P. Stupak, L.P. Runets // Radiation effects and defects in solids. – 2013. – V. 168. – P. 136.
- [2] Voitovich A.P. Ionizing Radiation: Applications, Sources and Biological Effects. Ed. by Belotserkovsky E., Ostaltsov Z. New York: Nova Science Publishers, 2012. P. 59.

УДК 544.032.65 :539.213 :544.015.4 :546.681

С. В. Лотарев¹, А. С. Липатьев¹, Н. В. Голубев¹, Е. С. Игнатьева¹, Г. Е. Малашкевич^{2,1}, А. В. Мудрый³, Ю. С. Присеко⁴, Р. Лоренци⁵, А. Палеари^{1,5}, В. Н. Сигаев¹

НАНОСТРУКТУРЫ С ШИРОКОПОЛОСНОЙ ИК ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЕЙ, СФОРМИРОВАННЫЕ ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

¹ Международная лаборатория функциональных материалов на основе стекла, Российский химико-технологический университет им. Д.И Менделеева, Миусская пл, 9, 125047 Москва, Россия <u>sergey_lot@mail.ru</u> ² Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>g.malashkevich@ifanbel.bas-net.by</u> ³ Научно-практический центр по материаловедению НАН Беларуси; ул. П.Бровки, 19, 220072 Минск, Беларусь

⁴ ООО «Научно-производственное предприятие «ВЭЛИТ», ул. Заводская, 5, 143500 г. Истра, Московская область, Россия ⁵ Университет Милана-Бикокка, Viale dell'Innovazione 10, строение U9, IT-20126 Милан, Италия

Прогресс в микроэлектронике и лазерных технологиях в последние два десятилетия вызвал активное развитие интегральной оптики, которое потребовало создания адекватной элементной и материаловедческой базы. В рамках решения этой задачи все большее развитие получают методы локального модифицирования стекол лазерным излучением, включая локальную кристаллизацию стекол с выделением активных кристаллических фаз, обладающих высокой оптической нелинейностью и электрооптическим коэффициентом. В последнее время начали появляться и работы, посвященные возникновению или усилению люминесцентной активности в результате лазерной обработки. В частности, в силикатном стекле, допированном ионами Er^{3+} и Ni²⁺, с помощью фемтосекундного лазера в заданных участках удалось одновременно выделить нанокристаллы LaF₃ и Ga₂O₃, в которые мигрировали, соответственно, ионы Er^{3+} и Ni²⁺, инициировав люминесценцию в ближней ИК области [1].

Хорошо известный эффект возникновения широкополосной люминесценции ионов Ni²⁺ в ближней ИК области при их переходе из стекла в сформированные термообработкой нанокристаллы со структурой шпинели на основе галлатных фаз (Ga₂O₃ или LiGa₅O₈) недавно был продемонстрирован и для германосиликатных стекол [2]. Благодаря удачному выбору стеклообразующей системы и оптимизации состава для этих стекол удалось снизить температуру варки до 1480°С (не менее, чем на 100°С относительно чисто силикатных стекол). В настоящей работе для стекла состава 7,5Li₂O–2,5Na₂O–20Ga₂O₃–35GeO₂–35SiO₂, предложенного в [2], при добавлении 0,1–0,5 мол. % NiO показана возможность локальной нанокристаллизации состоя в стекле, не обладающем люминесценцией в ИК области в однородном состоянии.

В качестве источника излучения использовался импульсный лазер на парах меди (ЛПМ), генерирующий линии при $\lambda = 510,6$ и 578,2 нм, которые хорошо поглощаются

ионами Ni²⁺ в исследуемом стекле. В результате облучения образцов стекла при температурах, несколько ниже температуры стеклования (Tg = 570°C), облученные участки изменили цвет с оранжевого на зелено-голубой. При этом в них стало возможно возбудить широкополосную (Δλ ~ 300 нм) ИК люминесценцию с максимумом при λ ≈ 1300–1450 нм (рис. 1). Рентгенофазовый анализ показал наличие в облученных участках наноразмерных кристаллов Ga₂O₃, появление которых, однако, не ухудшило прозрачности стекла. Хорошее согласование оптических и рентгеновских данных с опубликованными в [2] позволяет сделать вывод о том, что в облучаемой лазером области стекла протекают те же процессы наноструктурирования, что и при термообработке в печи. За счет удачного сочетания характера изменения спектров поглощения исследуемых стекол при наноструктурировании и длин волн генерации ЛПМ реализуется механизм самоограничения нагрева, который позволяет варьировать скорость сканирования пучком в широких пределах (рис. 1) и получать наноструктуры, сохраняя прозрачность стекла. Увеличение показателя преломления в облученной 0,006-0,008 (при $\lambda = 633$ нм) области на даёт возможность использовать стекле сформированный В наноструктурированный канал В качестве люминесцирующего волновода. Полученные таким образом волноводы представляют существенный интерес для разработки активных элементов интегральной оптики.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ (грант 11.G34.31.0027) и РФФИ (гранты №12-03-31490, 12-03-90009 и 13-03-01018).



Рис. 1. Слева: образец стекла с 0,3 мол.% NiO, облученный ЛПМ при скоростях сканирования пучком: 1 – 25 мкм/с, 2 – 50 мкм/с, 3 – 100 мкм/с, 4 – 200 мкм/с. Справа: спектры люминесценции того же стекла: 1 – необлученный участок (λ_{возб} = 405 нм); облученный участок

- при возбуждении: 2 532 нм, 3 405 нм, 4 457 нм.
- Simultaneous tailoring of the phase evolution and dopant distribution in glassy phase for controllable luminescence / S. Zhou [et al.] // J. Am. Chem. Soc. – 2010. – V. 132. – P. 17945.
- [2] Активированные никелем галлийсодержащие стекла, люминесцирующие в ближнем ИК-диапазоне спектра / Н. В. Голубев [и др.] // Физика и химия стекла. – 2010. – Т. 36. – С. 835.

УДК 535.3

В. К. Пустовалов¹, Л. Г. Астафьева², В. Фритче³

ОПТИМАЛЬНЫЙ ТЕРМО-ОПТИЧЕСКИЙ ПАРАМЕТР НАНОЧАСТИЦ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ОПТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

¹ Белорусский национальный технический университет, пр. Независимости, 65, 220013 Минск, Беларусь

pustovalovv@mail.ru

² Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

³Institute of Photonic Technology, Jena, A. Einstein Str., 9, 07745 Jena, Germany <u>fritzsche@ipht-jena.de</u>

В последнее десятилетие вопросы взаимодействия лазерного излучения с наночастицами, поглощение и рассеяние оптической энергии наночастицами, превращение световой энергии в тепловую, вытекающие отсюда тепловые и связанные с ними явления привлекают внимание в связи с развитием фототермической нанотехнологии и наноэнергетики [1-5]. Этот интерес вызван применением наночастиц во многих областях, таких как превращение световой энергии в тепловую [1], солнечных батареях [2], катализе [3], лазерной нанобиомедицине [4,5]. Эти технологии основаны на использовании поверхностного плазмонного резонанса в наночастицах, а также того факта, что наночастицы хорошо поглощают падающее излучение на резонансной длине волны.

Поскольку эффективность превращения световой энергии в тепловую, применение наночастиц для нано энергетики и фото-тепловых технологий зависит от теплофизических свойств наночастицы и характеристик излучения, в работе проведено определение оптимальных значений термо-оптических параметров, описывающих эффективность превращения световой энергии в тепловую в наночастицах золота и серебра, для достижения максимальной температуры нагрева при оптическом облучении. Было установлено, что максимальная температура нагрева наночастиц может быть достигнута при использовании оптимального значения термо-оптического параметра с учетом длительности облучения. При этом фактор эффективности поглощения наночастицы может быть меньше, чем его максимальное значение.



Ри. 1. Зависимости термо-оптического parameter $\Delta T_0/E_0$ (линии 1-3 относятся к левой оси) и фактор эффективности поглощения K_{abs} (линии 4 refer относятся к правой оси) для наночастиц золота и длительности импульса $t_P = 1 \cdot 10^{-8}$ (1), $1 \cdot 10^{-10}$ (2), $1 \cdot 10^{-12}$ (3) s от радиуса r_0 для $\lambda = 532$ nm. Вертикальные линии обозначают расположение максимальных значений $\Delta T_0/E_0$ и K_{abs} на оси r_0 .

Исследования частично финансировались грантом № Ф12В-005 Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований.

- Zeng N. Heat generation by optically and thermally interacting aggregates of gold nanoparticles under illumination / N. Zeng, A. B. Murphy // Nanotechnology.- 2009.-V. 20.- P. 375702.
- [2] Paris A. Plasmonic scattering by metal nanoparticles for solar cells / A. Paris, A. Vaccari, A. Lesina, E. Serra, L. Calliari // Plasmonics. 2012. V. 7. P. 525.
- [3] Narayanan R. Some aspects of colloidal nanoparticle stability, catalic activity, and recycling potential / R. Narayanan, M.A. El-Sayed // Topics in Catalysis. 2008. V. 47. P. 15.
- [4] Pustovalov V. K. Thermo-optical analysis and selection of the properties of absorbing nanoparticles for laser applications in cancer nanotechnology / V.K. Pustovalov, L.G. Astafyeva, V.P. Zharov, E. Galanzha // Cancer Nanotechn. – 2010. – V. 1. – P. 35.
- [5] Chen A. Platinum-based nanostructured materials: synthesis, properties and applications / A. Chen, P. Holt-Hindle // Chem. Rev. – 2010. – V. 110. – P. 3767.

УДК 621.373.826

А.В. Науменко, Н.А. Лойко, В.В. Кабанов

СВОЙСТВА ПОВЕРХНОСТНЫХ ПЛАЗМОН-ПОЛЯРИТОННЫХ МОД МИКРОДИСКОВЫХ РЕЗОНАТОРОВ

Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>anaum@dragon.bas-net.by</u>

В последние годы большое внимание привлекли субволновые оптические резонаторы высокой добротности из-за потенциальных возможностей их применения в качестве компонентов интегральных оптоэлектронных схем. Ограничение на минимальный размер резонатора порядка длины волны, определяемое оптическим дифракционным пределом, можно преодолеть путём создания гибридных структур, поддерживающих распространение поверхностных плазмонных поляритонов (ППП) с локализацией оптических полей вблизи интерфейса металл-полупроводник [1]. В частности, включение металлических интерфейсов в микродисковые резонаторы (МДР) было предложено для достижения высокой добротности и генерации ППП мод шепчущей галереи (МШГ) [2]. С целью оптимизации характеристик таких устройств и более глубокого понимания происходящих в них процессов нами проведено теоретическое исследование МДР с металлическим покрытием и свойств их собственных мод в широком диапазоне структурных параметров. Кроме того, выполнен анализ модуляционного отклика данных МДР на инжекционный сигнал оптической частоты, приводящий к возбуждению вынужденных ППП-МШГ. Вынужденные моды рассмотрены как для случая линейной среды резонатора, так и при наличии оптической нелинейности (мгновенная нелинейность Керра).

Наши исследования основаны на численном эксперименте, а также на аналитическом рассмотрении. Численное решение уравнений Максвелла выполнено методом конечных разностей в 3D пространстве [3]. Для аналитического рассмотрения использовалось приближение эффективного показателя преломления n_{ef}, при котором в качестве n_{ef} для расчёта дисперсионных соотношений бесселевых МШГ традиционного 2D МДР брался показатель преломления, определяющий распространение ППП в плоскости интерфейса металл-полупроводник. Чтобы учесть влияние конечной толщины металлического слоя, использовался эффективный показатель ППП многослойной структуры. Проанализирован модовый состав МДР с дисковым или кольцевым металлическим покрытием. Определены добротности мод (как общая, так и связанная только радиационными потерями или потерями на поглощение в металле), их частоты, пространственно-временные профили, степень локализации и пороговые усиления активного слоя. Найдена зависимость этих характеристик от азимутального (и радиального) индекса моды, частоты плазмонов и геометрических размеров резонатора. При исследовании модуляционного отклика, инжекционный сигнал моделировался источником гармонического тока оптической частоты. Были определены резонансные кривые: амплитуда вынужденных ППП-МШГ и их пространственные профили в зависимости от частоты (и амплитуды в случае нелинейной среды) инжекционного сигнала.

Показано, что частоты плазмон-поляритонных мод v_m резонатора (которые, по сути, гибридные ППП-МШГ / моды Бесселя) монотонно возрастают и стремятся к бездисперсионной частоте поверхностных плазмонов, когда азимутальный индекс моды m увеличивается. Радиационная добротность O_r также увеличивается, асимптотически приближаясь к экспоненциальной зависимости от т. При малом значении т Q_r фундаментальной радиальной бесселевой моды (моды с наименьшим радиальным индексом l и vm) может быть ниже, чем для моды с большим l (с более высокой v_m). С увеличением т Q_r моды с меньшим радиальным индексом становится выше, чем для всех других мод с более высоким значением 1. Таким образом, использование кольцевого металлического покрытия вместо дискового может быть полезно для подавления мод с большим 1 в случае низкого фиксированного значения т и, следовательно, для селекции фундаментальной радиальной моды. При этом может наблюдаться некоторый рост Q_r основной моды благодаря волноводным свойствам кольцевой геометрии. Установлено, что из-за конкуренции Q_r и потерь на поглощение в металле, зависимость полной добротности Q_t от m может содержать максимум, что дает дополнительные возможности для селекции и генерации моды с конкретным довольно низким значением m. Когда плазменная частота металла v_p увеличивается, частота ППП мод монотонно возрастает, стремясь к частоте традиционного МДР с двойной толщиной и без металлического покрытия. При этом Q_r монотонно уменьшается до соответствующего эквивалентному микродиску. Если значения, ввести металла пропорциональную зависимость поглощения И v_p, означающую масштабирование решения в координатах модовая частота - геометрические размеры резонатора, то зависимость Qt от vp может содержать максимум при низких плазменных частотах. При увеличении v_p Q_t уменьшается до некоторого постоянного значения.

Для традиционных 2D МДР, эффективный радиус вынужденных МШГ зависит от модуляции относительно отстройки частоты v_{m} (радиус уменьшается при максимальный положительных отстройках). В случае нелинейной среды, модуляционный отклик (резонанс) смещён в красную сторону. При синей отстройке, нелинейность приводит к дополнительному уменьшению эффективного радиуса и сокращению объема моды. Красное смещение резонанса вынужденных ППП-МШГ изза нелинейности также наблюдается как в МДР с металлическим покрытием, так и в МДР с металлическим диском в центре. В последнем случае амплитуда резонансных колебаний может увеличиться по сравнению с линейным МДР из-за сокращения объёма моды, которое приводит к увеличению Q_r. Для синих отстроек, вынужденные ППП-МШГ трансформируются в вынужденные МШГ с максимумом поля вдали от интерфейса металл-полупроводник. Эффективный радиус вынужденных ППП-МШГ в МЛР с металлическим покрытием также уменьшается/увеличивается лля отрицательных/положительных отстроек.

[1] W.L. Barnes, A. Dereux, T.W. Ebbesen, Nature (London), 424 (2003) 824; B.K. Min, et al, Nature (London), 457 (2009) 455; M.T. Hill, et al, Nat. Photonics, 1 (2007) 589.
[2] R. Perahia, et al, Appl Phys Letters, 95 (2009) 201114; M.W. Kim, et al, Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, 15 (2009) 4452.
[3] http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Meep

УДК 535.34

А. Д. Замковец, А.Н. Понявина, Е. Е. Целеш

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛАНАРНЫХ ПЛОТНОУПАКОВАННЫХ ПЛАЗМОННЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>a.zamkovets@dragon.bas-net.by</u>

Нанокомпозитные среды имеют важное значение для создания материалов с новыми свойствами. При анализе оптических свойств ультрадисперсной системы часто используют приближение эффективной среды. Наиболее известны теории Максвелла Гарнетта (МГ) и Браггемана, каждая из которых имеет свою область применимости. Попытка объединить преимущества теорий МГ и Браггемана была сделана Шенгом в [1]. Недавно для расчета эффективных оптических характеристик нанокомпозитов с произвольным соотношением объемной концентрации компонентов предложена комбинированная модель эффективной среды (КМЭС) [2]. КМЭС, как и модель Шенга, основана на вероятностном подходе к описанию структуры нанокомпозита, что применимость в области инверсии матрицы, при сравнимых определяет ее концентрациях входящих В композит материалов. В настоящей работе комбинированная модель применена для анализа оптических характеристик полученных термическим осаждением в вакууме плотноупакованных плазмонных нанокомпозитов.

С использованием приближения МГ и КМЭС проведены расчеты действительной и мнимой частей комплексного эффективного показателя преломления нанокомпозитов Ag/LiF и Ag/KCl с различным объемным содержанием металла. Расчеты проводились для спектрального диапазона 300-800 нм. Они показали, что для относительно невысоких значений р (р= 0,1-0,4) результаты по обеим формулам практически совпадают. В области спектра 450-550 нм имеется полоса ППРП. С увеличением р эта полоса сдвигается в длинноволновую область спектра. При этом, согласно приближению МГ, повышение о приводит к усилению поглощения в этой полосе, в то время как расчеты в рамках КМЭС демонстрируют ее ослабление и появление слабой дополнительной полосы поглощения в коротковолновой области спектра – на длинах волн ~ 330 – 350 нм. Данным коротковолновым резонансам соответствует условие $2\varepsilon_1$ = *-ɛ*₂ и они связаны с возникновением поверхностных мод на диэлектрических нанопорах (диэлектрических включениях) в металле [3]. В модели МГ это обстоятельство не учитывается, вследствие чего количественные значения neff и keff для композитов с высокими значениями ρ (ρ > 0,4), рассчитанные по формуле МГ, являются некорректными.

Изготовленные термическим осаждением композиты представляли собой слоистую периодическую среду, в которой островковые пленки Ag разделены тонкими прослойками LiF или KCl. Объемное содержание металла в композитах Ag/LiF составляло 62 и 80%, а в Ag/KCl – 40, 62 и 67%. На рисунке 1 приведены рассчитанные (а) и измеренные (б) оптические плотности композита Ag/LiF, содержащего 62% Ag.



Средние размеры частиц Ag составляли 3-5 нм, поверхностная плотность металла ~ 1,4·10⁻⁶ г·см⁻². Видно, что при расчетах по комбинированной модели достигается

Ри. 1 Оптическая плотность рассчитанного (а) и изготовленного (б) композита (Ag/LiF)⁴: эффективная толщина композита 10 нм, объемное содержание металла 62 %.

достаточно хорошее соответствие с экспериментом. Это касается как количественных значений оптической плотности в максимуме полосы ППРП, так и полуширины этой полосы (с учетом влияния подложки). Подобный результат получен и для композита Ag/LiF с содержанием Ag 80%. Некоторые различия в спектральном положении максимумов полос ППРП могут быть связаны со слоистостью и неоднородностью структуры изготовленных композитов, а также с наличием кластерных образований, возникающих вследствие контактирования металлических островков из соседних слоев и формированием сеточной структуры композита из-за очень тонких прослоек LiF.

Для изготовленных композитов Ag/KCl в оптических спектрах поглощения наблюдается два плазмонных резонанса в видимом диапазоне. Эти резонансы отражают влияние множества факторов на оптические свойства данных композитов. Среди основных из них можно выделить эффекты формы металлических частиц и их конгломератов, а также наличие границ металл-воздух. Нельзя полностью исключить также, что один из резонансов (коротковолновый) может быть связан с диэлектрическими порами в металлической матрице.

Полученные результаты свидетельствуют о возможности использования комбинированной модели для расчетов оптической плотности плазмонно-резонансных композитов с высоким содержанием металлической фазы, полученных термическим осаждением в вакууме.

- Ping Sheng. Theory for the Dielectric Function of Granular Composite Media // Phys. Rev. Letters. - 1980. - Vol. 45, N 1. - P. 60-63.
- [2] А.Н.Понявина, С.М.Качан, Е.Е.Целеш. Эффективная диэлектрическая проницаемость композитных материалов с произвольной объемной концентрацией включений // Журн. прикл. спектр. 2012. Т. 79, №5. С. 765-773.
- [3] К. Борен, Д. Хафмен. Поглощение и рассеяние света малыми частицами. Москва: Мир. 1986. 660 с.

УДК 535.373.2; 535.343.9

В. М. Катаркевич, Ю. В. Крученок, А. Н. Рубинов, Т. Ш. Эфендиев

СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ЖЕЛАТИНОВОЙ МАТРИЦЫ, ДОПИРОВАННОЙ КРАСИТЕЛЕМ И НАНОЧАСТИЦАМИ СЕРЕБРА

Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, 220072, Минск, просп. Независимости, 68; e-mail: <u>tshe@dragon.bas-net.by</u>

Уникальные свойства нанокомпозитов, образуемых при внедрении наночастиц благородных металлов в полимерные матрицы, привлекают пристальное внимание исследователей. Эти свойства определяются именно нанометрическими размерами внедряемых частиц и не наблюдаются для частиц большего размера или обычных объемных образцов металла. Композиты с наночастицами серебра отличаются наличием наиболее сильного (из всех изученных благородных металлов) плазмонного резонанса, а также относительной простотой получения [1].

Нами проведено исследование спектрально-люминесцентных характеристик нанокомпозита на основе биодеградируемого полимера (желатин), допированного красителем родамин 6Ж и наночастицами серебра.

Для приготовления нанокомпозита использовались следующие материалы: желатин фотографический, дистиллированная вода, краситель родамин 6Ж и наночастицы серебра (Ag) диаметром 5 нм. Использование желатина позволяет усилить агрегативную устойчивость наночастиц серебра. Гель желатина обволакивает наночастицы серебра и тем самым предотвращает их агрегацию. Измерения проводились для слоев и пленок толщиной 1 мм и 10 мкм соответственно.

Проведены сравнительные измерения спектров поглощения и флуоресценции гелевых растворов и пленок двух типов, имеющих одинаковое содержание желатина и красителя и отличающихся отсутствием либо наличием наночастиц серебра.

Электронные спектры поглощения приготовленных сред измерялись на спектрофотометре "Carry 500 Scan". Исследование их люминесцентных характеристик осуществлялось с помощью спектрофлуориметра "SFL1211A" и автоматизированного спектрографа "S 3804".

Проведенные измерения показали, что добавка наночастиц серебра в активированный красителем желатиновый гель приводит к деформации спектра поглощения слоя геля толщиной 1 мм – появлению дополнительного поглощения в спектральной области плазмонного резонанса наночастиц серебра, которое зависит от их концентрации, возрастая с ее увеличением. В то же время в максимуме спектра поглощения, спектральное положение которого сохранялось неизменным (~ 529 нм), оптическая плотность геля практически не изменялась.

Установлено, что добавка наночастиц серебра в активированный красителем желатиновый гель толщиной 1 мм практически не влияет на структуру контура люминесценции красителя и спектральное положение его максимума. При этом

регистрируемая интенсивность люминесценции красителя несколько уменьшается при добавлении наночастиц и увеличении их концентрации.

В случае пленок нанокомпозита наблюдается иное поведение спектров поглощения и люминесценции. Так, оптическая плотность нанокомпозитной пленки в области максимума спектра поглощения возрастала примерно в 1.17 раза (с $D \approx 2.9$ до $D \approx 3.4$) по сравнению с пленкой без наночастиц серебра. Рост поглощения нанокомпозитной пленки можно объяснить следующим. В нашем случае имеет место спектральное перекрытие полос поглощения родамина 6Ж и наночастиц серебра. В результате рассеяния на наночастицах, рассеянный свет перепоглощается молекулами родамина 6Ж. Тем самым увеличивается количество поглощенного света. Форма контура поглощения оставалась практически неизменной. При этом имел место незначительный сдвиг (≈ 1.5 нм) максимума спектра поглощения в коротковолновую область.

Наиболее интересным является факт усиления интенсивности флуоресценции нанокомпозитной пленки примерно в 2 раза по сравнению с пленкой без наночастиц. Усиление флуоресценции можно объяснить миграцией энергии плазмонного резонанса наночастиц на молекулы родамина 6Ж. В определенном концентрационном диапазоне молекулы красителя и наночастицы серебра оказываются на расстояниях, оптимальных для процессов обмена энергиями и усиления флуоресценции.

Нанокомпозитные пленки такого типа могут быть использованы в качестве материала химических и биологических сенсоров.

[1] Климов В. В. Наноплазмоника. М.: Физматлит. – 2009.
УДК 535.3

Л. Г. Астафьева¹, Г.П. Леднева¹, В. К. Пустовалов²

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ДВУХСЛОЙНЫХ СФЕРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ

¹Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

astafev@dragon.bas-net.by

² Белорусский национальный технический университет, пр. Независимости, 65, 220013 Минск, Беларусь

pustovalovv@mail.ru

Последнее десятилетие отмечено бурным развитием нанотехнологий с применением физических (в том числе лазерных) и химических методов. В настоящее время известно, что перевод материала в наноразмерное состояние сопровождается фундаментальными изменениями практически всех его физико-химических свойств (оптических, механических, термодинамических, каталитических и т.д.). Металлические наночастицы обладают рядом уникальных свойств, особенно, если размеры наночастиц меньше 100 нм.

Металлические (золотые, серебряные и другие) наночастицы исследуются с целью использования в ряде применений в медицинской и биологической практике. Наночастицы из золота и серебра были использованы для детектирования биомолекул и как биологические маркеры и сенсоры.

В работе исследуются спектральные зависимости оптических свойств (эффективные поперечные сечения поглощения σ_{abs} , рассеяния σ_{sca} и ослабления σ_{ext}) от оптических параметров и вещества ядра и оболочек наночастиц. Предполагается, что двухслойная сферическая наночастица состоит из сферического однородного ядра с радиусом r_0 и комплексным показателем преломления $m_0 = n_0 - i\kappa_0$, покрытого сферически симметричной однородной оболочкой толщиной $\Delta r = r_1 - r_0$ (r_1 – общий радиус наночастицы) с комплексным показателем преломления $m_1 = n_1 - i\kappa_1$ вещества оболочки. Наночастица находится в однородной непоглощающей среде. Рассмотрим для сравнения оптические свойства двухслойных сферических наночастиц: с золотым ядром (Au) и оболочками из кварца и, наоборот, с кварцевым ядром и оболочкой из золота. Золото и кварц используются в качестве материалов наночастиц, поскольку они обладают свойствами, подходящими для многих применений и широко используются в эксперименте. В качестве примера на рисунке 1 приведены спектральные зависимости фактора эффективности рассеяния для двухслойных наночастиц золото-кварц (a) и кварц-золото (б).



Рис. 1. Зависимости эффективных поперечных сечений рассеяния двухслойных наночастиц от длины волны. Радиусы ядер $r_0 = 20$ nm, толщины оболочек $\Delta r = 0$ нм (1), 5 нм (2), 15 нм (3) и 20 нм (4)

Исследования частично финансировались грантом № Ф12В-005 Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований.

УДК 535.375.55 + 546.57 + 546.59

A. Ю. Панарин¹, Y. L. Balachandran², C. H. TepexoB¹, S. Girija²

СТРУКТУРНЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА И СЕРЕБРА, СИНТЕЗИРОВАННЫХ С ПОМОЩЬЮ ПРИРОДНОГО БИОПОЛИМЕРА ПЕКТИНА

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

² Department of Biotechnology, Bharathiar University, Coimbatore- 641046, India <u>girijabiotech@yahoo.co.in</u>

Наночастицы золота и серебра привлекают большое внимание благодаря своим уникальным оптическим свойствам. В их спектрах поглощения и рассеяния наблюдаются характерные пики, обусловленные локализованными плазменными резонансами (ЛПР), которые возникают вследствие когерентных колебаний свободных электронов под действием внешнего электромагнитного поля. Спектральное положение и амплитуда ЛПР зависит от природы металла, размера, формы частиц и диэлектрических параметров среды. Резонансные оптические свойства наночастиц (НЧ) и их зависимость от локального диэлектрического окружения (а также глобальных диэлектрических свойств) успешно используются в нанобиотехнологии для разработки сенсоров нового поколения, а также в целом ряде биомедицинских приложений [1,2]. Кроме того, коллоидные растворы и тонкие пленки из НЧ благородных металлов активными усиливающими средами В спектроскопии гигантского служат комбинационного рассеяния света (ГКР).

Все более увеличивающееся число областей применения нанотехнологий вызывает значительный рост объемов промышленного производства материалов на основе металлических наночастиц, а также требует разработки новых методик их формирования. Наиболее часто синтез НЧ осуществляется путём химического восстановления ионов металла различными восстанавливающими реагентами [3]. При этом, продукты реакции представляют угрозу загрязнения окружающей среды. Особенно существенно это может сказаться при производстве металлических наночастиц и материалов на их основе в промышленных масштабах. Поэтому актуальной задачей является разработка химически чистых, так называемых "зелёных", методов получения НЧ благородных металлов, которые бы исключали использование или же генерацию в процессе синтеза опасных продуктов.

В данной работе мы представляем новый экологически чистый метод синтеза наночастиц золота и серебра. Для этой цели предлагается использовать широко распространенный в природе биологический полимер пектин. Пектин встречается в кожуре яблок, цитрусовых фруктах, а также в некоторых овощах, применяется в пищевой промышленности, а также в фармацевтической индустрии. Он представляет собой линейный полисахарид, состоящий из цепочки D-галактуроновых кислот, связанных посредством α-(1-4)гликозидными мостиками. Как показал анализ физикохимических свойств пектина, он может выступать в процессе восстановления соли металла одновременно как в качестве восстанавливающего, так и стабилизирующего агента. Благодаря этому процесс формирования НЧ является экологически чистым может быть осуществлен в одну стадию.

Синтез наночастиц Au и Ag проводили при комнатной температуре в растворах с различным содержанием пектина. Ход реакции контролировался по спектрам поглощения. Исследовались также структурные параметры наночастиц с помощью просвечивающего электронного микроскопа (ПЭМ). Было установлено, что количество

пектина в растворе оказывает существенное влияние на размер и форму образующихся НЧ. При низкой концентрации пектина наблюдалось образование различных гексагональных золотых наноструктур, размер которых при увеличении концентрации уменьшался, а сами они приобретали трехгранную форму (Рис. 1). Кроме того, при высокой концентрации пектина в растворе появлялось некоторое количество квазисферических наноструктур. С ростом содержания в растворе пектина уменьшался также размер и НЧ серебра. Следует отметить, что НЧ золота и серебра, приготовленные по данной методике обладают высокой стабильностью при хранении (до 30 дней на воздухе при комнатной температуре).

С помощью Си-комплекса водорастворимого катионного 5,10,15,20-тетракис(4-N-метилпиридиний) порфирина, взятого в качестве соединения-аналита была исследована ГКРактивность обоих типов полученных НЧ.



Рис. 1. ПЭМ-изображения золотых НЧ, синтезированных при различном содержании пектина.

Установлено, что наночастицы золота, синтезированные с помощью пектина, демонстрируют достаточно низкое усиление сигнала ГКР, по сравнению с НЧ приготовленными по стандартным химическим методикам. В то же время для коллоидных растворов НЧ серебра уровень ГКР-активности оказался сравнимым, а в некоторых случаях даже выше, чем для НЧ, полученных с применением химических восстанавливающих реагентов.

- Nanotechnologies for biomolecular detection and medical diagnostics / M.M. Cheng [et al.] // Curr. Opin. Chem. Biol. 2006. V. 10. P. 11-19.
- [2] Золотые наноструктуры с плазмонным резонансом для биомедицинских исследований / Н.Г. Хлебцов [и др.] // Российские нанотехнологии. – 2007. – Т. 2 (№3-4). – С. 69-86.
- [3] Синтез и свойства наночастиц серебра: достижения и перспективы / Ю.А. Крутяков [и др.] // Успехи химии. 2008. Т. 77 (3). С. 242-269.

УДК 577.322.7:53.082.56

I. V. Halets¹, A. L. Krauchonak¹, D. Shcharbin¹, M. Bryszewska²

LUMINESCENT ANALYSIS OF THE INTERACTION BETWEEN PAMAM DENDRIMERS OF 3RD AND 4TH GENERATION AND PLASMA PROTEINS OR CYTOSOLIC ENZYMES

¹ Institute of Biophysics and Cell Engineering of National Academy of Sciences of Belarus, Akademicheskaya Str., 27, 220072 Minsk, Belarus halets i@ibp.org.by

² Department of General Biophysics, Faculty of Biology and Environmental Protection, University of Lodz, 141/143 Pomorska, 90-236 Lodz, Poland <u>marbrys@biol.uni.lodz.pl</u>

At present nanoparticles are of interest for scientific investigations in connection with their proposed use in medicine as vehicles for delivery of biologically active molecules into cells. It is shown that the encapsulation of medicinal drugs in nanocapsules and nanospheres increases their efficiency, reducing the dose of the drug, improves compatibility with the patient and enables targeted delivery of therapeutic agents to specific cells and even intracellular organelles [1, 2].

One of the promising nanoscale drug delivery systems for use in the treatment of various diseases are dendrimers. Dendrimers are branched polymers with a central inner core surrounded by layers of repeating units. The outer layer of dendrimers has many functional groups. The tree-like morphology of the dendrimer is determined by symmetrically diverging from the central core branches of polymer structural units. Functional groups on the surface of the dendrimer interact with molecules through electrostatic interactions, while the cavities within them can encapsulate uncharged molecules. Thus, the unique structural properties of dendrimers determine their ability to deliver hydrophobic and hydrophilic therapeutic agents to target cells [3].

Proteins, blood cells and tissues of vessel walls are major targets for interaction with polymers at intravascular administration. Therefore, understanding the mechanisms of interaction of polymers with blood components is a necessary condition for their use in medicine [4, 5].

In present paper we have studied the interaction between polyamidoamine (PAMAM) dendrimers of third (g3) and fourth (g4) generations and human blood proteins (gamma-globulin and thrombin) or cytosolic enzymes (human aspartate transaminase and L-lactic dehydrogenase from rabbit muscle) by absorption spectrophotometry, tryptophan fluorescence and room temperature tryptophan phosphorescence (RTTP).

It has been shown that the incubation of gamma-globulin, thrombin, aspartate transaminase and L-lactic dehydrogenase with PAMAM-g3 or PAMAM-g4 dendrimers in concentrations ranged from 0.1 to 100 μ mole/l resulted in the increase of the intensity of protein absorption spectra. The most significant increase in the optical density of the sample solutions was observed in the case of the interaction between aspartate transaminase and a dendrimer of third generation. This effect may be the consequence of screening of tryptophanyl atoms from the solvent. The higher increase in the intensity of aspartate

transaminase absorption spectrum complexed with PAMAM-g3 in comparison with than its complex with PAMAM-g4 may indicate a stronger interaction between these two molecules.

It has been established that the formation of complexes between gamma-globulin, thrombin, aspartate transaminase, L-lactic dehydrogenase and PAMAM-g3 or PAMAM-g4 dendrimers resulted in a decrease of the fast (τ_1) and slow (τ_2) components of protein RTTP lifetimes. The quenching of the protein RTTP may be the evidence of the increase in frequency and amplitude of internal mobility of a protein structure.

It has been observed that the conformational state of gamma-globulin, thrombin and Llactic dehydrogenase in the interaction with PAMAM-g3 and PAMAM-g4 dendrimers monitored by their fluorescence parameters did not practically change.

In contrast, the changes in the intensity of fluorescence spectra for the complexes of aspartate transaminase with PAMAM-g3 and PAMAM-g4 dendrimers were observed. They can be explained by screening of surface tryptophanyls from the aqueous environment.

Thus, the formation of dendriplexes of PAMAM-g3 or PAMAM-g4 dendrimers with gamma-globulin, thrombin, aspartate transaminase and L-lactic dehydrogenase enhances protein internal mobility. The difference in conformational behaviour between various proteins is a consequence of different localization of tryptophan residues within a protein globule.

This work was partly financed by the National Research Centre of Poland, Project No. DEC-2012/04/M/NZ1/00059.

- Harper S. *In vivo* biodistribution and toxicity depends on nanomaterial composition, size, surface functionalisation and route of exposure / S. Harper, C. Usenko, J.E. Hutchison, B.L.S. Maddux, R.L. Tanguay // J. Exp. Nanosci – 2008. – Vol. 3. – P. 195–206.
- [2]. Muro S. Lysosomal enzyme delivery by ICAM-1-targeted nanocarriers bypassing glycosylation- and clathrin-dependent endocytosis / S. Muro, E.H. Schuchman, V.R. Muzykantov // Mol. Ther. – 2006. – Vol. 13. –P. 135–141.
- [3]. Hu C.-M. J. Nanoparticle-based combination therapy toward overcoming drug resistance in cancer / C.-M. J. Hu, L. Zhang // Biochemical Pharmacology. – 2012. – Vol. 83. – P. 1104–1111.
- [4]. Liu Z.H. Adsorption of amphiphilic hyperbranched polyglycerol derivatives onto human red blood cells / Z.H. Liu, J. Janzen, D.E. Brooks // Biomaterials. – 2010. – Vol. 31. – P. 3364–3373.
- [6]. Kainthan R.K. Unimolecular micelles based on hydrophobically derivatized hyperbranched polyglycerols: biodistribution studies / R.K. Kainthan, D.E. Brooks // Bioconjug. Chem. – 2008. – Vol. 19. – P. 2231–2238.

Физика твердого тела и полупроводников

УДК 541.14

П. Аргиракис¹, Ж. Бискерт², В. С. Вихренко³, П. Гиазицидис¹

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗДЕЛЕНИЯ ЗАРЯДОВ В СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТАХ НА ОСНОВЕ ОРГАНИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

¹ Университет имени Аристотеля, 51124 Салоники, Греция <u>panos@auth.gr</u>, <u>pgiazi@physics.auth.gr</u> ² Университет Жауме I, 12071 Кастелло де ла Плана, Испания <u>bisquert@uji.es</u> ³ Белорусский государственный технологический университет, ул. Свердлова 13а, 220006 Минск, Беларусь vvikhre@bstu.unibel.by

В последние годы солнечные элементы на основе органических конъюгированных полимерных полупроводников привлекают повышенное внимание как академической общественности, так и во все большей мере и коммерческих структур [1]. Эти полимеры имеют подходящие электронные свойства, низкую стоимость, универсальную функциональность, обладают тонкопленочной гибкостью, легко поддаются обработке. Отмеченные факторы позволяют заключить, что такие солнечные элементы, несмотря на недостаточно высокую их эффективность (~5–7%), обладают значительным потенциалом коммерциализации, что и обусловливает проведение интенсивных научных исследований, направленных на повышение их эффективности.

В работах [1,2] обращено внимание на роль энтропийной составляющей в процессе разделения фотогенерируемого заряда. На основе вычисления равновесной свободной энергии было показано, что увеличение энтропии при переходе от одномерных к двух- и трехмерным каналам переноса заряда может приводить к увеличению эффективности на несколько порядков величины.

Действительно, функция распределения электрона в кулоновском поле

 $f(r) = Q^{-1}n_r \exp[-\beta u(r)] = Q^{-1} \exp\{-\beta[u(r) - k_B TS(r)]\}$

где Q – нормировочная постоянная; $n_r = 1, 2\pi r, 4\pi r^2$ для одно-, двух и трехмерных систем, соответственно; r – расстояние до центра, в котором расположен компенсирующий заряд (дырка); T – абсолютная температура; k_B – постоянная Больцмана; $S(r) = \ln n_r$ – конфигурационная энтропия; $\Delta G = u(r) - k_B T S(r)$ – свободная энергия, а энергия кулоновского взаимодействия для решеточной системы с параметром a

$$u(r) = -e_0 / \sqrt{i^2 + j^2 + k^2}, \quad e_0 = e^2 / (4\pi\varepsilon_0\varepsilon a)$$

где ε – диэлектрическая проницаемость среды; e – заряд электрона; ε_0 – электрическая постоянная; i, j, k определяют целочисленные координаты решеточных узлов трехмерной системы, а для плоских и одномерных систем выражение соответственно модифицируется. При характерных значениях параметров [2] безразмерный энергетический параметр $e_0 = 13,9$. Анализ, основанный на статистике Больцмана, показал [2], что при расстоянии от места появления экситона до коллектора электронов, равном 30 параметрам решетки, выход электронов в двумерной системе более чем на два порядка, а в трехмерной – почти на четыре порядка выше, чем в одномерной.

Однако описанный выше расчет не учитывает неравновесность процесса разделения зарядов и возможность их рекомбинации. Для учета этих обстоятельств было выполнено моделирование системы по динамическому методу Монте Карло. Интенсивности переходов электрона между ближайшими узлами решетки прияты в форме выражения Миллера–Абрахама

$$w_{n\to n+1} = w_0 \exp[-(u_{n+1} - u_n + |u_{n+1} - u_n|)/2k_BT], w_0 = v_0 \exp(-2a/\alpha)$$

где u_n и u_{n+1} – энергия электрона в узле до и после перехода, соответственно; w_0 – частотный множитель, определяющий временной масштаб процесса. В процессе моделирования этот множитель полагался равным единице, и для перехода к физическому времени количества шагов алгоритма Монте Карло необходимо умножить на w_0^{-1} .

w_{10}	1D	2D	3D	2D/1D	3D/2D
0.01	5.40E-06	2.19E-04	3.90E-03	40.6	17.8
0.001	6.77E-05	2.25E-03	3.70E-02	33.2	16.4
0.0001	6.57 E-04	2.20 E-02	0.2794	33.6	12.7
0.00005	1.33 E-03	4.32E-02	0.4362	32.5	10.1
0.00001	6.62 E-03	1.84 E-01	0.7944	27.8	4.3

Результаты моделирования приведены в таблице

В первой колонке приведены безразмерные значения интенсивности рекомбинации, то есть интенсивности перехода электрона из ближайшей в центральную ячейку. Для сравнения, безразмерная интенсивность перехода электрона в противоположную центральной ячейке сторону определяется величиной exp(-13,9/2)≅0,00096. Интенсивность перехода в перпендикулярном направлении в двух- и трехмерной системах примерно равна 0,017. По мере удаления от центра интенсивности переходов быстро увеличиваются. Три следующие колонки содержат долю достигших коллектора электронов, что определяет эффективность процесса разделения заряда в одно-, двух-, и трехмерных системах, соответственно. Последние две колонки определяют отношение эффективностей систем различной размерности.

Результаты моделирования качественно подтверждают результаты равновесного анализа, однако количественно отношение эффективностей систем разной размерности примерно на порядок величины меньше. Выход электронов в одномерной системе обратно пропорционален интенсивности рекомбинации в рассмотренном диапазоне ее значений. В двух- и трехмерных системах наблюдается отклонение от этой зависимости по мере увеличения выхода электронов, что обусловлено эффектами насыщения.

По результатам моделирования найдены вероятности распределения электронов по узлам решетки, построены зависимости неравновесной свободной энергии от пространственной координаты и обнаружены соответствующие отличия от равновесных значений. Также исследовано распределение времен достижения электронами коллектора и распределение времен рекомбинации.

- Klarke T. M. Charge Photogeneration in Organic Solar Cells / T. M. Klarke, J. R. Durrant// Chem. Rev. – 2010. V. 110. – P. 6736.
- [2] Gregg B. A. Entropy of Charge Separation in Organic Photovoltaic Cells: The Benefit of Higher Dimensionality // J. Phys. Chem. Lett. – 2011. – V. 2. – P. 3013.

УДК 543.426 + 535.341.08

А. П. Войтович¹, В.С. Калинов¹, Е.Ф. Мартынович², А.Н. Новиков¹, А.П. Ступак¹

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В КРИСТАЛЛАХ ФТОРИ-ДА ЛИТИЯ ПО РАССТОЯНИЯМ МЕЖДУ НИМИ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

kalinov@imaph.bas-net.by

² Иркутский филиал Института лазерной физики СО РАН, ул. Лермонтова, 130а, 664033 Иркутск, Россия femto@bk.ru

Собственные подвижные дефекты, созданные в результате радиационного воздействия, диффундируют по кристаллу и вступают в реакции с локализованными дефектами. При протекании реакций замещения или агрегации происходит восстановление регулярности решетки или образование агрегатных дефектов (и центров окраски). Таким образом, диффузия подвижных дефектов во многом определяет свойства кристаллов. В связи с этим она интенсивно исследуется. Одной из важнейших характеристик, определяющей закономерности кинетики, является распределение диффузионных путей, проходимых подвижными дефектами до вступления в реакцию, по их величинам. Такое распределение адекватно распределению дефектов, участвующих в реакции, по расстояниям между ними.

Цель данной работы состоит в нахождении распределения диффузионных путей, проходимых подвижными дефектами в кристалле до вступления в реакцию, по их величинам. Распределение выводится из экспериментально найденных закономерностей кинетики реакций, в которых участвуют подвижные и локализованные дефекты в пострадиационный период. Демонстрируется использование полученных закономерностей и распределения для вычисления характеристик диффузии собственных подвижных дефектов (анионных вакансий v_a и центров окраски F_2^+), а также для оценки концентраций вакансий и центров F_1^- в кристаллах фторида лития, облученных гамма квантами. Интерпретируются экспериментально найденные изменения средних времен реакций с участием вакансий или центров F_2^+ во фториде лития в пострадиационный период при увеличении дозы облучения.

Эксперименты проводились с кристаллами фторида лития (LiF). Выбор этих кристаллов обусловлен удобством измерения кинетики протекания реакций с участием подвижных и локализованных дефектов при различных температурах отжига. Партии пластинок размерами (0.7—1.5)×(5—7)×(7—10) mm³, вырезанных из номинально чистого монокристалла LiF вдоль плоскости {100}, облучались гамма квантами от источника ⁶⁰Со при температуре $T_{irr} = 77$ К. При этой температуре анионные вакансии локализованы. Для различных партий варьировалось время и, следовательно, доза облучения. Используемые дозы облучения были относительно небольшими. Поэтому можно пренебречь образованием агрегатных центров окраски (ЦО) во время облучения, когда вакансии неподвижны. Экспериментально было установлено, что в исследуемых нами образцах отсутствует градиент концентраций создаваемых дефектов. Поэтому диффузия дефектов в кристалле происходит равновероятно в трех взаимно перпендикулярных направлениях. Такую диффузию можно определить как диффузию типа случайных блужданий. Для такого случая получено математическое описание зависимостей концентраций N от длины L диффузионного пути, проходимого подвижным дефектом из исходного положения до встречи с партнером по реакции, т.е. от расстояния L между реагирующими дефектами:

$$\frac{dN}{N_0 dL} = 2 \frac{L}{L_{ms}^2} \exp\left(-\frac{L^2}{L_{ms}^2}\right) = Y(L)$$
(1)

Функция Y(L) нормирована на единицу, т.е.

$$\int_{0}^{\infty} Y(L) \, dL = 1.$$

Ее максимум соответствует наиболее вероятному расстоянию $L_{\rm m}$ между реагирующими партнерами. Среднее расстояние $L_{\rm av}$ находится по обычному правилу определения среднего.



Рис. 1. Функция распределения дефектов двух типов по расстояниям между ними при значениях $L_{av} = 1.2 \cdot 10^{-8}$ (1) и 2.4 · 10⁻⁸ м (2)

Вид функции Y(L) представлен на рис. 1. Используя эту функцию, можно рассчитать вероятности, с которыми расстояния между компонентами пар реагирующих дефектов находятся в определенных интервалах. Например, вероятности обнаружения пар с расстояниями в интервалах $L < L_{av}$ и $L > L_{av}$ равны соответственно 0.544 и 0.456. Доля пар с расстояниями между компонентами в областях $L > 2.5L_{av}$ и $L < 0.1L_{av}$ равны соответственно 0.7% и 0.78%. Как видно из приведенных цифр, дефекты с очень малыми и очень большими расстояниями между ними составляют незначительную долю от всех дефектов. Они вносят незначительный вклад в нормировочный интеграл, что и позволяет использовать пределы интегрирования ноль и бесконечность. Распределение (1) записано как непрерывная функция от расстояния *L*. Однако дефекты, например вакансии, двигаются скачками. Каждый скачок имеет определенную длину. Реагирующие дефекты распределены по расстояниям с шагом, примерно равным длине диффузионного скачка. Эти обстоятельства могут сказываться на распределении *Y*(*L*) только в области малых расстояний *L*, близких к длине скачка.

УДК: 548.4+620.162: (549.233+549.252+549.251) А. Н. Шимко¹, Г.Е. Малашкевич¹, Д.М. Фреик², Л.И. Никируй², И.А. Свито³

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ ПОЛУЧЕНИЯ ТОНКИХ ПЛЁНОК РВТЕ И РВТЕ:ВІ НА ИХ СПЕКТРАЛЬНЫЕ И ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

¹ Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>shimko.ann@gmail.com</u>

² Физико-химический институт Прикарпатсткого национального университета им. В. Стефаника, ул. Шевченко 57, 76025 Ивано-Франковск, Украина ³Белорусский государственный университет, пр. Независимости 4, 220030, Минск, Беларусь

Плёнки применяются на основе халькогенидов свинца широко В термоэлектрических устройствах, когда требуется высокая чувствительность и малое время отклика прибора. Учитывая существенное влияние на значение термо-ЭДС эффективности рассеяния теплонесущих фононов, которую можно контролировать по ИК-спектрам, можно предположить существование определённых корреляций между термоэлектрическими и спектральными свойствами подобных структур. Однако этот вопрос в литературе практически не рассмотрен. В данной работе нами была предпринята попытка выявить такие корреляции путем исследования ИК-Фурье спектров и термоэлектрической добротности легированных и нелегированных плёнок теллурида свинца.

Для решения поставленной задачи методом осаждения из газодинамического потока пара были получены плёнки нелегированного теллурида свинца и теллурида свинца, легированного висмутом. В качестве подложек были использованы стекло и слюда, в том числе, с нанесёнными на их поверхность островками серебра. Было исследовано влияние условий получения плёнок PbTe и PbTe:Bi на их спектральные и термоэлектрические свойства.

В табл.1 приведены составы плёнок, температуры испарителя (T_1) и подложки (T_2), времена напыления халькогенидных плёнок (t) и коэффициенты термо-ЭДС (α), измеренные при разнице температур между электродами $\Delta T \approx 21-33$ °С и средней температуре $\langle T \rangle = T_x + \Delta T/2 = 34$ °C. Значение t для серебряных плёнок составляло 5 минут.

Как видно из результатов измерения коэффициентов термо-ЭДС плёнок, приведенных в табл. 1, максимальное значение данного параметра наблюдалось в случае нелегированной плёнки на стеклянной подложке. Легирование такой плёнки висмутом привело к значительному снижению её коэффициента термо-ЭДС. В случае, когда легированная висмутом плёнка теллурида свинца наносилась на стеклянную подложку с поверхностным островковым серебром, значение коэффициента термо-ЭДС было выше, чем в предыдущем случае. Такая же тенденция изменения коэффициента термо-ЭДС, правда, гораздо менее выраженная, сохранялась при замене стеклянной подложки на слюдяную.

N⁰	Состав образцов	T ₁ /T ₂ , °C/°C	t, мин	α, мкВ/К
1	РbТе/стекло	700/200	10	-317±30
2	РbТе/стекло	700/200	20	-267±25
3	РbТе:Ві/стекло	700/200	10	-87±9
4	Ag/PbTe:Bi/стекло	700/200	10	-102±10
5	PbTe/слюда	700/200	10	-81±8
6	PbTe:Ві/слюда	700/200	10	-66±6
7	Ag/PbTe:Bi/слюда	700/200	10	-69±7
8	Ag/PbTe/слюда	700/200	10	-92±9
9	PbTe/стекло	700/150	30	220±20

Таблица 1. Условия получения и термоэлектрические свойства плёнок PbTe и PbTe:Bi

Методом ИК-Фурье спектроскопии было установлено, что наличие на подложке островкового слоя серебра практически не отражается на ИК-спектрах плёнок PbTe:Bi, в то время, как для пленок PbTe имеет место заметное снижение интенсивности и высокочастотное смещение абсорбционной полосы при $v \approx 1750$ см⁻¹, обусловленной вакансиями халькогена, и полосы при $v \approx 2750$ см⁻¹. Данный факт свидетельствует о возможности управления спектральними и термоэлектрическими характеристиками пленок PbTe путём нанесения островков серебра на используемую подложку.

Более детальное сопоставление спектроскопических и термоэлектрических свойств исследованных образцов позволило сделать вывод о корреляции значений коэффициента термо-ЭДС плёнок PbTe и PbTe:Вi с положением края их межзонного поглощения.

УДК 539.143.43

В. С. Кузьмин¹, В. М. Колесенко²

ЗАВИСИМОСТЬ ИНТЕНСИВНОСТИ ОДНОИМПУЛЬСНОГО ЯДЕРНОГО ЭХА ОТ ЧАСТОТЫ ВОЗБУЖДАЮЩЕГО ИМПУЛЬСА В ФЕРРИМАГНЕТИКАХ

¹ Международный государственный экологический университет им. А.Д. Сахарова, ул. Долгобродская, 23, 220009 Минск, Беларусь

vskuzmin@iseu.by

² ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению», ул. П. Бровки, 19, 220072 Минск, Беларусь koles@ifttp.bas-net.by

В ферримагнетике Eu₃Fe₅O₁₂ была зарегистрирована двугорбовая зависимость интенсивности сигнала одноимпульсного эха (ОЭ) от отстройки частоты радиочастотного (РЧ) импульса относительно резонанса [1]. Однако причина двугорбовой зависимости амплитуды сигнала ОЭ от отстройки частоты РЧ импульса относительно частоты ЯМР в данных системах остается не выясненной. Это связано с тем, что предложенное в [1] аналитическое описание амплитуды сигнала ОЭ в магнитоупорядоченных системах для нерезонансного режима возбуждения не может быть привлечено для объяснения природы двугорбовой зависимости амплитуды сигнала ОЭ в Eu₃Fe₅O₁₂, поскольку оно не учитывает неоднородное распределение коэффициента усиления амплитуды РЧ поля на ядрах. С другой стороны приведенное в работе [2] аналитическое описание сигнала ОЭ в магнитоупорядоченных средах также нельзя применить для объяснения динамики амплитуды, поскольку оно не учитывает нерезонансный режим возбуждения. Поэтому для описания поведения амплитуды сигнала ОЭ в магнитоупорядоченных материалах необходимо получить аналитическое выражение для сигнала ОЭ в магнитоупорядоченных средах с учетом режима нерезонансного возбуждения, неоднородного уширения спектроскопического перехода и неоднородного распределения коэффициента усиления.

Для решения этой задачи получим выражение для намагниченности, описывающее сигнал свободной прецессии (ССП), генерирующегося после воздействия на двухуровневую ядерную систему нерезонансного РЧ импульса, которое учитывает неоднородное уширение спектроскопического перехода и неоднородное распределение коэффициента усиления в магнитоупорядоченных средах. Усреднение намагниченности по контуру неоднородно уширенной линии и по функции неоднородного распределения коэффициента усиления РЧ поля на ядрах выполним с помощью, соответственно, метода стационарной фазы и перевала. Рассчитанное выражение для намагниченности реализуется на интервале $[0, t_1)$ и описывает на конце данного интервала формирование сигнала ОЭ.

Из этого выражения следует, что сигнал ОЭ может формироваться и в резонансных, и в нерезонансных условиях возбуждения. Построим семейство кривых зависимостей амплитуды сигнала ОЭ от отстройки относительно центральной частоты ЯМР при различных значениях частоты Раби (рис.1). В условиях слабого РЧ поля зависимость амплитуды сигнала ОЭ от отстройки имеет симметричный

колоколообразный вид (кривая 1). При увеличении амплитуды РЧ импульса форма рассматриваемой зависимости постепенно трансформируется в двугорбовую кривую 2, которая при дальнейшем изменении напряженности РЧ поля превращается в два отдельных равных по амплитуде пика (кривая 3). Такая двугорбовая зависимость амплитуды сигнала ОЭ возникает в магнитоупорядоченных материалах вследствие неоднородности коэффициента усиления и не проявляется в обычных хановских системах.



Рис. 1. Семейство кривых зависимостей амплитуды сигнала ОЭ от отстройки частоты РЧ импульса относительно частоты ЯМР, соответствующих различным значениям частоты Раби: ω₁ / σ = 0,5 / η̄ (1), ω₁ / σ = 0,7 / η̄ (2), ω₁ / σ = 0,9 / η̄ (3), где ω₁ - частота Раби; σ - полуширина спектральной линии; η̄ - среднее значение коэффициента усиления

Для обоснования достоверности полученных в настоящей работе теоретических результатов сопоставим их с экспериментальными данными [1]. Так экспериментально установлено, что интенсивность сигнала ОЭ в Eu₃Fe₅O₁₂, формирующегося в резонансных условиях, в 4-5 раз меньше интенсивности сигнала ОЭ, возникающего в нерезонансных условиях [1]. Такое поведение амплитуды сигнала ОЭ подтверждается нашими теоретическими расчетами.

- [1] Чекмарев В.П. Механизм формирования одноимпульсного эха в хановских спиновых системах. / В.П. Чекмарев, М.И. Куркин, С.И. Голощапов // ЖЭТФ. 1979. Т. 76. С. 1675.
- [2] Кузьмин В.С. Резонансное возбуждение одноимпульсного ядерного спинового эха в магнитоупорядоченных средах. / В.С. Кузьмин, В.М. Колесенко //ЖПС. – 2009.-Т.76.- С.387.

УДК 621.79

М.В. Гольцев, Л.В. Кухаренко, М.В. Гольцева

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АСМ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ ПОВЕРХНОСТЕЙ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ИОННО-ПЛАЗМЕННЫХ ПОКРЫТИЙ И ИОННО-ЛЕГИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ

Белорусский государственный медицинский университет пр. Дзержинского, 83, 220116 Минск, Беларусь <u>mgoltsev@mail.ru</u>

Состояние поверхности во многом определяет физико-механические И характеристики эксплуатационные современных медицинских материалов И инструментов. В последнее время для изучения топографии поверхности различных по природе структур все чаще наряду с РЭМ-РСМА находит применение атомно-силовая микроскопия, при этом в АСМ методиках имеются огромное преимущество перед РЭМ при подготовке образцов биологических объектов.

Объектом исследования являлись защитные композиционные покрытия Ti–Zr–N, Ti–Mo–N и Zr–Mo–N толщиной 4...10 мм на режущем инструменте и Al (99,98 вес%), имплантированный ионами Xe⁺ с энергией 124 МэВ дозой 1·10¹³...1·10¹⁵ ион/см². Морфологию и микрорельеф поверхности изучали на атомно-силовом микроскопе марки NT-MDT с возможностью трехмерного изображения, анализом профилей сечения поверхности и гистограммами элементов рельефа.

Результаты ACM изучения микрорельефа поверхности покрытия Ti-Zr-N после трибологических испытаний представлены на рисунке 1 и подтверждают механизм абразивно-адгезионного повреждения.



Рис.1. Рельеф поверхности покрытия тройной системы Ti-Zr-N. (а – рельеф поверхности, профиль боси Х, всечения вдоль изображение трехмерное рельефа поверхности исходного образца; г – рельеф поверхности, д – профиль сечения вдоль оси Х, е – трехмерное изображение рельефа поверхности образца после испытания на износ)

Изучение на АСМ

поверхности покрытия Ti-Zr-N выявило с содержание ограниченного количества капельной фазы (пик размером ~250 нм) и мелкозеренной структуры с размером зерен 2...4 мкм, относящейся к типу ячеистых структур. Изучение на ACM поверхности покрытия тройной системы Zr-Mo-N (рис.2) позволило отнести тип поверхности также к ячеистой структуре глубиной 40–100 нм.



Рис. 2. Рельеф поверхности нитридного покрытия тройной системы Zr-Mo-N a – трехмерное изображение поверхности; б – гистограмма распределения элементов структуры

Механизм образования ячеистых структур связывается с образованием в непосредственной близости от поверхности раздела расплав-твердая фаза зоны концентрационного переохлаждения расплава. Используя метод РЭМ - РСМА, ранее были получены картины топографии поверхности и профили распределения компонентов Ti, Mo, N и Zr, Mo, N в соответствующих нитридных системах, что позволило создать комплексную картину полученных композиционных структур.

Представляло интерес изучить методом ACM рельеф поверхности алюминия, облученного тяжелыми ионами ксенона, применительно к условиям технологической обработки. Обработка поверхности алюминия ионами ⁴⁰Ar привела к повышению ее твердости и износостойкости. Имплантация ионов ¹²⁹ Хе с энергией 124 МэВ может далее расширить спектр новых физико-механических свойств алюминия.

Изучение методом ACM рельефа поверхности Al показало, что при облучении ионами ¹²⁹ Хе наблюдаются эффекты сглаживания поверхности (уменьшается глубина дефектов и их относительное количество) и упрочнения, связываемого с накоплением радиационных дефектов и твердорастворным упрочнением (рис.3).



Рис. 3. Рельеф(1) и профиль распределения элементов рельефа(2) образца Al до (а) и после (б) облучения ионами ¹²⁹Хе

Совокупность АСМ, РЭМ-РСМА и прочностных тестов композиционных нитридных покрытий Ti-Zr-N, Zr–Mo–N, Ti-Mo-N, исследование влияния облучения ионами Xe⁺ с энергией 124 МэВ на морфологию и упрочнение Al показала образование специфических видов топографии поверхности, профили распределения компонентов и упрочнение металла с увеличение дозы облучения. Таким образом, применение АСМ в совокупности с РЭМ-РСМА, РСА и тестами на износостойкость позволяет проводить комплексные исследования микро- и нано- твердотельных структур.

УДК 621.382: 535.376

О. С. Васьков¹, В. К. Кононенко¹, В. С. Нисс¹, А. Ф. Керенцев², И. И. Рубцевич², Я. А. Соловьев², А. С. Турцевич²

ИССЛЕДОВАНИЕ КАЧЕСТВА ПОСАДКИ КРИСТАЛЛОВ МОЩНЫХ МОП-ТРАНЗИСТОРОВ

¹ БНТУ, просп. Независимости, 65, 220013 Минск, Беларусь vklavik@gmail.com ² ОАО «Интеграл», ул. Казинца И.П., 121А, 220108 Минск, Беларусь AKerentsev@transistor.com.by

На образцах транзисторов КП723Г, монтаж кристаллов которых выполнялся в разных температурных режимах, а также на зарубежных аналогах IRLZ44N и IRL8306 (International Rectifier, США) проведены измерения структуры теплового сопротивления МОП-транзисторов методом релаксационной тепловой спектрометрии [1, 2]. При измерениях спектры внутреннего теплового сопротивления транзисторов апроксимировались семизвенной *RC*-цепью по схеме Фостера и Кауера (рис. 1).





Рис.1. Непрерывные и дискретные спектры для транзисторов КП723Г с разным качеством посадки кристаллов.

Рис.2. Профили распределения теплового потока в транзисторах КП723Г.

Анализ спектров для партии транзисторов КП723 показывает, что наиболее существенный вклад во внутреннее тепловое сопротивление транзисторов ($R_{\rm jc}$) вносит тепловое сопротивление слоя посадки кристалла (рис. 2), величина которого составляет порядка 50 % $R_{\rm jc}$ (рис. 3). Аномально высокое значение сопротивления посадки связано с рассогласованием фононных подсистем по обе стороны границы полупроводник-металл и наличием пустот в припое.





После разгерметизации пластмассовых корпусов транзисторов проводился контроль качества монтажа кристаллов методом фотоакустической и электронной микроскопии (рис. 4 и 5). Как видно для транзистора VD1 (рис. 4*a*), пайка кристаллов

которого выполнялась в конвейерной водородной печи при оптимальной температуре (порядка 400 °C), уровень дефектности в паянном соединении не превышает 5%. При увеличении температуры пайки до 440 °C дефектность резко возрастает (рис. 46, 46), что приводит к росту переходного теплового сопротивления и сужению теплового потока в слое припоя (рис. 1 и 2). Данные, полученные обоими методами, хорошо коррелируют между собой.







a) VD1, $S_{\text{деф}} \approx 5\% S_{\text{кр}}$ *б*) VD2, $S_{\text{деф}} \approx 30\% S_{\text{кр}}$ *в*) $S_{\text{деф}} \approx 45\% S_{\text{кр}}$ Рис. 4. РЭМ изображения припоя транзисторов КП723Г при разных режимах посадки кристаллов. *а*) $T = 400^{\circ}$ С, V = 50 мм/мин, *б*) $T = 440^{\circ}$ С, V = 50 мм/мин, *в*) $T = 440^{\circ}$ С, V = 70 мм/мин.







Рис. 5. Лазерные фотоакустические топограммы паяного соединения под кристаллом.

Методом лазерной интероферометрии определены уровни макронапряжений в кристаллах и выявлены области нарушения сплошности паяного соединения под кристаллом. Качественные и интегрированные количественные оценки напряженнодеформированного состояния кристаллов определялись по виду интерферограмм с учетом характера кривизны поверхности – выпуклости и/или вогнутости (рис. 6). Измерения показали, что напряжения активной структуры растягивающие для КП723Г и сжимающие для IRLZ44N.



Рис. 6. Интерферограммы напряженно-деформированного состояния кристаллов КП723Г и IRLZ44N.

- [1] Турцевич А.С., Рубцевич И.И., Соловьев Я.А. и др. Исследование качества пайки кристаллов мощных транзисторов релаксационным импеданс-спектрометром // ТКЭА. 2012. № 5. С. 44.
- [2] Васьков О.С., Нисс В.С., Кононенко В.К. и др. Диагностика технологических характеристик мощных транзисторов с помощью релаксационного импедансспектрометра тепловых процессов // Книга тезисов. IX Междунар, конф. «Кремний-2012». С.-Петербург, 2012. – С. 152.

УДК 531.19

Я. Г. Грода

КОЭФФИЦИЕНТЫ ДИФФУЗИИ РЕШЕТОЧНЫХ ФЛЮИДОВ ПРИ УЧЕТЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В СЕДЛОВОЙ ТОЧКЕ

Белорусский государственный технологический университет, ул. Свердлова, 12а, 220006 Минск, Беларусь <u>groda@bstu.unibel.by</u>

Модель решеточного флюида является одной из стандартных моделей физики конденсированного состояния и широко используется для описания физикохимических процессов в объеме и на поверхностях твердых тел [1]. В частности, она оказывается очень полезной при изучении диффузионных процессов.

Ранее была предложена общая теория диффузии в решеточных системах и дан строгий статистико-механический вывод выражения для кинетического коэффициента диффузии в пренебрежении влиянием эффектов памяти [2]. В рамках построенной теории были исследованы диффузионные свойства решеточных флюидов с взаимодействием ближайших соседей на решетках различных типов. В дальнейшем отмеченный подход был расширен для описания процессов термодиффузии, диффузии в многокомпонентных и многоуровневых системах [1], диффузии решеточного флюида на неупорядоченных решетках [3].

В то же время можно отметить, что при преодолении частицей межузлового барьера частица попадает в так называемую седловую точку, расположенную в вершине этого барьера. При этом может быть рассмотрено взаимодействие частицы с частицами, являющимися ближайшими соседями по отношению к данной седловой точке. Учет такого дополнительного взаимодействия приводит к изменению эффективного межузлового барьера и, очевидно, будет влиять на диффузионные свойства системы.

В настоящей работе сделана попытка учета такого дополнительного взаимодействия между частицами и проводится оценка его влияния на диффузионные свойства решеточного флюида.

Рассматриваемая модель представляет собой систему из n частиц, расположенных в узлах регулярных плоской квадратной, треугольной или простой кубической решеток, содержащей N узлов. Каждый узел может либо быть занятым частицей, либо быть вакантным. Состояние узла i определяется числом заполнения $n_i = 1$ или $n_i = 0$ в зависимости от того, занят узел частицей или вакантен. Заполнение узла более чем одной частицей запрещено.

Находящаяся в некотором узле частица может взаимодействовать с энергией J с частицами, занимающими ближайшие соседние узлы. При ее переходе в один из ближайших вакантных узлов при прохождении седловой точки она также взаимодействует с узлами, являющимися ближайшими соседями к этой седловой точке. Энергия взаимодействия в данном случае принимается равной J_{Σ} .

В рамках общей теории диффузионных процессов в решеточных системах и суперпозиционного приближения, при котором корреляции в заполнении решеточных узлов определяются только парными корреляциями для ближайших соседей, получены

273

приближенные выражения для кинетических коэффициентов диффузии решеточного флюида на квадратной, треугольной и кубической (при $J=J_{\Sigma}$) решетках, соответственно

$$\begin{split} D_{J} / D_{0} &= (1 - \theta g) (1 + \gamma \theta g)^{2} (1 + \sigma \theta g) + 2\xi \theta (1 - \theta g^{2}) (1 + \sigma \theta g) \times \\ &\times [1 + \gamma^{2} \theta^{2} g^{3} + \gamma \theta g (g + 1)] + \xi^{2} \theta^{2} (1 - \theta g^{3}) (1 + \gamma \theta g^{2})^{2} (1 + \sigma \theta g), \\ D_{J} / D_{0} &= (1 - \theta g) \Big[(1 + \sigma \theta g)^{2} + \sigma \theta g (1 + \sigma \theta g^{2})^{2} \Big] + 2\gamma g \theta (1 - \theta g^{2}) (1 + \sigma \theta g^{2}) \times \\ &\times \Big[1 + 2\sigma \theta g + \sigma^{2} \theta^{2} g^{4} \Big] + \gamma^{2} \theta^{2} g^{2} (1 - \theta g^{3}) \Big[(1 + \sigma \theta g^{2})^{2} + \sigma \theta g (1 + \sigma \theta g^{3})^{2} \Big], \\ D_{J} / D_{0} &= (1 + \theta g \sigma) \Big[(1 - \theta g) + 4\theta \xi (1 - \theta g^{2}) + 6\theta^{2} \xi^{2} (1 - \theta g^{3}) + \\ &+ 4\theta^{3} \xi^{3} (1 - \theta g^{4}) + 6\theta^{4} \xi^{4} (1 - \theta g^{5}) \Big], \end{split}$$

где

 $\sigma = \exp(\beta J) - 1, \quad \gamma = \exp(\beta \Delta) - 1, \quad , \quad \xi = \exp(-\beta J_{\Sigma}) - 1, \quad \Delta = J - J_{\Sigma},$

 D_0 – коэффициент диффузии решеточного флюида в пределе низких концентраций; $\beta = 1 / k_{\rm B}T$ – обратная температура; $k_{\rm B}$ – постоянная Больцмана; T – температура; θ – равновесное значение концентрации частиц; g – парная корреляционная функция двух ближайших соседних узлов которая может быть найдена, например, в рамках диаграммного приближения.

Для верификации предложенных выражений для кинетического коэффициента диффузии выполнено компьютерное моделирование диффузионных процессов по динамическому методу Монте-Карло с помощью алгоритма Метрополиса [5], модифицированного с целью учета взаимодействия в седловой точке.

Сопоставление с результатами компьютерного моделирования по методу Монте-Карло показало, что предлагаемый подход к определению кинетического коэффициента диффузии позволяет получать адекватное качественное описание транспортных процессов в решеточном флюиде, а при не очень низких температурах приводит и к верным количественным результатам.

- [1] Вихренко, В. С. Равновесные и диффузионные характеристики интеркаляционных систем на основе решеточных моделей / В. С. Вихренко, Я. Г. Грода, Г. С. Бокун Минск: БГТУ, 2008. 326 с.
- [2] The self-consistent diagram approximation for lattice systems: diffusion properties of interacting lattice gases / G. S. Bokun [et al.] // Physica A. 2000. Vol. 296, № 1/2. P. 83–105.
- [3] Diffusion characteristics of particles on energetically disordered lattices / P. Argyrakis [et al.] // Solid State Ionics. 2008. Vol. 179. P. 143–147.
- [4] Vikhrenko, V. S. The diagram approximation for lattice systems / V. S. Vikhrenko, Ya. G. Groda, G. S. Bokun // Phys. Let. A. 2001. Vol. 286, № 2/3. P. 127–133.
- [5] Equation of state calculation dy fast computing machines / N. Metropolis [et al.] // J. Chem. Phys. – 1953. – Vol. 21, № 6. – P. 1087–1092.

УДК 539.1.07, 539.216.2

В.Т. Ерофеенко, А.И. Урбанович

ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ ТРАНСПОРТИРОВКЕ ИОННЫХ ПУЧКОВ ЧЕРЕЗ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ КАПИЛЛЯРЫ

Белорусский Государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь bsu_erofeenko@tut.by, urbanovich@gmail.com

Транспортировка ускоренных ионов через диэлектрические капилляры дала возможность получать ионные пучки очень малого поперечного сечения с небольшой расходимостью [1]. Одной из основных задач сейчас является получение пучков большой мощности. Можно выделить четыре фактора, оказывающих существенное влияние на формирование таких пучков. Это явления, возникающие при вхождении ускоренных ионов в капилляр; эффекты, возникающие в результате взаимодействия движущихся ионов с поверхностью капилляра; процессы, происходящие в самом пучке; эффекты, возникающие при выходе пучка из капилляра. Теоретически наиболее исследованы процессы взаимодействия движущихся ионов с поверхностью диэлектриков [2]. По нашему мнению с увеличением объемного заряда пучка возможны эффекты изменения его пространственной структуры.

Рассмотрим цилиндрический капилляр, ориентированный вдоль оси 0Z, длиной l с внутренним радиусом R, т.е. определим область D_0 ($0 \le r < R$; 0 < z < l; $0 \le \varphi < 2\pi$), и внутреннюю поверхность капилляра зададим в виде граничной области Γ (r = R; $0 \le z < l$; $0 \le \varphi < 2\pi$), где r, z, φ – цилиндрические координаты. Через величины $\rho(M)$ и $\sigma(M)$ зададим объемную и поверхностную плотность зарядов. Введя обозначение $R(M_0, M) = ((x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2)^{1/2}$, электрические потенциалы, создаваемые этими зарядами, в некоторой точке $M_0(x_0, y_0, z_0)$ внутри капилляра можно представить соотношениями:

$$U_{0}(M_{0}) = \iiint_{D_{0}} \frac{\rho(M) dV_{M}}{R(M_{0}, M)}, \qquad U_{\Gamma}(M_{0}) = \iint_{\Gamma} \frac{\sigma(M) dS_{M}}{R(M_{0}, M)}$$
(1)

В цилиндрических координатах потенциалы (1) примут вид:

$$U_0(r_0, z_0) = 4 \int_0^l \int_0^R r \rho(r, z) \int_0^{\pi/2} Q_r^{-1/2}(r_0, z_0, r, z) dr dz d\theta$$
(2)

$$U_{\Gamma}(r_0, z_0) = 4R \int_0^l \sigma(z) \int_0^{\pi/2} Q_R^{-1/2}(r_0, z_0, z) dz d\theta$$
(3)

$$Q_r = (r + r_0)^2 + (z - z_0)^2 - 4rr_0 \sin^2\theta;$$
 $Q_R = Q_{r=R};$ $\theta = \frac{\pi}{2} - \frac{\varphi - \varphi_0}{2}.$

Потенциал поля в любой точке M_0 внутри капилляра будет определяться суммой потенциалов (2) и (3), а напряженность электрического поля будет иметь две компоненты, направленные вдоль единичных векторов $\vec{e_r}$ и $\vec{e_z}$, т.е.

 $\vec{E} = -grad(U_0 + U_{\Gamma}) = -(E_{0r} + E_{\Gamma r})\vec{e_r} - (E_{0z} + E_{\Gamma z})\vec{e_z}$. Из-за наличия радиальной составляющей напряженности поля возникает электрическая сила $F_r = q(E_{0r} + E_{\Gamma r})$, отклоняющая движущиеся ионы от оси к внутренней поверхности капилляра и ответственная за внедрение части ионов в диэлектрик. Вследствие этого процесса объемная плотность заряда вдоль оси 0Z должна уменьшаться. А поскольку на оси капилляра сила $F_r = 0$, и ее значение с увеличением r возрастает, то смещение движущихся ионов, вызванное действием радиальной составляющей электрической силы, может быть одной из причин появления провала в интенсивности на оси пучка. В предположении, что изменение объемной плотности заряда происходит по линейному закону $\rho(r, z) = \rho_0(1 - \alpha z)$, $\alpha = const$, $\alpha > 0$ нами было получено точное решение задачи и рассчитаны компоненты поля E_{0r} и E_{0r} .

Запишем компоненту поля E_{0r} :

$$E_{or}(r_{0}, z_{0}) = 4\rho_{0} \int_{0}^{\pi/2} I_{2}(r_{0}, z_{0}, \theta) d\theta, \qquad (4)$$

$$I_{2}(r_{0}, z_{0}, \theta) = (1 - \alpha z_{0})(l - z_{0}) \Big[I_{2}^{11}(l, R, r_{0}, z_{0}, \theta) + I_{2}^{12}(l, R, r_{0}, z_{0}, \theta) \Big] +$$

$$+ \frac{\alpha}{2} \Big[I_{2}^{13}(l, R, r_{0}, z_{0}, \theta) - I_{2}^{13}(0, R, r_{0}, z_{0}, \theta) \Big] + (1 - \alpha z) z_{0} \Big[I_{2}^{11}(0, R, r_{0}, z_{0}, \theta) + I_{2}^{12}(0, R, r_{0}, z_{0}, \theta) \Big] +$$

$$I_{2}^{11} = \cos 2\theta \cdot \ln \Bigg[\frac{R + r_{0} \cos 2\theta + \sqrt{G}}{r_{0} \cos 2\theta + \sqrt{G_{0}}} \Bigg], \quad G_{0} = r_{0}^{2} + (l - z_{0})^{2}, \quad G = R^{2} + r_{0}^{2} + 2r_{0}R \cos 2\theta + (l - z_{0})^{2},$$

$$I_{2}^{12} = -\frac{\sin 4\theta}{|l - z_{0}|} \Bigg\{ \arctan \left[\frac{(R + r_{0} \cos 2\theta)|l - z_{0}|}{r_{0} \sin 2\theta \sqrt{G}} \right] - \arctan \left[\frac{\cos 2\theta|l - z_{0}|}{\sin 2\theta \sqrt{G_{0}}} \right] \Bigg\} +$$

$$+ \frac{r_{0} \cos 4\theta}{|l - z_{0}|} \ln \Bigg[\frac{(\sqrt{G} + |l - z_{0}|)(\sqrt{G_{0}} - |l - z_{0}|)}{(\sqrt{G} - |l - z_{0}|)} \Bigg]$$

$$I_{2}^{13} = (R \cdot \cos 2\theta + r_{0}(3\sin^{2} 2\theta - 1))\sqrt{G} - r_{0}(3\sin^{2} 2\theta - 1)\sqrt{G_{0}} +$$

$$+ \cos 2\theta \cdot (((l - z_{0})^{2} + 3r_{0}^{2} \sin 2\theta) \ln \Bigg[\frac{r_{0} \cos 2\theta + \sqrt{G_{0}}}{R + r_{0} \cos 2\theta + \sqrt{G_{0}}} \Bigg]$$

Аналогичным образом представляется компонента $E_{0z}(r_0, z_0)$.

Оценки показывают, что для протонов с энергией 200кэВ при значениях $\rho_0 = 5 \cdot 10^{-4} K_n / M^3$, l = 0,15 M, $R = 10^{-4} M$ за время прохождения ими капилляра протоны могут смещаться на расстояние порядка радиуса капилляра.

- [1]. Focusing of MeV ion beams by means of tapered glass capillary optics/ T. Nebiki [et.al.] // Y. Vac. Sci. Technol. 2003. A 21(5), Sep/Oct. p.1671 1674.
- [2]. Транспортировка и фокусировка пучков заряженных частиц с помощью диэлектрических каналов/ Г.П. Похил [и др.]// Изв. РАН, серия физическая. – 2006. – Т.70, №6. – С. 828 – 833.

УДК 53

Н. А. Аржанова¹, М. И. Маковийчук², А. В. Проказников²

ФОРМИРОВАНИЕ ФРАКТАЛЬНЫХ ПОРИСТЫХ КЛАСТЕРОВ В КРЕМНИИ

¹ Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова, ул. Советская, 14, 150000 Ярославль, Россия

<u>natarzhanova@mail.ru</u>

² Ярославский филиал Физико-технологического института РАН, ул. Университетская, 21, 150007 Ярославль, Россия <u>prokaznikov@mail.ru</u>

В работе основе компьютерного моделирования на И анализа экспериментальных результатов продемонстрировано, что существуют режимы порообразования в системе электролит-кремний, управляемые доставкой дырок к поверхности. Построена последовательная компьютерная модель, описывающая формирование пористых кластеров в полупроводниковых кристаллах кремния, которая учитывает как доставку носителей заряда к поверхности, протекание электрохимических реакций на границе кремния с электролитом, так и изменение электрического потенциала в системе при изменении конфигурации границы кристалла с электролитом. Показано, что в этом случае существует режим, связанный с транспортом дырок, который описывается уравнениями, масштабноинвариантными по отношению к аффинным преобразованиям пространственных и временных переменных. Пористые кластеры, сформированные в подобных режимах обладают свойством фрактального самоподобия.

Движение случайно блуждающей дырки при наличии потенциала различной природы моделировалось на основе следующего уравнения:

$$d\vec{r}/dt = \vec{U}(\vec{r},t), \quad \vec{r}(t_0) = \vec{r}_0,$$
 (1)

где $\vec{U}(\vec{r},t) = \vec{u}_f(\vec{r},t) + \vec{u}_t(\vec{r},t), \vec{u}_f(\vec{r},t)$ – детерминированная компонента поля скоростей, связанная с внешним приложенным потенциалом, $\vec{u}_t(\vec{r},t)$ – случайная компонента поля скоростей, зависящая от температуры кремниевой подложки, \vec{r}_0 - начальное положение блуждающей частицы.



Рисунок 1. Двумерный кластер, полученный моделированием, и соответствующие эквипотенциальные линии электрического поля (слева), структура пористого кластера (справа).



Рисунок 2. Результаты вычисления фрактальной размерности для двумерных фрактальных структур $D_f = 1.417$ (слева) и корреляционной размерности $D_{cor} = 1.471$ (справа) и соответствующие фрактальные структуры (вставки).

Новое положение частицы рассчитывается по формуле:

$$\vec{r}(t+\Delta t) = \vec{r}(t) + (\vec{u}_f + \vec{u}_t)\Delta t, \qquad (2)$$

которая является формальным решением уравнения (1), причем $\vec{r}(t)$ представляет собой положение частицы на предыдущем шаге, Δt – шаг по времени.

Особое внимание уделено анализу самоподобных преобразований управляющих процессами уравнений. Анализ автомодельных решений уравнения типа уравнения Фоккера-Планка позволяет понять природу формирования фрактальных пористых кластеров в кремнии. Процессы самоорганизации, ведущие к формированию фрактальных пористых кластеров, происходят в диапазоне параметров $E^{clust} > E^{ext}$, когда граница раздела полупроводник/диэлектрик является эквипотенциальной поверхностью и распределение заряда на ней происходит пропорционально кривизне поверхности. Это достигается хорошей проводимостью электролита и отсутствием поверхностно-активных добавок в нем. Параметр напряженности внешнего поля E^{ext} является внешним для рассматриваемой системы и не масштабируется в процессах самоорганизации внутри самой системы, а контролируется извне.

В этом случае фрактального режима формирования пористых кластеров процессы формирования пор идут преимущественно вблизи концов пор. Полученные на основании наших расчетов значения фрактальных размерностей двумерных кластеров $D_f \leq 1.5$ занимают промежуточное значение между моделями пробоя диэлектриков $D_f = 4/3 = 1.33$ и моделью агрегации, ограниченной диффузией $D_f = 5/3 \sim 1.7$. Значение фрактальной размерности в модели вязких пальцев составляет для сравнительно небольших кластеров $D_f = 1.3 \pm 0.1$, тогда как для развитых кластеров в радиальной геометрии получены значения $D_f = 1.7 \pm 0.05$. Значение фрактальной размерности $D_f \approx 2.39$ для случая трехмерных кластеров в нашей модели хорошо согласуется с экспериментально измеренным посредством атомно-силовой микроскопии значением $D_f = 2.36 - 2.47$.

УДК 535.37:661.8...552 М. В. Артемьев¹, А. В. Прудников¹, М. В. Ермоленко², Л. И. Гуринович^{2*}, С. В. Гапоненко²

ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИЙ ОТКЛИК КВАНТОВОРАЗМЕРНЫХ НАНОПЛАСТИН СЕЛЕНИДА КАДМИЯ

¹ НИИ физико-химических проблем Белорусского государственного университета, ул. Ленинградская, 14, 220030 Минск, Беларусь <u>m_artemyev@yahoo.com</u> ² Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь gphms@imaph.bas-net.by

В данной работе изучен электрооптический отклик в спектрах поглощения полупроводниковых квантоворазмерных нанопластин селенида кадмия и оценена его амплитуда относительно отклика в однотипных квантовых точках и наностержнях.

Методами коллоидной химии синтезированы нанопластины трёх различных размеров — 15×25, 15×20 и 15×30 нм, и толщиной — 1.52, 1.82 и 2.13 нм, что соответствует 4, 5 и 6 монослоям молекул CdSe [1]. Наночастицы помещались в тонкую (30–40 мкм) плёнку полимера на основе полималеинового ангидрида (ПМА) между двумя прозрачными электродами из оксидов индия и олова (ITO), на которые подавалось внешнее электрическое напряжение.

В спектрах поглощения нанопластин (рис. 1) наблюдаются два экситонных пика, формируемые электронными переходами с участием лёгких (коротковолновый пик) и тяжёлых (длинноволновый пик) дырок.



Рис.1. Графики оптической плотности **D** и изменения плотности **ΔD** нанопластин CdSe с размерами 15×25×1.52 нм при наложении внешнего электрического поля. Экситонный пик тяжёлых дырок – 460 нм, лёгких дырок – 430 нм

Из анализа спектров поглощения вблизи экситонного пика тяжёлой дырки (длина волны для трёх типов нанопластин, соответственно, 460, 515 и 550 нм) установлено, что характер зависимости модуляции поглощения наночастиц от величины напряжённости электрического поля в диапазоне 0 – 125 кВ/см близок к квадратичному

и хорошо согласуется с аналогичной зависимостью для полупроводниковых квантовых точек и наностержней [2], известной как квантоворазмерный эффект Штарка (QCSE). Однако амплитуда штарковского эффекта в нанопластинах селенида кадмия оказалась при тех же условиях на порядок большей, чем в аналогичных квантовых точках и наностержнях с соответствующей энергией оптического перехода в экситонном пике. На рис. 2 представлен график зависимости отклика образца с нанопластинами CdSe, обладающими наибольшим эффектом размерного квантования (4 монослоя молекул CdSe), от напряженности прикладываемого поля в пиках экситонной полосы поглощения обоих типов дырок — легких и тяжелых.



Рис.2. График зависимости относительного электрооптического отклика образца с нанопластинами CdSe размером 15×25×1.52 нм от напряженности Е поля в пиках полосы экситонного поглощения тяжелых (**HH**) и легких (**LH**) дырок

В силу несимметричности формы нанопластин и неэквивалентности условий пространственного ограничения движения носителей заряда в планарном и поперечном направлениях, внешнее электрическое поле может оказывать различное кулоновское действие на пластины с разной пространственной ориентацией. Исследуя поглощение нанопластин в поляризованном свете, было установлено, что электрооптический отклик нанопластин имеет частичную поляризационную зависимость.

Полученные результаты могут быть использованы для создания новых оптоэлектронных приборов, устройств передачи и обработки оптической информации, индикаторов и электронных табло, построенных на основе электрически управляемых полупроводниковых квантоворазмерных структур.

- Achtstein A. W. Electronic Structure and Exciton-Phonon Interaction in Two-Dimensional Colloidal CdSe Nanosheets. / A. W. Achtstein, A. Schliwa, A. Prudnikau, M. Hardzei, M. V. Artemyev, Ch. Thomsen, and U. Woggon // Nano Lett. – 2012. – V. 12. – P. 3151.
- [2] Гуринович Л. И. Люминесценция квантоворазмерных нанокристаллов и наностержней селенида кадмия во внешнем электрическом поле. / Л. И. Гуринович, А. А. Лютич, А. П. Ступак, С. Я. Прислопский, Е. К. Русаков, М. В. Артемьев, С. В. Гапоненко, Х. В. Демир // ФТП. – 2009. – Т. 43. – С. 1045.

УДК 666.654

А. И. Клындюк¹, И. В. Мацукевич¹, Н. С. Красуцкая¹, Л. Е. Евсеева², С. А. Танаева², Е. А. Чижова¹

ЭФФЕКТИВНЫЕ ТЕРМОЭЛЕКТРИКИ НА БАЗЕ СЛОИСТЫХ КОБАЛЬТИТОВ

¹ Белорусский государственный технологический университет, ул. Свердлова, 13^A, 220006 Минск, Беларусь

kai@bstu.unibel.by

² Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларуси, ул. П. Бровки, 15, 220072 Минск, Беларусь

Тепло, выделяющееся в окружающую среду при работе промышленных предприятий и автотранспорта, может быть непосредственно и эффективно конвертировано в электроэнергию с помощью термоэлектрогенераторов (ТЭГ). Для создания ТЭГ необходимы материалы, характеризующиеся одновременно высокими значениями электропроводности и термо-ЭДС и низкой теплопроводностью, а для ТЭГ, функционирующих при высоких температурах на воздухе, также термической стабильностью и устойчивостью к окислению атмосферным кислородом.

Комплексом указанных свойств обладают слоистые кобальтиты (Na_xCoO₂, Ca₃Co₄O_{9+ δ}, Bi₂Sr₂Co₂O_{9- δ} и др.), причем функциональные свойства этих оксидов могут быть значительно улучшены при частичном замещении катионов в их структуре [1].

работе изучено В данной влияние частичного замещения кальция редкоземельными элементами (РЗЭ) и кобальта 3*d*- и другими металлами на структуру и свойства твердых растворов Ca_{2.8}Ln_{0.2}Co₄O_{9+ δ} (Ln – P3Э) и Na_{0.55}Co_{0.9}M_{0.1}O₂ (M – 3dметалл, Mo, W, Bi, Pb). Керамические образцы $Ca_{2.8}Ln_{0.2}Co_4O_{9+\delta}$ получали цитратным [2], а Na_{0.55}Co_{0.9}M_{0.1}O₂ – твердофазным методом [3]. Идентификацию образцов и определение параметров их кристаллической структуры осуществляли при помощи рентгенофазового анализа (РФА). Тепловое расширение, теплопроводность (λ), электропроводность (σ) и термо-ЭДС (S) керамики изучали на воздухе в интервале температур 300–1100 К по методикам, описанным в [2, 3]. Электронный ($\lambda_{3\pi}$) и решеточный ($\lambda_{\text{реш}}$) вклады в теплопроводность образцов определяли по формулам $\lambda = \lambda_{23\pi} + \lambda_{\text{рени}}, \lambda_{2\pi} = \sigma LT (L - число Лоренца, L = 2.45 \cdot 10^{-8} \text{ Вт-Ом-K}^{-2}).$ Значения фактора мощности (P) и безразмерного показателя термоэлектрической добротности (ZT) керамики находили по уравнениям $P = S^2 \sigma$, $ZT = P/\lambda$.

Полученные материалы были однофазными, в пределах погрешности РФА, и имели структуру несоразмерного Ca₃Co₄O_{9+δ} [4] и гексагонального γ -Na_xCoO₂ [5] с параметрами кристаллической структуры a = 0.4843-0.4879, $b_1 = 0.4555-0.4574$, $b_2 = 0.2812-0.2835$, c = 1.083-1.093 нм, $\beta = 98.36-98.77^\circ$ и a = 0.2820-0.2852, c = 1.089-1.104 нм для твердых растворов Ca_{2.8}Ln_{0.2}Co₄O_{9+δ} и Na_{0.55}Co_{0.9}M_{0.1}O₂ соответственно; при этом размеры элементарной ячейки фаз Ca_{2.8}Ln_{0.2}Co₄O_{9+δ} уменьшались при уменьшении радиуса замещающего катионы кальция катиона P3Э и были наибольшими для оксидов Ca_{2.8}La_{0.2}Co₄O_{9+δ} и Ca_{2.8}Nd_{0.2}Co₄O_{9+δ}.

Величина коэффициента линейного термического расширения изменялась в пределах (11.6–12.9)·10⁻⁶ K⁻¹ и (12.5–16.2)·10⁻⁶ K⁻¹ для слоистых кобальтитов кальция и

натрия соответственно, в целом, уменьшаясь при замещении кальция РЗЭ в Ca₃Co₄O_{9+δ} и увеличиваясь при замещении кобальта другими металлами в Na_{0.55}CoO₂.

Согласно результатам измерений электрофизических свойств, исследованные кобальтиты являются проводниками *p*-типа (*S* > 0), характер проводимости которых был полупроводниковым ($\partial \sigma / \partial T > 0$) для фаз Ca_{2.8}*Ln*_{0.2}Co₄O_{9+δ} и металлическим ($\partial \sigma / \partial T < 0$) для производных кобальтита натрия. Значения фактора мощности слоистых кобальтитов возрастали при увеличении температуры и для исследованных твердых растворов Ca_{2.8}*Ln*_{0.2}Co₄O_{9+δ} и Na_{0.55}Co_{0.9}*M*_{0.1}O₂ были соответственно в 1.5–3 и 2–6.2 раза выше, чем для незамещенных фаз Ca₃Co₄O_{9+δ} и Na_{0.55}CoO₂, достигая наибольших значений для составов Ca_{2.8}Er_{0.2}Co₄O_{9+δ} (*P*₁₁₀₀ = 0.29 мBт/(м·K²)) и Ca_{2.8}Tb_{0.2}Co₄O_{9+δ} (*P*₁₁₀₀ = 0.27 мBт/(м·K²)), Na_{0.55}Co_{0.9}Cr_{0.1}O₂ (*P*₁₁₀₀ = 0.91 мBт/(м·K²)) и Na_{0.55}Co_{0.9}Bi_{0.1}O₂ (*P*₁₁₀₀ = 1.22 мBт/(м·K²)), что, главным образом, определяется высокими значения и термо-ЭДС этих образцов.

Теплопроводность керамики Ca_{2,8}Ln_{0,2}Co₄O_{9+δ} изменялась в пределах 0.70–0.85 Вт/(м·К), заметно уменьшаясь при частичном замещении кальция РЗЭ вследствие уменьшения $\lambda_{\text{реш}}$, которая для твердых растворов Ca_{2,8}Ln_{0,2}Co₄O_{9+δ} была на 3–15% меньше, чем для незамещенной фазы Ca₃Co₄O_{9+δ}. Значения λ кобальтитов Na_{0,55}Co_{0,9}M_{0,1}O₂ были несколько выше (0.8–1.1 Вт/(м·К)) и также уменьшались при замещении кобальта другими металлами, главным образом, за счет уменьшения $\lambda_{\text{реш}}$, которая для твердых растворов Na_{0,55}Co_{0,9}M_{0,1}O₂ была на 9–20% ниже, чем для Na_{0,55}CoO₂.

Параметр Иоффе (*ZT*) исследованных оксидов увеличивался с ростом температуры и для твердых растворов Ca_{2.8}*Ln*_{0.2}Co₄O_{9+ δ} и Na_{0.55}Co_{0.9}*M*_{0.1}O₂ был значительно выше, чем для незамещенных кобальтитов кальция и натрия. Максимальные значения *ZT* при температуре 1100 К, по оценке, составляют ≈0.4 для фаз Ca_{2.8}*Ln*_{0.2}Co₄O_{9+ δ} (*Ln* – Er, Tb) и 1.2 для твердого раствора Na_{0.55}Co_{0.9}Bi_{0.1}O₂, что в 4 и 1.2 раза выше, чем для незамещенных кобальтитов кальция и натрия.

Высокие значения термоэлектрических показателей (*P* и *ZT*) полученных нами кобальтитов позволяют рассматривать их в качестве эффективных термоэлектрических материалов для высокотемпературной термоэлектроконверсии.

Работа выполнена в рамках ГПНИ «Функциональные материалы и технологии, наноматериалы», подпрограмма «Кристаллические и молекулярные структуры» (задание 1.02), а также при поддержке Министерства образования Республики Беларусь и Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант X12M–039).

- [1] Oxide Thermoelectrics. Research Signpost / ed. by K. Koumoto, I. Terasaki, N. Murayama, Trivandrum, India. 2002. 255 p.
- [2] Мацукевич И. В. Влияние метода получения на микроструктуру и физико-химические свойства кобальтитов (Ca,Bi)₃Co₄O_{9+δ} / И. В. Мацукевич, А. И. Клындюк // Труды БГТУ, №3: Хим. и технол. неорг. мат. и в-в. – Вып. XX. – 2012. – С. 42–47.
- [3] Красуцкая Н. С. Влияние содержания натрия на свойства слоистого кобальтита Na_xCoO₂ (0,53 ≤ x ≤ 0,98) / Н.С. Красуцкая, А.И. Клындюк, Л.Е. Евсеева, С.А. Танаева // Весці НАН Б. Сер. хім. наук. 2012. №1. С. 11–15.
- [4] Masset A. C. Misfit-layered cobaltite with an anisotropic giant magnetoresistance: Ca₃Co₄O₉ // A. C. Masset [et al.] // Phys. Rev. B. – 2000–I. – V. 62. – № 1. – P. 166–175.
- [5] Fouassier C. Sur de nouveaux bronzes oxygénés de formule Na_xCoO₂. Le système cobaltoxygène-sodium // C. Fouassier [et al.] // J. of Solid State Chem. – 1973. – Vol. 6. – P. 532–537.

УДК 532.783

В. И. Лапаник¹, В. С. Безбородов¹, С. Н. Тимофеев¹, В. Хаазе²

БЫСТРОДЕЙСТВУЮЩИЙ ЭФФЕКТ НА ОСНОВЕ ХИРАЛЬНЫХ СТРУКТУР

¹ Научно-исследовательское учреждение «Институт прикладных физических проблем имени А. Н. Севченко» БГУ, ул. Курчатова, 7, 220045 Минск, Беларусь <u>vlapanik@yahoo.com</u>

² Технический университет, D-64287, Дармштадт, Германия

Проблема уменьшения времени оптического отклика в современных дисплеях, основанных на нематических жидких кристаллах, для достижения качественной динамической картинки до сих пор полностью не решена. Для решения данной проблемы нами были проведены комплексные исследования физико-химических и электрооптических свойств хиральных сред с различной силой кручения и различными вязко-упругими свойствами [1].

Изначально мы предположили, что вязкие хиральные соединения могут помочь решить проблему «обратного потока» [2, 3] в средних слоях дисплеев, заправленных разработанными нами хирально-нематическими композициями, что приведет к существенному улучшению времен переориентации молекул, а время задержки переключения будет равно нулю. Для определения граничных условий существования данного эффекта были синтезированы и исследованы следующие хиральные соединения:



где n = 4-8; k = 0-2; Y, X = Cl, F, CH₃; R – хиральный фрагмент.

В качестве нематической матрицы мы использовали собственные композиции, разработанные на основе наших соединений (ЛВ-15, ЛВ-27 и ЛВ-30), а также коммерческие композиции (ZLI-4792, MLC-6657-100). Для исследования поведения композиций под воздействием электрического поля, были изготовлены ячейки с планарной ориентацией (параллельной и антипараллельной) и 90° - твист ячейки с различной толщиной зазора (2 - 10 мкм). Для формирования ориентирующих слоев были использованы коммерческие полиамиды, нейлоны с различными углами преднаклона.

Полученные нами экспериментальные данные представленные в таблицах 1 и 2 подтвердили правильность наших рассуждений. Мы смогли улучшить времена переключения (особенно время выключения) в 10 - 15 раз для коммерческих композиций (см. табл.1), а на основе наших композиций мы смогли получить суммарное время переключения 0,9 мс, что превосходит мировые аналоги в 10 раз (см. табл.2).

	Пороговое	Напряжение	Время	Время	
	напряжение	насыщения (В)	включения	выключения	
	(B)		(мс)	(мс)	
MLC-6657-	1.8	2.7	3.1	13.6	
100					
без добавки					
MLC-6657-	2.2	2.5	0.5	0.6	
100					
с добавкой					
ZLI-4792	2.1	3.0	5.8	19.7	
без добавки					
ZLI-4792	2.7	3.1	0.9	1.3	
с добавкой					

Таблица 2. Электрооптические параметры коммерческих композиций без хиральных добавок и с хиральными добавками.

Таблица 2. Электрооптические параметры композиций разработанных нами.

	V_{10}	V_{90}	$\tau_{\scriptscriptstyle BK\Pi}$	$ au_{\mathrm{B}\mathrm{b}\mathrm{I}\mathrm{K}\mathrm{J}}$
	(B)	(B)	(мс)	(мс)
LB-15	1.5	2.1	0.4	1.0
LB-27	2.0	2.1	0.2	0.9
LB-30	1.7	1.9	0.2	0.7

Исследования показали, что для достижения быстрых времен переориентации молекул необходимо оптимизировать следующие параметры: угол преднаклона ориентирующих слоев, силу кручения и вязкость хиральных соединений, отношение между толщиной ячейки и шагом спирали (d/P_0), угол закрутки ψ , константы упругости и оптическую анизотропию базовой нематической композиции. На основе экспериментальных данных нами предложена программа для расчета переориентации молекул в зависимости от приведенных выше параметров. Как результат были оптимизированы основные параметры для ячеек с планарной ориентацией и для 90° - твист ячеек

- [1] Lapanik V. Shock-free ferroelectric liquid crystal displays with high optical contrast. / V. Lapanik, V. Bezborodov, S. Timofeev, W. Haase // Applied Physics Letters. – 2010. – V. 97. – P. 251913.
- [2] F. Brochard. Backflow effects in nematic liquid crystals.// Mol.Cryst.Liq.Cryst. 1973. V. 23. – P.51.
- [3] P. Oswald. Backflow-induced asymmetric collapse of disclination lines in liquid crystals / J. Ignes-Mullol // Phys. Rev. Lett. – 2005. – V.95. – P. 027801.

УДК 532.64:539.211

И.С. Ташлыков, А.И. Туровец МОРФОЛОГИЯ И СМАЧИВАЕМОСТЬ ПОВЕРХНОСТИ СИСТЕМЫ Мо/СТЕКЛЯННАЯ ПОДЛОЖКА, ФОРМИРУЕМОЙ МЕТОДОМ SIAD

Белорусский государственный педагогический университет им. М. Танка, ул. Советская, 18, 220050 Минск,Беларусь tashl@bspu.unibel.by

В работе приведены результаты изучения Мо покрытия, осаждаемого в качестве тыльного контакта тонкопленочных солнечных элементов на стеклянную подложку методом ионно-ассистированного нанесения покрытия в условиях самооблучения (SIAD). SIAD влияет на кристаллическую структуру, плотность упаковки, адгезию, гладкость поверхности получаемой пленки, что позволит повысить качество тонкопленочных устройств [1]. Эта работа является этапом исследований начальной стадии процесса роста пленки, наносимой на стекло методом SIAD, при различных дозах облучения до развития сплошной пленки, влияние дозы облучения во время осаждения Мо на топографию и смачиваемость тонких пленок.

Покрытия на основе Мо наносились на стекло методом SIAD с использованием резонансного ионного источника вакуумной электродуговой плазмы. Ускоряющее напряжение составляло 10 кВ, облучение прекращалось при достижении интегральных потоков ионов $1,2\cdot10^{16}$, $3,2\cdot10^{16}$, $5,2\cdot10^{16}$, $8,1\cdot10^{16}$, $1,1\cdot10^{17}$ см⁻². Морфология поверхности систем изучалась, используя атомно-силовую микроскопию в контактном режиме (атомно-силовой микроскоп NT-206, зонды CSC21). Данные о гидрофильности поверхности образцов получали, измеряя равновесный краевой угол смачивания (РКУС) на установке, представленной в [2].

Параметры	Исх. стекло	Интегральный поток F, ат/см ²				
		$1,2.10^{16}$	$3,2 \cdot 10^{16}$	5,2·10 ¹⁶	8,1·10 ¹⁶	$1,1.10^{17}$
R _a , нм	2.2	1.8	2.0	2.7	2.3	2.3
% образования покрытия		56.9	33.6	34.5	48.1	96.5
Разность высот, нм		7.2	6.0	4.6	3.0	3.0
Θ, °	25.1	62.8	67.4	69.7	60.8	56.7

Таблица Параметры морфологии и смачиваемости.

Нами наблюдались первоначальные этапы формирования тонкой пленки на стекле. Согласно данным качественного описания эволюции тонких пленок, синтезированных на аморфных и поликристаллических подложках [3], мы наблюдаем следующие шаги в процессе роста пленки: появление островков роста, столкновение и слияние островков, развитие непрерывного структуры. Построив гистограммы распределения высот и сечения снимков топографии на наиболее часто встречаемых высотах, мы находим, насколько сплошным является покрытие и его толщину.

Оценивая % образования покрытия, мы видим снижение с 56,9% до 33,6% на начальном этапе формирования покрытия. Это возможно в случае, когда наблюдаемая разноуровневая поверхность на ACM снимках отображает не поверхность покрытия и

подложки, а только поверхность покрытия, осаждаемого неравномерно на различных участках поверхности на начальном этапе формирования покрытия. Т.е. на ACM снимках мы видим не поверхность подложки (более низкий уровень), а поверхность ранее осажденного покрытия. Об этом свидетельствует, в частности, снижение разности высот с 7,2 нм до 3 нм при увеличении интегрального потока и соответственно времени нанесения покрытия.

Средняя шероховатость (R_a) стекла незначительна и составляет 2,2 нм. Наблюдаемая при этом картина рельефа поверхности представляет собой ансамбль «холмов» схожей высоты. Зависимость R_a от величины интегрального потока имеет вид, схожий с ранее полученными результатами исследования влияние облучения графита ионами Xe⁺ на структуру, элементный состав, топографию и смачиваемость поверхности образцов [4].

После нанесения покрытия характер топографии поверхности заметно меняется. В отличие от исходного образца значительно снижается количество небольших неоднородностей, поверхность подложки становиться более гладкой. Рост шероховатости с увеличением интегрального потока обусловлен разностью высот покрытия и подложки, а также многочисленностью островков зарождения покрытия, достигая максимума в 2,71 нм при интегральным потоком ионов 5,2·10¹⁶ ион/см². При дальнейшем увеличении времени нанесения, а значит, увеличении интегрального потока ионов, площадь покрытия растет, заполняя всю поверхность стекла, что приводит к снижению шероховатости до 2,3 нм.

Измерения равновесного краевого угла смачивания дистиллированной водой поверхности исходного стекла (25,1°) и стекла, модифицированного ионноассистированным нанесением Мо, (56,7° – 67,4°) выявили значительное влияние модифицирования и меньшее влияние интегрального потока на значение РКУС. Следовательно, нанесением Мо-содержащего покрытия на стекло с разными интегральными потоками можно управлять смачиваемостью его поверхности водой.

Изменение величины РКУС с ростом интегрального потока имеет зависимость, качественно подобную дозовой зависимости величины шероховатости.

Три фактора влияют на смачиваемость поверхности в этом случае: химический состав материала (осаждение Мо-пленки), гетерогенность состава поверхности (% образования покрытия) и морфологии поверхности (шероховатость поверхности).

- [1] Tashlykov I.S. Elastomer surface modification by means of SIAD of metal-based layers / I.S. Tashlykov, A.V. Kasperovich, G. Wolf // Surf. Coat. Techn. – 2002. – V. 158–159. – P. 498–502.
- [2] Ташлыков И.С. Элементный состав, топография и смачиваемость поверхности графита, модифицированного ионно-ассистированным осаждением покрытий / И.С. Ташлыков, С.М. Барайшук // Известия ВУЗов. Порошковая металлургия и функциональные покрытия. – 2008. – №1. – С. 30–35.
- [3] Petrov I. Microstructural evolution during film growth / I. Petrov [et al] // J. Vac. Sci. Technol. 2003. A 21.5. P. 117–128.
- [4] Tashlykov I.S. Influence of Xe⁺ Irradiation on Topography and Wettability of Graphite Surface / I.S. Tashlykov, A.I. Turavets, P. Zukowski // Acta Physica Polonica A. 2011.
 №1. P. 115–117.

Физика плазмы

УДК 535:621.373.826

В. С. Бураков, А. В. Буцень, М. И. Неделько, А. А. Невар, Н. В. Тарасенко

ПЛАЗМЕННО-ЛАЗЕРНЫЕ МЕТОДЫ ДЛЯ ГЕНЕРАЦИИ НАНОЧАСТИЦ В ЖИДКОСТЯХ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>n.tarasenko@ifanbel.bas-net.by</u>

Получение наноразмерных частиц заданного химического состава, морфологии и структуры имеет решающее значение для достижения их уникальных свойств, привлекательных в различных практических приложениях, в том числе в микроэлектронике, медицине, биологии, гетерогенном катализе и т.д. В последние годы успешно развиваются плазменно-лазерные методы синтеза наночастиц [1], основанные на процессах лазерной абляции и электрических разрядах в жидкофазных средах. Метод лазерной абляция отличается простотой реализации, отсутствием побочных примесей в конечном продукте, может быть применен для большого числа материалов как проводящих, так и непроводящих, полупроводников, а также тугоплавких материалов. Второй способ, базирующийся на использовании дуговых и искровых разрядов в жидкостях и газах, перспективен для получения наноразмерных частиц композитного состава. Достоинством электроразрядного метода синтеза наночастиц является возможность управления параметрами конечных продуктов путем вариации режимов разряда, достаточно высокая производительность, несложный процесс подготовки исходных материалов и возможность масштабирования процесса синтеза. Дополнительные преимущества можно получить при использовании оптимальных режимов совместного воздействия потоков лазерного излучения и импульсных электрических разрядов на распыляемый материал, обеспечивающих эффективное инициирование разряда и модификацию размеров, структуры и состава формируемых частиц.

Возможности плазменно-лазерных методов для синтеза металлических (Au, Ag, Gd, Co, Mo, Ni), биметаллических (Ag-Cu, Ag-Au) наночастиц, а также наночастиц оксидов (ZnO, CuO, Gd_2O_3 :Tb³⁺), карбидов (WC, TiC) и силицидов (GdSi) вместе с некоторыми примерами применения синтезированных материалов обсуждаются в настоящей работе. В качестве примеров рассматриваются результаты решения следующих задач: а) синтез магнитных наночастиц на основе наноразмерных соединений гадолиния для биомедицинских приложений; б) получение легированных нанокристаллов ZnO для создания полупроводниковых лазеров и светодиодов в ультрафиолетовой (УФ) области спектра; в) лазерно-индуцированная модификация синтезированных наночастиц; г) разработка методов оптической диагностики для оптимизации процесса образования наноразмерных частиц в растворах, д) создание экспериментального образца плазменно-лазерного реактора для генерации наночастиц.

Результаты наших работ по плазменно-лазерному синтезу наночастиц обобщены в табл.1, 2. Приведены типичные ПЭМ-изображения наночастиц золота

синтезированных методом лазерной абляции и наночастиц карбида вольфрама, полученных при электрическом разряде в этаноле.

	Мишен ь	Жидкость	Состав наночастиц	Средний размер, нм(ТЕМ)	
1	2	3	4	5	
1	Ag	acetone	Ag	10±5	
2	Au	fructose aqueous solution	Au	5±2	
3	Au	glucose aqueous solution	Au	5±2	
4	Cu	acetone	Cu	10±2	č .
5	Cu	SDS	Cu	7-10	↓ + 100 nm
6	Zn	water	ZnO	30-40	ПЭМ изображения наночастиц золота, полученных методом лазерной абляции
7	ZnO	water	ZnO	15-20	воде

Таблица 1. Параметры наночастиц синтезированных методом лазерной абляции в жидкостях

Таблица 2. Условия электроразрядного синтеза и характеристики синтезированных наночастиц

Тип разряда	Элект роды W : С	Жидкость	Производи тельность мг/мин	Средний диаметрг, нм	
дуга	w.c	51411051	0.2		
искра	W : C	этанол	2.5	7 нм (сферыl)	
искра	Cu:Cu	CuCl ₂ раствор	39.2	15 нм (сферы)	
искра	Cu: C	СuCl ₂ раствор	5.9	5-7 нм (сферы)	
дуга	Zn: Zn	вода	32	нанопроволоки : диаметр 10-15 нм длина 150- 200 нм	\$100 900 100 100 100
искра	Zn: Zn	вода	41	нанопроволоки : диаметр 10 нм длина 150 нм	ПЭМ изображения наночастиц WC, синтезированных в искровом разряде в этаноле

[1] Тарасенко Н.В., Буцень А.В. Лазерный синтез и модификация композитных наночастиц в жидкостях // Квантовая электроника. – 2010. - Т. 40. - С. 986 – 1003.
УДК 539.2

В.В.Кабанов¹, А.Р.Мкртчян², В.П.Кривобоков³, А.С.Абраамян², В.В.Ажаронок¹

ВОЗМОЖНОСТЬ СОЗДАНИЯ ИНТЕНСИВНЫХ МОНОХРОМАТИЧЕСКИХ ИСТОЧНИКОВ СВЕТА НА ОСНОВЕ АКУСТОПЛАЗМЫ НИЗКОГО ДАВЛЕНИЯ

¹Институт физики им.Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр.Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

<u>v.kabanov@ifanbel.bas-net.by</u> ²Институт прикладных проблем физики НАН Армении, Гр.Нерсисяна, 25, 0014, Ереван, Армения <u>malpic@sci.am</u> ³Физико-технический институт, пр.Ленина, 2а, 634050, Томск, Россия

krivobokov@tpu.ru

В настоящем сообщении рассматривается возможность создания интенсивных монохроматических источников света на основе люминесценции азотной акустоплазмы в области давлений 0,05-4 torr, когда обычные звуковые волны практически не генерируются, но акустоплазменные явления сохраняются из-за перераспределения зарядов по законам акустоплазмы и роль звуковых волн играет распределение зарядов.

Эксперименты были проведены на специально изготовленных разрядных трубках- модулях, разработанных для многомодульного CO₂-лазера (в рамках договора БРФФИ-ГКНРА). Диаметр разрядного канала– 5 mm, длина разрядного промежутка 250 mm, использовалось водяное охлаждение трубок.

На торцах модуля приклеены стеклянные окна. Излучение из разряда по световоду поступало на компьютерный спектрометр типа Ocean Optics 2000PC.

На рис.1 приведены характерные спектры излучения плазмы, содержащей азот $(CO_2:N_2:He=1:1:8)$ при общем давлении смеси 2 torr, без акустического возмущения (рис.1а) и в акустоплазменном состоянии при модуляции разрядного тока на частоте 10 kHz. Как видно из рис.1, в акустоплазменном режиме выделяется узкая (ширина 0,17nm) линия излучения 654,5 nm (ППС азота), более 10 раз интенсивнее. В чистом азоте в акустоплазменном режиме интенсивность этой же линии возрастает в 3,2 раза.

Эксперименты показали, что энергия спектра для данной колебательно вращательной полосы за пределами выделенной линии, как при наличии, так и при отсутствии акустоплазменного режима, одинакова. Энергия спектра в выделенной линии в акустоплазменном режиме увеличиваается в 5 раз, а интенсивность- в 10 раз.

По- видимому, происходит селективное возбуждение одного из колебательновращательных уровней молекулы азота под влиянием сформированной акустической сверхрешетки, в результате создается связанная система электронов, уменьшающая число степеней свободы в акустоплазме.



Рис.1. Спектр излучения акустоплазмы CO₂-лазера. а) без акустического возмущения b) в акустоплазменном состоянии, при частоте модуляции f=10kHz

Работа выполнена при частичной поддержке гранта в рамках договора БРФФИ-ГКНРА.

УДК 537.87

О.Федотова¹, О.Хасанов¹, Т.Смирнова²

ФЕМТОСЕКУНДНЫЕ ВИХРЕВЫЕ ИМПУЛЬСНЫЕ ПУЧКИ ВЫСОКОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ В СРЕДАХ С ФОКУСИРУЮЩИМИ И ДЕФОКУСИРУЮЩИМИ НЕЛИНЕЙНОСТЯМИ

¹НПЦ НАНБ по материаловедению, 19 ул. Бровки, Минск 220072 ²Международный государственный экологический университет им. А.Д.Сахарова, ул. Долгобродская, 23Минск 220009 olfe@ifttp.bas-net.by

Исследуется распространение высокоинтенсивных фемтосекундных импульсных пучков с сингулярной фазой в керровских средах при различных значениях топологического заряда т и отношения входной мощности пучка к критической для самофокусировки P_{cr} . Основные физические процессы, управляющие распространением такого вихря, есть дифракция, керровская самофокусировка, дефокусировка, вызванная плазмой, формируемой из-за процесса многофотонного поглощения (МФП) а также дисперсия групповой скорости (ДГС). Для модели используется система, состоящая из модифицированного (3 + 1) - мерного нелинейного уравнения Шредингера и кинетического уравнения для плотности свободных электронов, порождаемых световым импульсом. Вычисления основаны на полуаналитических и численных подходах. Показано, что конкуренция фокусирующей керровской и дефокусирующей плазменной нелинейностей приводят к периодической перефокусировке пучка. Впервые проанализирована роль инерционной природы формирования плазмы, обеспечивающей устойчивое распространение фемтосекундных вихрей. Исследовалась стабильность вортексного пучка к азимутальным возмущениям. Рассматривалось прохождение оптических вихрей через образец в условиях как инерционной, так и мгновенной плазменной нелинейности. Сравнение полученных результатов позволяет установить, что плазменная инерция (временная нелокальность) воздействует на стабильность вихревого импульсного пучка в среде.

Для заданной величины *m* начальные условия выбирались так, что импульсный вихревой пучок имеет форму бублика, а возмущение случайным шумом составляет 5% от его амплитуды. Для m=1 и входной мощности импульса $P_{in} \sim 9P_{cr}$ вихрь распространяется в среде с мгновенной плазменной нелинейностью на расстояния большие двух дифракционных длин $2L_{df}$ перед тем, как подвергнуться 2-3 азимутальным модуляциям. На дистанции $3L_{df}$ и больше энергия между филаментами перераспределяется, но полный угловой момент сохраняется, что может быть обусловлено вихревой структурой. Позже филаменты становятся неравными по интенсивности и некоторые из них доминируют.

Численные исследования азимутальной модуляционной неустойчивости вихрей с учетом инерционного характера плазмы подтвердили наши предположения о его стабилизирующем влиянии. Расчеты показали, что при тех же начальных условиях инерция плазмы обеспечивает устойчивость вихрей на больших расстояниях $L \sim 3.75 L_{df}$, прежде чем она станет распадаться на нити.

Вихри с большим топологическим зарядом подчиняются схожим сценариям, но на меньших расстояниях. Поведение вортексов немного отличается от сценария, описанного в [1]. В дополнение к (2m+1) интенсивным филаментам могут наблюдаться дополнительные, более слабые филаменты, которые по мере распространения сходятся к центру сингулярности, а затем постепенно исчезают.

Для более коротких длительностей импульсов, когда становится существенной воздействие ДГС, период перефокусировки изменяется вдоль оси распространения в зависимости от длительности импульса. В среде с нормальной ДГС импульс удлиняется при распространении, так как плазменная дефокусировка не компенсирует эффект дисперсии. Это приводит к увеличению периода перефокусировки. В случае аномальной ДГС можно наблюдать обратный процесс. Если керровская самофокусировка увеличивает вклад аномальной дисперсии, временная ширина импульса уменьшается и в результате импульс перефокусируется чаще в среде. Установлено, что процесс филаментации при нормальной ДГС включает переформирование временного профиля вортекса и расщепление его кольцевой структуры на три субкольца в радиальном направлении. Внешние и внутренние субкольца почти равной интенсивности все еще сохраняют первоначальную форму вихря. Изменение наблюдается в центральной части кольца «бублика». При распространении вортекса порождаются филаменты в центральном кольце, а менее интенсивные периферийные кольца исчезают

Проводился поиск решения в форме оптической пули в условиях аномальной ДГС на основании вариационного подхода.

[1] A.Vinçotte and L. Bergé, "Femtosecond Optical Vortices in Air". Phys. Rev. Lett. 95, 193901-1 -14 (2005).

УДК 543.422; 537.523/527

В.И. Архипенко, С.М. Згировский, А.А.Кириллов, Е.А.Сафронов, Л.В. Симончик

ДИАГНОСТИКА ПРОДУКТОВ КОНВЕРСИИ ВОДОРОДОСОДЕРЖАЩИХ ВЕЩЕСТВ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь kirillov@imaph.bas-net.by

В настоящее время одной из важнейших проблем энергетики является поиск альтернативных источников энергии, которые позволили бы частично отказаться от традиционных топлив таких, как бензин, керосин, метан, которые получают из нефти и природного газа. В связи с этим большое внимание уделяется разработке новых методов конверсии возобновляемых водородосодержащих веществ. Для определения энергетической эффективности конверсии, выявления вредных веществ, а также для оптимизации режимов работы конверсионных устройств необходима диагностика продуктов конверсии. Предпочтительным является метод ИК спектроскопии, позволяющий определять как состав газовой смеси, так и концентрацию в ней различных ИК-активных компонент, но этим методом невозможно определять концентрацию неполярных молекул, таких как H₂, N₂ и O₂. Поэтому он обычно дополняется хроматографией или масс-спектроскопией [1]. Однако применение хроматографов и масс-спектрометров для смесей на выходе из реактора с изменяющимся составом при атмосферном давлении и содержащих химически активные компоненты в ряде случаев представляется проблематичным.

Диагностику продуктов водородосодержащих веществ предлагается проводить методом инфракрасной абсорбционной спектроскопии в сочетании с учетом сохранения числа атомов различных элементов на входе и выходе реактора.



Рис. 1. ИК спектр поглощения газовой смеси на выходе из плазмохимического реактора

Рассмотрение ведется на примере диагностики продуктов конверсии малогабаритном этанола [2] В плазмохимическом реакторе на основе несамостоятельного тлеющего разряда атмосферного лавления [3]. Выходящая из реактора газовая смесь прокачивались через газовую кювету с окнами из германия, которая была предварительно нагрета до 90 °C с целью предотвращения конденсации паров воды и этанола, с последующей регистрацией спектров поглощения Фурье-спектрометрометром NEXUS фирмы Thermo Nicolet в диапазоне 600 - 4000 см⁻¹ (рис. 1).

Мольные доли всех ИК активных компонент продуктов конверсии (СО, СО₂, C_2H_5OH) определялись CH_{4} , C_2H_2 , H₂O И по градуировочным кривым, представляющим собой зависимости эквивалентных ширин колебательновращательных полос поглощения от мольных долей определяемых газовых компонент. Спектры поглощения СО, СО₂, СН₄, С₂Н₂ и Н₂О рассчитывались с использованием базы спектральных данных Hitran. Для этанола использовались экспериментальные спектры поглощения смеси азота и этанола.

Мольные доли водорода, азота и кислорода, определение которых с помощью ИК спектроскопии не представляется возможным, рассчитывались, учитывая содержание этанола, воды, кислорода и азота на входе в реактор и мольные доли ИК активных компонент в продуктах конверсии, определенные экспериментально. Поскольку на выходе нам известны мольные концентрации всех углеродосодержащих компонент, то возможно определить количество выходящих за одну минуту из реактора углеродосодержащих молекул, распределив между ними количество атомов углерода, содержащееся во входящей в реактор смеси. Теперь, учитывая отношение мольных концентраций воды и углеродосодержащего компонента, легко получить количество молекул воды. Далее, используя уравнения сохранения атомов водорода, кислорода и азота на входе и выходе из реактора, нетрудно вычислить количество соответствующих молекул покидающих плазменный реактор в единицу времени и также определить соответствующие мольные доли H_2 , O_2 и N_2 .

Для контроля концентрации водорода применялось специально разработанное устройство, основанное на диффузии водорода через палладиевую мембрану в предварительно откачанный объем [4]. Измеренная с помощью данного устройства мольная доля водорода находится в хорошем соответствии с вычисленной мольной долей H₂.

Как следует из вышеизложенного, точно таким же способом, как для этанола, ИК абсорбционная спектроскопия совместно с уравнениями сохранения числа атомов на входе и выходе из реактора позволяет полностью определить мольные доли, включая ИК неактивные H₂, N₂ и O₂, продуктов конверсии метанола, глицерола и ряда других биотоплив. Таким образом, представленная в работе диагностика может применяться в случае конверсии широкого круга возобновляемых водородосодержащих веществ, представляющих интерес для альтернативной энергетики.

- [1] On the use of a non-thermal plasmas reactor for ethanol stream reforming / O. Aubry [et al.]// Chemical Engineering Journal. -2005.- Vol. 106. P. 241–247.
- [2] Диагностика продуктов конверсии этанола с использованием основе метода абсорбционной ИК спектроскопии / В.И. Архипенко и др. // ЖПС. -2012.- Т.80, № 1. - С. 103-107.
- [3] Non-self-sustained atmospheric pressure glow discharges maintained by the dc helium glow discharge / V.I. Arkhipenko [et al.] // IEEE Transactions on Plasma Science. – 2009. – Vol. 37, № 6. – P. 740–749.
- [4] Архипенко, В.И. Способ определения концентрации водорода в газовых смесях и устройство для его реализации /В.И. Архипенко, С.М. Згировский, Л.В. Симончик// Патент РБ №15183 (2011).

УДК 621.373.826

В.В.Ажаронок¹, И.И.Филатова¹, С.В.Гончарик¹, Н.И.Чубрик¹, А.В.Холенков¹, А.С.Абраамян², А.Р.Мкртчян².

ИЗМЕНЕНИЯ МОЩНОСТИ ИЗЛУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОРАЗРЯДНОГО СО₂ – ЛАЗЕРА ИНИЦИИРУЕМЫМИ В АКТИВНОЙ СРЕДЕ АКУСТИЧЕСКИМИ ПОЛЯМИ

¹ Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072, Минск, Беларусь <u>azharonok@imaph.bas-net.by</u>

² Институт прикладных проблем физики НАН Армении, ул. Гр. Нерсисяна, 25, 220014, Ереван, Армения malpic@sci.am

Электроразрядные CO₂ лазеры (CO₂-ЭРЛ) широко используются в технологиях сварки, резки, легирования металлов и сплавов, разделки туфа и гранита, сепарации изотопов. В последнее время они успешно применяются в медицине, космической технике, военном деле. Исследователями из Института прикладных проблем физики НАН Армении было обращено внимание на возможность управления выходной мощностью CO₂-ЭРЛ путем инициирования акустических волн в резонаторе лазера [1]. Целью настоящей работы являлось изучение влияния инициируемых в активной среде CO₂-ЭРЛ акустических волн на мощность генерируемого лазером ИК излучения. Исследования выполнены на промышленном CO₂-ЭРЛ типа ИЛГН-704. Акустические волны в активной среде возбуждали модуляцией тока разряда на частотах f_m =500, 1250 и 2000 Гц с помощью косинусоидального импульса с углом отсечки ~ 180°. Контроль мощности генерируемого лазерного излучения проводили с помощью измерителя «NOVA-II» фирмы OPHIR, укомплектованного детектором «L30A·EX-SH».

Ранее нами было показано [2], что в режимах с модуляцией разрядного тока в активной среде лазера ИЛГН-704 возбуждаются колебания акустического давления и интенсивности генерируемого излучения с частотой, равной частоте модуляции f_m . Кроме этого, для токов менее 23 мА при отключении модуляции были зарегистрированы самоподдерживающиеся колебания тока, звукового давления и интенсивности генерируемого излучения, с частотами $f^* \sim 1$ кГц.

На рисунке 1 представлены измеренные величины мощности генерируемого излучения при значениях разрядного тока 15, 22 и 37,5 мА в отсутствии модуляции и самоподдерживающихся колебаний разрядного тока (режим 1), при наличии только самоподдерживающихся колебаний тока (режим 2) и при модуляции тока на частотах $f_m = 500, 1250$ и 2000 Гц (режим 3). Из приведенных данных видно, что при разрядном токе 15 мА генерируемая мощность практически не зависит от режима горения разряда, в то время как при токе 22 мА с появлением самоподдерживающихся колебаний тока или же его модуляции на частотах $f_m = 500, 1250$ и 2000 Гц величина мощности снижается примерно на 13 %. С возрастанием разрядного тока до значений 37,5 мА снижение мощности зависит от частоты модуляции f_m и достигает ~40%, ~20% и ~6% при $f_m = 2000, 1250$ и 500 Гц, соответственно. Самоподдерживающиеся колебания в данном режиме не возбуждаются.



Кроме этого фотографическим методом было установлено, что при переходе из режима горения 1 в режимы 2 и 3 происходит контракция положительного столба (ПС) разряда. В связи с этим регистрируемое уменьшение мощности генерируемого излучения с изменением режима горения разряда можно, по нашему мнению, связать с характерным для контракции разряда увеличением температуры плазмы, т.к. известно, что с ростом температуры активной среды CO_2 -лазеров мощность генерируемого излучения вначале растет, затем стабилизируется, а далее, когда температура становится выше $T \approx 420$ К, падает [3].

Снижение мощности генерируемого излучения при разрядном токе 37,5 мA с ростом частоты модуляции f_m можно объяснить более эффективным теплообменом между ПС разряда и водоохлаждаемой стенкой газоразрядной трубки вследствие увеличения на фоне кондуктивного отвода тепла вклада турбулентной теплопроводности в вихревом шлихтинговском течении в акустическом пограничном слое, образующемся в окрестности стенки трубки в поле возбуждаемой стоячей продольной акустической волны [4].

 [1] Мкртчян А.Р. Управление параметрами газового разряда CO₂-лазера при помощи плазмоакустического взаимодействия / А.Р. Мкртчян, А.С. Абрамян, К.П. Ароян, Т.Ж. Бежанян, К.С. Мкртчян, Р.Б. Костанян // Материалы Всероссийской научной конференции по физике низкотемпературной плазмы «ФНТП-2004».-2004.-Т.1.-С.127.
 [2] Azharonok V.V. Oscillations of working medium pressure and intensity of cw CO₂ laser induced by current pulsations / V.V.Azharonok, A.S.Abrahamyan., S.V.Goncharik, A.A.Kusmitskaya, A.R.Mkrtchyan, I.I.Filatova, N.I.Chubrik // Plasma physics and plasma technology. Contributed papers of VII international conference «PPPT-7».-2012.-V.1.-P.307.
 [3] В. Виттеман. CO₂-лазер.-М.: Мир.-1990.-360 С.

[4] Л.К. Зарембо, В.И. Тимошенко. Нелинейная акустика. М.: Изд-во МГУ.-1984.-104 С.

УДК 533.9.082.5-537.5

И. И. Филатова¹, Ф. М. Трухачев², В. В. Ажаронок¹, Н. И.Чубрик¹

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ НАНОЧАСТИЦ В ПОСЛЕСВЕЧЕНИИ ПЫЛЕВОЙ ПЛАЗМЫ ВЧ РАЗРЯДА

¹ Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости 68, 220072, Минск, Беларусь <u>filatova@imaph.bas-net.by</u>

² Могилевский государственный университет имени А.А.Кулешова, ул. Космонавтов 1, 220030, Могилев, Беларусь

Исследования процессов разрядки пылевых частиц в послесвечении пылевой плазмы свидетельствуют о возможности сохранения отрицательно заряженными в плазме микро- и наноразмерными частицами некоторого остаточного заряда в течение нескольких секунд после отключения разряда [1, 2]. С этим явлением связывают взрывоподобный характер распада плазменно-пылевых структур в послесвечении плазмы при низком давлении, сопровождающийся ускоренным движением пылевых частиц [3, 4]. Наличие остаточного заряда позволяет управлять динамикой частиц в послеразрядный период, что открывает новые перспективы для использования пылевой плазмы в технологиях нанесения наноструктурных покрытий.

В настоящей работе исследована возможность создания направленного потока наноразмерных частиц в послесвечении ВЧ плазмы под воздействием внешнего постоянного электрического поля. Пылевую плазму получали в разрядной камере планарного ВЧ разряда, возбуждаемого на частоте 5,28 МГц в воздухе при давлении 100 Па [2]. Полидисперсные частицы из Al_2O_3 радиусом $r_D \sim 0, 1-20$ мкм инжектировались в плазменный объем извне. После выключения ВЧ разряда вместо высокочастотного на верхний электрод подавали постоянный положительный потенциал $\phi = 37$ B, что обеспечивало направленное движение заряженных частиц. Напряженность электрического поля между электродами, расположенными на расстоянии L = 20 мм друг от друга, составляла E = 1760 В/м. Фотоизображения структур пылевых частиц в послесвечении плазмы, подсвеченных узким лазерным пучком (λ =635 нм) в плоскости, перпендикулярной поверхности электродов, приведены на рисунке 1. Установлено, что остаточный заряд частиц размерами 250 нм (облако I) и 100 нм (облако II) составляет соответственно -8e и -1e, а их скорость в направлении верхнего электрода при наложении постоянного положительного потенциала достигает 0,02 м/с [2].



Рис. 1. Структуры пылевых частиц в послесвечении ВЧ плазмы при давлении 100 Па спустя 2 мс (а), 42 мс (б) и 162 мс (в) после отключения ВЧ мощности

Динамические параметры пылевых частиц при воздействии внешнего постоянного электрического поля оценивали из уравнения баланса сил

$$\vec{F}_G + \vec{F}_{ND} + \vec{F}_E = m_D \vec{a},\tag{1}$$

где m_D и a – масса и ускорение частицы. Выражения для действующих на частицу сил тяжести F_{G} , трения о нейтральный газ F_{ND} и электрической силы F_E имеют вид [5]:

$$F_G = \frac{4}{3} \pi r_D^3 \rho g , \qquad (2)$$

$$F_{ND} = \frac{8}{3} \sqrt{2\pi} r_D^2 m_n n_n \upsilon_{Tn} \left(1 + \frac{\pi}{8} \right) |\upsilon_D - \upsilon_n|, \qquad (3)$$

$$F_E = QE , \qquad (4)$$

где r_D и ρ – радиус и плотность частиц, g – ускорение свободного падения, m_n , n_n и $\upsilon_{Tn} = \sqrt{8T_n / \pi m_n}$ – масса, концентрация и тепловая скорость молекул буферного газа соответственно, υ_n и υ_D – скорости упорядоченного движения буферного газа и пылевых частиц соответственно, Q = Ze – заряд частиц, e – элементарный заряд. Скорость движения пылевых частиц под воздействием внешнего электрического поля оценивали с использованием выражения, полученного с учетом (1) – (4):

$$\nu_{D} = \frac{3QE - 4\pi r_{D}^{3}\rho g}{\sqrt{2\pi}r_{D}^{2}m_{n}n_{n}\upsilon_{Tn}(8+\pi)}.$$
(5)

Результаты расчетов скорости пылевых частиц в послесвечении ВЧ разряда в зависимости от напряженности внешнего электрического поля приведены на рисунке 2.



Рис. 2. Скорость пылевых частиц радиусом 250 нм (—)-и 100 нм (—)-в.послесвечении ВЧ разряда при давлении буферного газа 100 Па (а) и 40 Па (б)

Рассчитанные в рамках предложенной модели скорости частиц при E=1760 В/м составляют порядка 0,02 м/с, что согласуется с экспериментально найденными значениями υ_D . Снижение давления газа в разрядной камере и увеличение напряжения постоянного внешнего поля позволяет существенно ускорить пылевые частицы.

- [1] Couëdel L. Residual dust charges in discharge afterglow / L. Couëdel, M. Mikikian, L. Boufendi, A. A. Samarian // Phys. Rev. 2006. Vol. E 74. P. 026403.
- [2] Филатова И. И. Исследование процессов разрядки пылевых частиц в послесвечении ВЧ разряда / И.И. Филатова, Ф.М. Трухачев, Н.И. Чубрик. // Физика плазмы. – 2011.–Т. 37. – С. 1119.
- [3] Barkan A. Confinement of Dust Particles in a Double Layer/A. Barkan, R. L. Merlino// Phys. Plasmas. 1995. Vol. 2. P. 3261.
- [4] Saxena V. Dust Cluster Explosion / V. Saxena, K. Avinash, A. Sen // Phys. Plasmas. 2012.– Vol. 19.– P. 093706.
- [5] Shukla P. Introduction to Dusty Plasma Physics / P. Shukla, A. Mamun // IOP, Bristol. 2002.

УДК 537.951

В.И. Архипенко¹, Е.З. Гусаков², Л.В. Симончик¹, М.С. Усачёнок¹

ИССЛЕДОВАНИЕ РАССЕЯНИЯ СВЧ ВОЛНЫ В ВЕРХНЕМ ГИБРИДНОМ РЕЗОНАНСЕ

¹ Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь; *m.usachonak@dragon.bas-net.by*

²Физико-технический институт РАН, ул. Политехническая, 26, 194021 С.-Петербург, Россия;

evgeniy.gusakov@mail.ioffe.ru

Как было недавно показано, аномальное отражение электромагнитных волн, причиной которого являются параметрические распадные неустойчивости (ПРН) индуцированного рассеяния, сопутствует ВЧ нагреву плазмы в установках с магнитным удержанием. Аномальное отражение наблюдается в токамаках и стеллараторах при уровне греющих мощностей в несколько сотен киловатт как в случае электронного Бернштейновского нагрева [1] из-за роста электрического поля накачки в области верхнего гибридного резонанса (ВГР) [2], так и при нагреве необыкновенной волной на второй гармонике ЭЦР из-за немонотонного профиля плотности [3]. В обоих случаях ПРН могут приводить к аномальному обратному рассеянию [1, 4], перераспределению греющей мощности и ускорению ионов. В этой связи изучение механизмов возбуждения ПРН и разработка методов управления ими являются насущно необходимыми.

В настоящем докладе мы представляем результаты модельных экспериментальных исследований взаимодействия с неоднородной плазмой СВЧ мощности с частотой электронного циклотронного диапазона. Эксперименты выполнялись на линейной плазменной установке «Гранит» [5], в которой созданы две области магнитного поля: более 0,3 Т на краю магнита и порядка 0,084 Т в его середине и остальной части (рисунок 1). Аргоновая плазма при давлении ~1 Па создавалась в



Рис. 1. Аксиальное распределение напряженности магнитного поля на оси электромагнита установки «Гранит» при токе 95 А. 1 – 3-см волновод. 2 – вставка из железа, 3 – катушки магнита, 4 – дополнительная катушка, 5 – 10-см волновод, 6 – кварцевая труба

режиме электронного циклотронного резонанса в области высокого магнитного поля в кварцевой трубе диаметром 2 см и длиной ~100 см, помещенной вдоль оси магнита. Плазма, неоднородна поперек как вдоль, так И поля $n_e = n_e(r, z), B$ магнитного амбиполярной результате диффузии вдоль магнитного поля достигала средней части магнита, где с помощью волновода 72×34 MM^2 подводилась к ней СВЧ мощность на частоте fo =2,1-3,5 ГГц. Кварцевая труба с

плазмой проходит через отверстия в узких стенках волновода, так что электрическое поле волны в волноводе было перпендикулярно внешнему магнитному полю.

При мощностях падающей волны менее 2 Вт зарегистрированы спектры рассеяния на колебаниях из области ВГР (рисунок 2). Показано, что для волны с



Рис. 2. Спектры рассеяния при различной величине магнитного поля

частотой $f_0 = 2,35$ ГГц область верхнего гибридного резонанса (ВГР) существует при магнитных полях в диапазоне 0,053–0,085 Т. При оценке концентрации электронов на нижней границе этого диапазона было получено значение $n_e \sim 4,4 \times 10^{10}$ см⁻³. Установлены их зависимости от величины внешнего магнитного поля, частоты падающей волны и её мощности.

Исследована динамика поглощения импульсной (1–10 мкс) СВЧ мощности до 200 Вт. С помощью регистрации распределения светового излучения показано, что область максимального поглощения СВЧ мощности смещается от центра плазменного столба к его периферии при изменении магнитного поля от 0.05 Т до 0.085 Т. При детектировании СВЧ сигнала из волноводного тракта наблюдаются низкочастотные колебания, которые могут быть связаны с возбуждением параметрической неустойчивости в ВГР области.

Наблюдаемые спектры рассеяния и их эволюция в течение импульса накачки могут свидетельствовать о процессе рассеяния, стимулированном падающей мощностью. Однако однозначно определить, что приводит к рассеянию, на данном этапе исследований не представилось возможным. Среди возможных причин появления рассеянного сигнала, смещенного по частоте, может быть как параметрическая неустойчивость, так и перемещение отражающей границы плазмы вследствие поглощения падающей мощности, приводящей к дополнительной ионизации [6].

Работа выполнена при поддержке грантов БРФФИ-РФФИ (Ф12Р-073, 12-02-90003-Bel a).

[1] H.P. Laqua, Plasma Phys. Control. Fusion 49, R1 (2007).

- [2] E.Z. Gusakov and A.V. Surkov, Plasma Phys. Control. Fusion 49, 631 (2007).
- [3] E.Z. Gusakov and A.Yu. Popov, *Phys. Rev. Lett.* 105, 115003 (2010).
- [4] E. Westerhof, S. K. Nielsen et al, Phys. Rev. Lett. 103, 125001 (2009).
- [5] V.I Arkhipenko, V.N. Budnikov et al, Plasma Phys. Reports 26, 314 (2000).
- [6] V.I Arkhipenko, E.Z. Gusakov et al, J. Exp. Theor. Phys 100, 440 (2005).

УДК 537.523/527; 533.9.004.14

В.И. Архипенко, С.М. Згировский, А.А.Кириллов, Е.А.Сафронов, Л.В. Симончик

ИСТОЧНИКИ ПЛАЗМЫ АТМОСФЕРНОГО ДАВЛЕНИЯ НА ПОСТОЯННОМ ТОКЕ В ТЕХНОЛОГИЯХ КОНВЕРСИИ ВОДОРОДОСОДЕРЖАЩИХ ВЕЩЕСТВ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь arkhip@imaph.bas-net.by

Низкотемпературная неравновесная плазма атмосферного давления находит применение во многих современных технологиях. Для получения плазмы используются различные газовые разряды: коронные, разряды с микрополым катодом, капиллярные, искровые и барьерные разряды [1]. Объемная плотность мощности данных газовых разрядов не превышает нескольких десятков Ватт в кубическом сантиметре, концентрация электронов имеет величину порядка $10^{10} - 10^{12}$ см⁻³. Тлеющий разряд на постоянном токе является простейшим способом получения неравновесной плазмы и характеризуется более высокой концентрацией заряженных частиц и вкладываемой мощностью.

В Институте физики НАН Беларуси разработаны источники плазмы на основе самостоятельных нормальных тлеющих разрядов атмосферного давления в гелии, аргоне, азоте и воздухе в диапазоне токов от нижней границы существования разрядов ~ 1 мА до десятков ампер мощностью 10-1000 Вт и концентрацией электронов 10^{11} - 10^{15} см⁻³ [2].

Для эффективного применения неравновесной плазмы атмосферного давления в плазменных технологиях требуется объемная или протяженная плазма. Получение такой плазмы в двухэлектродной конфигурации сопряжено с рядом трудностей: рост напряжения при увеличении разрядного промежутка, рост температуры и уменьшение степени неравновесности плазмы с ростом плотности тока, контракция разряда и др. Для их преодоления нами была разработана трехэлектродная схема газового разряда, в которой плазма, генерируемая во вторичной цепи, используется в качестве плазменного катода для основного разряда [3]. При вкладываемой мощности 200 Вт объем плазмы основного разряда достигает 20 см³.

В настоящее время одной из важнейших проблем энергетики является поиск альтернативных источников энергии, которые позволили бы частично отказаться от традиционных топлив таких, как бензин, керосин, метан, которые получают из нефти и природного газа и запасы которых на Земле ограничены. В связи с этим, сегодня широко начинают использоваться топливо, имеющее растительное происхождение: биодизель, биокеросины, этанол. Однако, низкая скорость распространения волны горения и непостоянство их компонентного состава затрудняют их эффективное использование. Добавление свободного водорода в топливную смесь приводит к увеличению скорости ее сжигания. Наиболее перспективным способом генерации водорода непосредственно перед сжиганием, что устраняет проблемы, связанные с транспортировкой и хранением водорода, является плазмохимический, который заключается в риформинге исходного топлива в синтез-газ неравновесной плазмой.

Из биотоплив этанол является наиболее востребованным, так как он может быть получен из промышленных отходов или биомассы. Для конверсии этанола в синтез-газ использовалась трехэлектродная схема газового разряда. Разработанный плазмохимический реактор (рис. 1) состоит из разрядной камеры, состоящей из трех секций [4]. В первой секции горит самостоятельный тлеющий разряд в воздухе, который является плазменным катодом для основного несамостоятельного разряда. Во второй секции происходит нагрев газовой смеси воздуха с этанолом, которая поступает в третью секцию, где в плазме основного разряда происходит конверсия этанола. Вкладываемая мощность в плазменный катод составляет 50 Вт, в несамостоятельный



основной разряд, 2 – секция плазменного катода, 3 – секция нагрева газовой смеси
 Рис. 1. Фотография реактора (*a*) и факела (*б*) горения синтез-газа при конверсии этанола

разряд 200 Вт.

Для газовой смеси, содержащий на входе В плазмохимический реактор 57% воздуха, 30% паров этанола и 13% воды, газовая смесь на выходе состоит из 36% H₂, 23% CO, 1.2% CH₄, 0.8% C₂H₂, 1.0% CO₂, 0.3% C_2H_5OH И 8% H₂O. Эффективность конверсии составляет 95%. Количество водорода, производимое R 1,2 минуту литра. Энергоэффективность,

определяемая как отношение

теплоты, выделяемой при сгорании синтез-газа к вкладываемой электрической энергии составляет 1,85. Затраты энергии на одну молекулу водорода 3 эВ.

Разработанный реактор может быть положен в основу при создании малогаборитных реакторов для конверсии этанола, метанола, глицерола и других биотоплив в синтез газ не только в стационарных, но и в передвижных установках.

- [1] Fridman A. Plasma Chemistry / Fridman A. Cambridge: Cambridge University Press, 2008. 980 p.
- [2 Plasma non-equilibrium of the DC normal glow discharges in atmospheric pressure atomic and molecular gases / V.I. Arkhipenko [et al.] // The European Physical Journal D. – 2012. – Vol. 66, N. 10. – 252.
- [3] Non-self-sustained atmospheric pressure glow discharges maintained by the dc helium glow discharge / V.I. Arkhipenko [et al.] // IEEE Transactions on Plasma Science. – 2009. – Vol. 37, № 6. – P. 740–749.
- [4] Архипенко, В.И. Устройство для конверсии углеводородного топлива в неравновесной плазме газового разряда при атмосферном давлении /В.И. Архипенко, С.М. Згировский, Л.В. Симончик// Патент на полезную модель РБ № 8424 (2012).

УДК 539.2

А.Р.Мкртчян¹, А.С.Абраамян¹, В.В.Ажаронок²

К РАЗРАБОТКЕ АКУСТОПЛАЗМЕННОГО СО2- ЛАЗЕРА

¹Институт прикладных проблем физики НАНАрмении, Гр.Нерсисяна, 25, 0014, Ереван, Армения <u>malpic@sci.am</u> ²Институт физики им.Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр.Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>azharonok@imaph.bas-net.by</u>

Наши исследования показали, что используя акустоплазменный режим работы с синусоидальной модуляцией для CO₂-лазера ЛГ-23, не изменяя величину активного балластного сопротивления, можно поднять КПД с 3-4 до 6,5%, а при замене блока питания на специально разработанный – более 10%.

Нами установлено, что при акустоплазменном режиме работы возможны: **a**) интенсификация замены рабочей смеси в разрядном канале, по сравнению с естественной диффузией газа из разрядного канала в балластный объем и наоборот, т.е. реализация режима акустоплазменной прокачки газа без движущихся механизмов.

b) осуществление акустической контракции (при малых значениях разрядного тока) или наоборот, расконтрагирование разряда и таким образом, изменение выноса тепла из центра разряда к стенкам трубки, что позволяет также изменить КПД лазера, увеличить оптимальный энерговклад в разряд и давление в трубке.

с) из-за плазменных неустойчивостей и усиления акустических колебаний в плазме возникают самопроизвольные колебания, которые синхронизитуются на одной из акустических мод резонатора, образованного разрядной трубкой. Причем, при какомлибо импульсном воздействии, возможна генерация акустических колебаний на разных акустических модах. Глубина модуляции тока разряда (отношение переменной компоненты к постоянной) при самопроизвольной генерации акустических колебаний может превышать 25%. Такая "самопроизвольная акустоплазма" может менять параметры разряда и, даже, вид ВАХ. Использование брюстеровских окон ослабляет ее, но не устраняет целиком. В такой самопроизвольной акустоплазме возникают импульсы тока большой амплитуды и малой длительности, которые резко уменьшают когерентные свойства лазера, поэтому для стандартного СО2-лазера без активной стабилизации частоты гарантированная кратковременная стабильность частоты $\Delta v / v_0$ не превышает ~10⁻³ для многочастотного режима работы и ~10⁻⁶ для одночастотного режима работы (Δν- флуктуация оптической частоты, vo- частота оптической генерации). Создание управляемого акустоплазменного режима разряда позволяет подавить самопроизвольное возникновение акустоплазмы, а НЧ модуляция разрядного тока приводит к такому же медленному изменению оптической частоты. В результате кратковременная гарантированная стабильность частоты повышается в 20 и более раз.

d) обычно для повышения стабильности частоты и тока разряда используют слабую пробную модуляцию тока и систему обратной отрицательной связи. В

акустоплазменном режиме все эти процессы осуществляются автоматически в самой акустоплазме.

e) в результате осуществления в акустоплазме фазовых переходов и увеличения энерговклада, по сравнению с невозмущенной плазмой в акустоплазме можно повысить давление газа и концентрацию возбужденных частиц в разрядной трубке и таким образом повысить выходную мощность оптического излучения лазера.

f) в мощных импульсных лазерах в режиме предыонизации возможно создание акустоплазменного режима с дополнительным энерговкладом. Затем, при сбросе акустоплазменного состояния, происходит излучение оптической мощности, обусловленной дополнительным энерговкладом.

g) при определенных конструкции трубки и параметрах модуляции разрядного тока в акустоплазме возможны настолько сильные акустические колебания, что они приводят к погасанию разряда, несмотря на то, что на трубку подается напряжение, достаточное для нормальной работы. После погасания разряда акустические колебания, связанные с модуляцией тока разряда затухают и разряд снова зажигается, и все повторяется снова. Таким образом, без использования электрооптических и механических модуляторов получаеся НЧ модуляция интенсивности оптического излучения с глубиной 100%. Причем модуляция с максимальным КПД, поскольку нет потерь оптической мощности в элементах оптических модуляторов.

УДК 537.523/527; 533.9.004.14

А. А. Кириллов¹, А. В. Павлова¹, Е. А. Сафронов¹, Л. В. Симончик¹, Н. В Дудчик²

МЕДИЦИНСКИЕ ПРИЛОЖЕНИЯ НЕРАВНОВЕСНОЙ ПЛАЗМЫ АТМОСФЕРНОГО ДАВЛЕНИЯ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

y.safronau@ifanbel.bas-net.by

² Республиканский научно-практический центр гигиены, ул. Академическая, 8, 220012 Минск, Беларусь

Одним из уникальных свойств неравновесной плазмы является ее высокая реакционная способность при низкой температуре газа, что позволяет осуществлять необходимые химические процессы в объеме или на поверхности без существенного нагрева обрабатываемых объектов. Создание же источников неравновесной плазмы, работающих при атмосферном давлении, в свою очередь позволило не только расширить медицинские приложения низкотемпературной плазмы, такие как биодеконтаминация и модификация поверхностей, но и привело к созданию нового многообещающего и активно развивающегося напрявленния плазменной медицины – терапевтическим плазменным приложениям [1]. Высокая научная активность в области медицинских приложений неравновесной плазмы направлена на снижение количества жизнеспособных клеток микроорганизмов на изделиях медицинского назначения, сложной высокотехнологичной медицинской технике, а также на раневой поверхности, где плазма может составить как альтернативу традиционным методам инактивации биологических объектов (термическим, химическим, радиационным), так и в некоторых случаях быть единственно возможным.

К настоящему времени созданы различные источники неравновесной плазмы атмосферного давления, перспективные для медицинских приложений: поверхностные и объемные диэлектрические барьерные разряды, плазменные струи атмосферного давления и др. Как правило, они характеризуются малым объемом создаваемой плазмы (не более нескольких кубических сантиметров). Большие объемы плазмы могут быть получены в тлеющем разряде атмосферного давления (ТРАД) в трехэлектродной системе с плазменным катодом [2].



Рис 1. Фотографии ТРАД с плазменным катодом в воздухе (а), гелии (б) и плазменной струи ТРАД при воздействии на обрабатываемые объекты

Трехэлектродная система с плазменным катодом представляет собой разрядную камеру с двумя секциями, разделенными пластиной с отверстием. В верхней секции в межэлектродном промежутке менее 1 мм зажигается вспомогательный ТРАД, через который продувается рабочий газ и поступает в основную нижнюю секцию через отверстие в электроде 2, образуя плазменный катод для основного разряда в нижней секции при прикладывании положительного потенциала к электроду 3. На рисунке 1а и 16 приведены примеры образующихся объемных диффузных ТРАД в межэлектродном промежутке 3 см в воздухе при токе 300 мА и гелии при токе 5 мА, соответственно, при использовании в качестве плазменного катода ТРАД в гелии при токе 300 мА. Инактивационная эффективность данных источников исследовалась на тест-штаммах микроорганизмов (вегетативные клетки Staphylococcus aureus ATCC 6538, Escherichia coli ATCC 8739; споры Bacillus subtilis ATCC 6633), которые наносились на поверхность инертных образцов, затем выполнялась плазменная обработка и количественное определение результатов воздействия методом счета колоний. Для ТРАД в воздухе (Рисунок 1а) время, за которое погибает 90% жизнеспособных клеток (D-время), составляет десятки секунд как для вегетатичных так и споровых клеток. Спектроскопически показано наличие активных частиц ОН и NO в зоне разряда, определено влияние ультрафиолетового излучения и теплового эффекта.

Изучение воздействия холодной плазмы проводилось с использованием несамостоятельного разряда в гелии при токах до 5 мА. Суммарная концентрация примесей в гелии не превышает 0,01%, при максимальном содержании H₂O 0,005%. Образцы здесь помещались на третий электрод, являющийся анодом. При 5 мА напряженность электрического поля возрастает у анода до 20 Тд, что соответствует средней энергии электронов 7 эВ. Концентрация электронов составляет 10^{10} см⁻³, температура газа, определенная по спектру гидроксила ~ 45°C. D-времена инактивации составляют порядка нескольких минут как для грамотрицательной *E. coli*, так и для грамположительного *S. aureus*. Было показано, что наиболее важную роль в процессе инактивации играют молекулы гидроксила OH, образующиеся вследствие диссоциации молекул Воды электронным ударом. При токе 5 мА рассчитанная концентрация молекул OH вблизи образца с микроорганизмами и диффузионный поток OH на его поверхность составляют 4.5·10¹¹ см⁻³ и 5.0·10¹³ см⁻²с⁻¹.

Инактивационная способность плазменной струи ТРАД исследовалась для рабочих газов Ar/O₂, He/O₂, N₂ и воздуха. Наибольшее время инактивации получено для азота, наименьшее для воздуха. При воздействии холодной воздушной плазменной струи ТРАД на поверхность питательной среды площадью 15 см², засеянной свежей культурой *S. aureus* с поверхностной плотностью 10^5-10^6 KOE/cm² приводит к биодеконтаминации за время 10 мин. Причиной высокой бактерицидности воздушной струи, по-видимому, является наличие в ней молекул NO₂, причем инактивация микроорганизмов происходит не из-за изменения свойств питательной среды, а вследствие непосредственного воздействия плазмы на микроорганизмы.

Работа выполнена при финансовой поддержке БРФФИ (грант Ф11СРБ-002).

- [1] M.G. Kong [et al.] // New Journal of Physics. 2009. –Vol. 11 115012.
- [2] V. I. Arkhipenko [et al.] // IEEE Trans. Plasma Sci. 2009. Vol. 37. P. 740–749.

УДК 621.373.826

С. С. Ануфрик¹, А. П. Володенков¹, К. Ф. Зноско¹

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЧАСТОТНОГО РЕЖИМА РАБОТЫ XECL-ЭКСИЛАМПЫ БАРЬЕРНОГО РАЗАРЯДА

¹ Гродненский государственный университет им. Я.Купалы, ул. Ожешко, 22, 230023 Гродно, Беларусь a.volodenkov@grsu.by

Выполнено компьютерное моделирование эмиссионных характеристик XeCl эксилампы барьерного разряда в моноимпульсном режиме работы. Было использовано зарядное напряжение U1=30 кВ. На первоначальном этапе исследований выполняется оптимизация параметров системы возбуждения для моноимпульсного режима. Для данной величины накопительной емкости C1, площади поперечного сечения разряда S, длины разрядного промежутка (D2-D1) и зарядном напряжении U1 определяются оптимальные величины обострительной емкости C0, контурных индуктивностей L1, L0 и оптимальный состав и общее давление смеси (рисунок 1).



C1 - накопительная емкость; C0 – обострительная емкость; L1, L0 - контурная индуктивность; U1 – зарядное напряжение на емкости C1; Rзар – сопротивление балластное для зарядки накопительной емкости C1; 1- электроды эксилампы; 2-стенки кварцевой коаксиальной эксилампы

Рис.1. Эксилампа барьерного разряда

Оптимизация для моноимпульсного режима проводится по следующей методике.

1. Сначала выбирается конструкция излучателя. Задаются его геометрические размеры: *D*1, *D*2, *d*1, *d*2, *h* (рисунок 1).

2. Затем задается величина накопительной емкости С1 и зарядное напряжение U1. Выбор величины напряжения определяется примерной величиной давления смеси Р, которую предполагается использовать, тогда возможность реализации пробоя определяется приведенной величиной напряженности электрического поля на разрядном промежутке U1/P(D2-D1). Зная эту величину, а также общее давление Р и размер разрядного промежутка (D2-D1) можно оценить величину зарядного напряжения U1. Для определения величины емкости С1 надо знать экспериментальные данные по типичным ной величине энергии излучения снимаемой с единицы объема Еуд и КПД (η)для типичной смеси при таком давлении. Тогда энергия, которую необходимо вложить в разряд, равна ЕудV (V-объем разрядного промежутка). Эта

величина должна быть равна энергии запасенной в накопительном конденсаторе C1: C1U1²/2. Отсюда можно оценить величину накопительной емкости.

3. Затем для данной величины накопительной емкости С1, площади поперечного сечения разряда S, длины разрядного промежутка (*D2-D1*) и зарядном напряжении U1 определяются оптимальные величины обострительной емкости C0, контурных индуктивностей L1, L0 и оптимальный состав и общее давление смеси.

Результаты, полученные для моноимпульсного режима, использованы для определения оптимальной частоты повторения импульсов при импульснопериодическом режиме работы, при этом учитывается процесс регенерации галогеноносителя [1]. На рисунке 2 представлена зависимость средней мощности излучения от частоты повторения импульсов.



Cl₂:Xe:He=3:10:290

Общее давление 300 Торр; С1=2 нФ, С0=0,2 нФ, S=280 см². Рис. 2. Зависимость мощности излучения от частоты импульсов.

При малых величинах накопительной емкости, больших величинах сечения разряда S и достаточной концентрации молекул Cl_2 мощность излучения увеличивается при увеличении частоты следования импульсов до некоторой величины (кривые 2, 3). Причем, мощность излучения достигает максимума при такой частоте повторения импульсов, когда парциальное давление Cl_2 в моменты времени, соответствующие началу импульса возбуждения, совпадает с оптимальной величиной парциального давления для моноимпульсного режима работы.

При малой концентрации молекул Cl₂ мощность излучения выходит на постоянный уровень (кривая 1). Это обусловлено тем, что установившаяся величина парциального давления в момент начала импульса возбуждения получается меньше, чем оптимальная величина, соответствующая максимуму энергии для моноимпульсной работы.

 [1] Anufrik S. Modeling of the active medium based on XeCl molecules with allowance for the halogencarrier regeneration process / S. Anufrik, A. Volodenkovl, K. Znosko // Russian Physics Journal – 2012. – V. 54. -P. 1264-1271. УДК 537.87; 621.396; 537.52

М.С. Усачёнок, Л.В. Симончик

ОДНОМЕРНАЯ ПЛАЗМЕННАЯ ЭЛЕКТРОМАГНИТНАЯ ПОЛОСОВАЯ СТРУКТУРА

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>m.usachonak@dragon.bas-net.by</u>

В последние десятилетие возрастает интерес к исследованию периодических структур с электромагнитной запрещенной зоной (ЕВG структуры) и к их возможным применениям. Такого рода материалы характеризуются наличием полосового спектра пропускания и значительной анизотропией. Примером одномерной EBG-структуры в СВЧ диапазоне может служить волноводный фильтр, который представляет собой волноводную секцию с периодически расположенными в ней металлическими диафрагмами [1]. В большинстве случаев элементы диафрагм жестко закреплены, что не предполагает перестройку фильтра по частоте. В перестраиваемых фильтрах элементы диафрагм перемещаются с помощью точной механики, что создает сложности в эксплуатации, и такие фильтры облададают низким быстродействием. Управление фильтрами с помощью полупроводников и керамик применимо для мощностей не превышающих десятка Ватт. Плазма тлеющего разряда обладает большим потенциалом для использования в качестве управляющих элементов в EBG структурах [2, 3]. В данной работе представлены результаты исследования прохождения микроволнового излучения Х-диапазона (7 - 12 ГГц) через одномерную (1D) EBG-структуру (волноводный фильтр CBЧ), сформированную плазменными столбами в волноводной секции сечением 23×10 мм² и длиной 20 см.

Периодическая структура была образована плазменными столбами трех разрядных ламп пониженного давления (ГШ-5) с внутренним диаметром 3 мм, которые



Рис. 1. Спектры пропускания плазменной 1D EBG структуры из трех ГШ-5 при постоянном токе 100 мА (1), при импульсном питании (2) и при отсутствии разрядов (3). Треугольники и точки – эксперимент, слошные линии – расчет

располагались на оси волноводной секции перпендикулярно ее широким стенкам в сквозных отверстиях, просверленных с периодом l = 38 мм. При включении трех ламп ГШ-5 при разрядном токе 100 мА, как видно на рис. 1 (треугольники), наблюдается уменьшение пропускания на 12-14 дБ в области частоты 8 ГГц и на 5 дБ в районе 10 ГГц. Кривая 1 на этом же рисунке представляет результаты расчета, выполненного с помощью кода HFSS для параметров эксперимента. Как видно, в спектре пропускания данной структуры все же намечаются две слабые полосы пропускания на частототах $f_l = 10 \ \Gamma \Gamma \mu$ и $f_2 = 7,6$ ГГц. Увеличение диаметра плазмы

до 6 мм (использование трех ламп ГШ-2) при неизменной плотности тока (j = 1,41 A/cm²) приводит к более рельефной зависимости, при этом в области между полосами пропускания подавление сигнала достигает 30 дБ.

Гораздо больше уменьшение уровня сигнала проходящей СВЧ волны вне полос пропускания (до -50 дБ) было достигнуто при импульсном питании ламп (Рис. 1, кружки). Максимальное значение разрядного тока достигало 10 А при длительности импульса до 1 мкс. Столь значительному увеличению тока соответствовало увеличение концентрации электронов в плазменных столбах ламп более чем на порядок. Результаты расчета для этих условий представлен кривой 2 на рисунке 1.

Представленная 1D EBG-структура была применена при большой мощности (до 20 кВт в импульсе) падающего СВЧ излучения на частоте 9150 МГц (длительность импульсов 200 нс, период повторения – 500 мкс). В случае, когда мощность падающего СВЧ излучения больше необходимой для пробоя рабочего газа в лампах,



Рис. 2 Осциллограммы падающего (1) и прошедшего через1D EBG структуру (2) СВЧ импульсов

периодическая плазменная структура формировалась под действием падающего излучения. И при этом наблюдалось значительное сокращение длительности прошедшего импульса СВЧ до 10 нс (Рис. 2). Когда мощность падающего СВЧ излучения меньше необходимой для пробоя, EBG-структура может быть использована для управления параметрами импульса (для уменьшения его амплитуды В диапазоне исследуемом частотном или для изменения его длительности) путем вариации задержки между

передним фронтом СВЧ импульса и импульсами напряжения внешнего импульсного источника напряжения, используемых для поджига ламп.

Как известно, увеличить концентрацию в положительном столбе тлеющего разряда возможно при увеличении давления рабочего газа. Была получена структура в волноводе Х-диапазона из трех несамостоятельных тлеющих разрядов при атмосферном давлении на постоянном токе, которые зажигались в трубках на месте разрядных ламп ГШ-5. Данная 1D EBG-структура из несамостоятельных тлеющих разрядов была протестирована при различных разрядных токах и рабочих газах.

- [1] Банков, С.Е. Электромагнитные кристаллы / С.Е. Банков. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. 352 с.
- [2] Sakai, O. Plasmas as metamaterials: a review / O. Sakai, K. Tachibana // Plasma Sources Sci. Techn. – 2012. – Vol. 21, № 1. – 013001 (18 pp.).
- [3] Control of electromagnetic band gap devices by discharge plasmas / V.I. Arkhipenko [et al.] // Proceedings of the VIII International Workshop on Microwave Discharges: Fundamentals and Applications (MD-8), Zvenigorod, Russia, 10 14 September 2012 P. 275-280.

УДК 533.951: 533.9.08

Е.З. Гусаков¹, В.А. Михаленко², Л.В. Симончик³, Ф.М. Трухачев²

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПАДНОЙ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ В НЕОДНОРОДНОЙ ПЛАЗМЕ

¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, ул. Политехническая, 26, 194021 Санкт-Петербург, Россия <u>Evgeniy.Gusakov@mail.ioffe.ru</u>

² Могилевский государственный университет им А.А.Кулешова, Космонавтов, 1, 212022 Могилев, Беларусь

ftru@mail.ru

³Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

simon@dragon.bas-net.by

Введение

Возбуждение параметрической распадной неустойчивости (ПРН) является причиной аномального отражения и поглощения электромагнитных волн в экспериментах по лазерному термоядерному синтезу и высокочастотному нагреву в устройствах с магнитным удержанием плазмы. В этой связи изучение механизмов возбуждения ПРН и разработка методов управления ими являются насущно необходимыми. Можно выделить два режима неустойчивости – конвективный и абсолютный. Конвективный режим представляет собой пространственное усиление одной из плазменных волн падающих на область параметрического распада.



Рис. 1. Спектры рассеяния при различной мощности накачки (а – Р0 = 17 мВт, б – 23, в – 27 и г – 40 мВт) и зависимости спектральной плотности мощности спектральных компонент от мощности накачки

Абсолютный режим параметрической неустойчивости реализуется на основе конвективного режима при условии возвращения назад в область распада части вынесенной из нее энергии и характеризуется дискретным спектром собственных мод и инкрементами, определяемыми временем циркуляции энергии волны в петле обратной связи. ПРН исследовалась в [1] и спектры параметрического рассеяния в зависимости от мощности накачки представлены на рис.1. Исчерпывающей теории ПРН в

неоднородной плазме не существует, поэтому численное моделирование параметрических неустойчивостей является актуальной задачей.

1. Теоретическая модель

ПРН развивается, если амплитуда накачки превышает некоторое пороговое значение и при выполнении условий $k_0 = k_1 + k_2$, $\omega_0 = \omega_1 + \omega_2$, где k_i , ω_i – проекции волновых векторов взаимодействующих волн на направление неоднородности и их частоты. Моделирование параметрической неустойчивости в неоднородной плазме проведено в рамках системы связанных волновых уравнений для комплексных амплитуд взаимодействующих волн [3]:

$$\frac{\partial a_1}{\partial t} + \upsilon_1 \frac{\partial a_1}{\partial x} + \nu_1 a_1 = \gamma_0 a_2 e^{i\Phi(x,t)},$$

$$\frac{\partial a_2}{\partial t} + \upsilon_2 \frac{\partial a_2}{\partial x} + \nu_2 a_2 = \gamma_0 a_1 e^{-i\Phi(x,t)} + S(x)$$
(1)

где a_1 , a_2 , v_1 , v_2 – комплексные амплитуды и скорости взаимодействующих волн соответственно, v_1 , v_2 – коэффициенты затухания волн, γ_0 – инкремент неустойчивости. S(x) – начальное распределение ионно-звуковых шумов. Функция $\Phi(x,t)$ характеризует набег фаз и определяет тип неустойчивости (конвективная, абсолютная), а также тип накачки (монохроматическая или немонохроматическая). $\Delta k = k_1 - k_0 - k_2$. Уравнение для волны накачки в простейшем случае можно исключить, считая ее неисчерпаемой.

Для решения системы (1) применялась конечноразностная схема (аналитические решения получены, лишь для ряда частных случаев). Результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными результатами и частными математическими расчетами, полученными другими авторами.

2. Заключение

Построена численная нестационарная одномерная модель параметрических неустойчивостей в неоднородной плазме. Промоделированы случаи монохроматической и немонохроматической накачки. Полученные результаты будут использованы для оптимизации нагрева плазмы электромагнитным излучением.

Работа выполнена при поддержке грантов БРФФИ-РФФИ (Ф12Р-073, 12-02-90003-Bel_a)

- [1] Экспериментальное исследование конвективной параметрической неустойчивости неоднородной плазмы / В.И. Архипенко [и др.] // Физика плазмы. – 1987. – Т.13, № 6. – С. 693 – 707.
- [2] Гусаков, Е.З. Параметрические неустойчивости неоднородной плазмы в присутствии длинноволновых низкочастотных колебаний / Е.З. Гусаков, А.Д. Пилия // Физика плазмы. 1980.– Т. 6.– С. 509 519.
- [3] Пилия, А.Д. Нестационарная теория распадной неустойчивости в слабонеоднородной плазме / А.Д. Пилия // ЖЭТФ. – 1973.– Т. 64, № 4. – С. 1237 – 1244.

УДК 539.2

А.С.Абраамян, К.Г.Саакян

ВОЛЬТ-КУЛОННАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА В АКУСТОПЛАЗМЕ И МОДУЛЯЦИЯ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ

Институт прикладных проблем физики НАНАрмении, Гр.Нерсисяна, 25, 0014, Ереван, Армения malpic@sci.am

В Институте прикладных проблем физики Национальной Академии Наук Армении (ИППФ НАН РА) на протяжении 20-и с лишним лет проводились исследования по управлению параметрами низкотемпературной плазмы с помощью акустических полей. Впервые было показано, что при питании модулированным током, содержащим постоянную и переменную компоненты, в плазме генерируются акустические колебания, которые взаимодействуют с этой же плазмой, в результате плазма переходит в новое стабильное акустоплазменное состояние, что можно рассматривать, как акустоплазменный фазовый переход.

Параметры акустоплазмы могут существенно отличаться от параметров плазмы без акустического возмущения, что связано с изменением поведения электронов, связывающих атомы в акустоплазме.

В настоящем сообщении рассматривается Вольт-Кулонная характеристика и возможность модуляции диэлектрической проницаемости при акустоплазменном режиме разряда. Экспериментально получено, что для определения динамических параметров акустоплазменного разряда, связанных с изменением концентрации носителей заряда во времени, необходимо измерение текущего значения разности токов, измеренных со стороны анода и катода в зависимости от частоты и глубины модуляции тока разряда. Наблюдаемый скачок величины заряда при плавном изменении напряжения на разрядной трубке можно объяснить фазовым переходом в акустоплазме.

В эксперименте использовалась разрядная трубка CO₂-лазера ЛГ-23, рабочая смесь CO₂:N₂:He=1:1:8 при давлении 8 Торр.

На рис.1 приведены вольт-кулонные характеристики, полученные в течение периода модуляции тока разряда. По оси абсцисс отложена переменная компонента напряжения на разряде (в кВ), по оси ординат- переменная компонента заряда в трубке (в нКл).



Рис.1. Вольт-кулонные характеристики a) f=0,5kHz; b) f=1kHz

Из вида кривых можно предположить, что на частоте 0,5 kHz разрядный ток обусловлен преобладанием ионизации в разряде над ускорением заряженных частиц, т.е., увеличивается концентрация носителей заряда, а на частоте 1 kHz (и выше) вклад в ток ускорения заряженных частиц преобладает над вкладом от ионизации, т.е., в течение периода модуляции концентрация носителей заряда меняется мало, а скорость электронов меняется существенно.

Из рис.1b видно, что вольт-кулонная характеристика акустоплазмы ортогональна вольт-кулонной характеристике варикапа, т,е, В акустоплазме происходит отрицательное (по сравнению с варикапом изменение диэлектрической проницаемости). Из рис.1а следует, что при увеличении напряжения на трубке (по стрелке на рис.) заряд увеличивается на 100 nK, затем, в районе максимума напряжения скачком уменьшается на 300 nK, затем, когда напряжение на трубке становится меньше среднего значения, отрицательный заряд увеличивается, что соответствует поведению плазмы без акустического возмущения. Скачок связан с фазовым переходом в акустоплазме.

УДК 53

В.С. Бураков, А.В. Буцень, М.И. Неделько, Н.В. Тарасенко

ЛАЗЕРНО-ПЛАЗМЕННЫЙ РЕАКТОР ДЛЯ СИНТЕЗА НАНОРАЗМЕРНЫХ ЧАСТИЦ

¹Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>nedelko@imaph.bas-net.by</u>

В последние годы успешно развиваются плазменно-лазерные методы синтеза низкоразмерных порошков металлов, основанные на процессах лазерной абляции и электрических разрядах в жидкофазных средах. Метод лазерной абляция твердых тел отличается простотой реализации, отсутствием побочных примесей в конечном продукте, может быть применен для различных материалов как проводящих, так и непроводящих, полупроводников, а также тугоплавких материалов. Второй способ, базирующийся на использовании дуговых и искровых разрядов в жидкостях и газах, перспективен для получения наноразмерных частиц смешанного состава. Достоинством электроразрядного метода синтеза наночастиц являются возможности управления характеристиками конечных продуктов путем вариации режимов разряда и масштабирования процесса синтеза, достаточно высокая производительность и несложный процесс подготовки исходных материалов. Применение данного метода позволяет также значительно расширить ассортимент получаемых материалов (металлические порошки, оксиды и карбиды металлов, композиционные материалы, частицы смешанного состава). Дополнительные преимущества можно получить при использовании оптимальных режимов совместного воздействия потоков лазерного излучения и импульсных электрических разрядов на распыляемый материал, что позволяет обеспечить эффективное инициирование разряда, а также и модификацию размеров, структуры и состава формируемых частиц.

Электроразрядные и лазерные методы синтеза наноструктур в жидкофазных средах получили успешное развитие с начала 90-х. Если в первых работах при использовании метода электрического разряда в жидкости источником материала для последующего формирования наночастиц служил материал электродов, то в дальнейших исследованиях изучалась возможность участия молекул жидкости в образовании наноструктур [1].

Учитывая перспективность синтеза наноструктур в электрических разрядах в жидкостях. целесообразна разработка эффективного и обладающего низкой себестоимостью электроразрядного реактора. Это позволит увеличить наработки частиц, производительность процесса расширить ассортимент производимых нанопорошков и осуществлять контролируемый их синтез. Структурная схема реактора синтеза наночастиц приведена на рисунке.



Экспериментальный образец плазменно-лазерного реактора предназначен для получения методом импульсного электрического разряда в комбинации с лазерной абляцией в жидких средах нанопорошков металлов и их химических соединений с управляемыми В широком диапазоне параметрами. Установка оборудована механизмами подачи электродов в зону синтеза и периодической смены жидкости в зоне разряда. Основные технические параметры реактора: мощность электроразрядного источника до 3 кВт; плазмообразующая среда – жидкость, газ; средний размер синтезируемых частиц в диапазоне 5-40 нм; отклонение от среднего размера не более 30%; производительность до 50 мг/мин; номенклатура производимых порошков металлы и их химические соединения.

[1] Синтез наночастиц методом импульсного электрического разряда в жидкости / В.С. Бураков, Н.А. Савастенко, Н.В. Тарасенко, Е.А. Невар / ЖПС. – 2008. – Т. 75. – № 1. – С.111.

УДК 543.423.1

А. Г. Будай¹, Я. И. Дидковский², В. П. Кныш¹, М. Н. Коваленко², А. А. Минько², М. Р. Последович²

МНОГОКАНАЛЬНЫЙ СПЕКТРОМЕТР С ИНДУКТИВНО-СВЯЗАННОЙ МИКРОВОЛНОВОЙ ПЛАЗМОЙ

¹ НИИ ПФП им. А.Н. Севченко БГУ, ул. Курачатова, 7, 220108 Минск, Беларусь ² Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск,

Беларусь posledov@bsu.by

В последние годы, в связи с развитием новых производств, а так же из-за возросшего количества автотранспорта значительно увеличилось поступление загрязняющих веществ в окружающую среду, и, как следствие, по пищевым цепочкам в организм человека.

Особую биологическую опасность среди загрязняющих веществ представляют тяжелые металлы, к которым относятся более 40 химических элементов таблицы Д.И. Менделеева с атомными массами более 50 а. е. м. Здесь следует особо выделить хром, марганец, железо, кобальт, никель, медь, цинк, кадмий, олово, сурьму, теллур, ртуть, галлий, свинец, висмут.

Одним из основных методов контроля этих элементов является атомноэмиссионная спектрометрия с индуктивно-связанной плазмой (ИСП-АЭС). Широкому распространению метода способствуют такие его характеристики как:

- возможность определять большое число элементов (до 70);
- низкий предел обнаружения (10-7 10-4 г/л);
- высокая воспроизводимость (относительное стандартное отклонение 0,001 0,03);
- широкий диапазон определяемых концентраций (0,01 2000 мг/л).

Анализ потребностей в измерительном оборудовании и возможностей современного приборостроения показывает, что большинство задач по определению элементного состава биологических объектов окружающей среды можно рационально решать методом атомно-эмиссионной спектрометрии в струе индукционной плазмы. Этот метод оптимален для массового анализа и может успешно применяется на предприятиях, связанных с производством или переработкой продуктов питания, анализом окружающей среды, а также в медицине и биологии.

При разработке приборов для спектрального анализа применяют системы регистрации спектров с многоканальными фотоприемными устройствами, построенными на основе приборов с зарядовой связью (ПЗС) или диодных фотоприемников, которые изготавливаются в виде линеек или матриц. Эти приемники преимущества фотографических позволяют сочетать методов регистрации (одновременная регистрация изображения оптического спектра во всем рабочем диапазоне длин волн прибора) с достаточно высокой чувствительностью регистрации, приближающейся к чувствительности фотоэлектронных умножителей, и широким диапазоном спектральной чувствительности (160 – 2600 нм), зависящем от типа приемника [1].

Нами разработана и отлажена система регистрации спектров для многоканального ИСП спектрометра. Она построена на высокочувствительных быстродействующих ПЗС линейках TOSHIBA TCD1304, объединенных в единую цепочку (до 12 штук) с общей системой управления измерением и обработкой спектров. Число измерительных каналов такой системы составляет 43776, что позволит регистрировать одновременно весь необходимый спектральный диапазон (190 – 560 нм) и удовлетворить предъявляемые к подобному классу приборов требования по спектральному разрешению (до 0,015 нм).

Для возбуждения спектров разработан и изготовлен источник индуктивносвязанной плазмы, представляющий собой плазмотрон с СВЧ накачкой, выполненный в виде волноводно-коаксиального перехода, нагруженного на спиральную катушку. Внутри катушки смонтирована горелка, состоящая из концентрически расположенных трех кварцевых трубок. В зазор между внешней и промежуточной трубками подается охлаждающий поток воздуха, по средней трубке аргон, по центральной трубке осуществляется подача аэрозоля анализируемого раствора в плазму. Для возбуждения разряда необходима предварительная ионизация газа, которая осуществляется с помощью устройства, формирующего высоковольтную искру в потоке аргона. Накачка плазмотрона осуществляется СВЧ генератором на основе магнетрона мощностью 1 кВт и рабочей частотой 2,4 ГГц.

Спектрометр обеспечит качественное и количественное определение химических элементов в исследуемых пробах различной природы. Прибор укомплектован современным программным обеспечением с базой данных, которое позволяет управлять процессом измерений посредством персонального компьютера, обрабатывать и передавать на хранение или для дальнейшего использования результаты измерений.

Атомно-эмиссионный спектрометр с индуктивно-связанной микроволновой плазмой характеризуется следующими параметрами:

- диапазон анализируемых элементов Na U;
- предел обнаружения по Си не хуже 1 мкг/л;
- расход аргона не более 18 л/мин;
- одновременная регистрация спектров в диапазоне 190 560 нм;
- время анализа 5-10 мин. (не включая время пробоподготовки);
- потребляемая мощность не более 1,2 кВт.

Таким образом, ИСП-АЭС является высокочувствительным, многоэлементным, производительным, гибким методом анализа, позволяющим получать воспроизводимые результаты с малой абсолютной погрешностью при определении как микро- так и макроконцентраций элементов в самых разных по составу объектах.

[1] Дидковский Я.И., Коваленко М.Н., Минько А.А., Последович М.Р. / Спектральные приборы с многоканальными фотоприемными устройствами, разработанные на кафедре физической оптики БГУ // Сб. науч. трудов междунар. школы-конф. молодых ученых и специалистов «Современные проблемы физики», Минск: Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси.– 2012. – С. 367. УДК 536.42

Н.Н. Науменко¹, А.М.Лыков²

ПРИМЕНЕНИЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЫ В НЕКОТОРЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

naumenko@imaph.bas-net.by

² Московский государственный машиностроительный университет, Б. Семеновская, 38, 107023, г. Москва, Россия alykoy@mattex.ru

Использование низкотемпературной плазмы как высокоэнтальпийного источника нагрева газообразных и конденсированных сред в настоящее время используется в различных технологических процессах (синтез различных веществ, в т.ч. нано материалов, модификации поверхностей и др.).

При реализации плазменных процессов модификации поверхности различных (диэлектрических, металлических) материалов связи трудностью В с экспериментального изучения температурных условий, в поверхностном слое, которые определяют физико-химические превращения в нем, важную роль играют теоретические расчёты термических условий в этом слое. Для этих расчётов необходимо задание граничных условий на поверхности материалов с учётом технологических особенностей процесса, которые реализуются различными конструкциями плазменных генераторов, например, в конструкции с вынесенной электрической дугой [1]. В этой конструкции плазменного генератора удельные тепловые потоки на поверхности материала составляют $10^7 - 1.5 \cdot 10^7 \, \text{Br/m}^2$ при ширине обработки 40-60 мм за счёт магнитного управления ею. Такой подход к расчёту процесса упрочнения, например, железнодорожных колёс даёт удовлетворительное соответствие этих расчётов с экспериментальными значениями структурных и геометрических характеристик (фазовый состав, глубина) закалённого слоя [2].

Расчёты температурных условий в поверхностном слое при модификации его путем нанесения материалов на поверхность после их взаимодействия с плазменной дугой, например, в конструкции плазменного генератора с вынесенной электрической дугой требует дополнительной информации по теплообмену дуги с наносимым материалом на поверхность [2], при этом интенсивность теплообмена осциллирующей плазменной дуги с дисперсным материалом достигает 10^9 BT/м² [3]. Теоретические расчеты позволяют прогнозировать фазовый состав в системе наплавляемый слойматериал. Результат расчёта процесса наплавки представлены на рис 1.

Одной из возможных областей применения низкотемпературной плазмы является процесс высокотемпературной дистилляции с целью разделения различных веществ, например изотопов. В работе[4] представлены данные предварительных расчётов плазменной дистилляции изотопов урана с параметрами процесса, которые реализуются в конструкции плазменного генератора [1].На рис. 2 приведен график концентрации получаемого U₂₃₅ в зависимости от числа ступеней разделения К при

различных значениях ε (ε – отношение концентрации U₂₃₅ в паре в момент завершения процесса на ступени к его концентрации в расплаве в начале процесса дистилляции).

Приведенные примеры использования низкотемпературной плазмы, которые реализуются в плазменном генераторе с вынесенной электрической дугой, показывают его широкие технологические возможности.



Рис. 1 Изменение температуры в массе материала (в процессе остывания) в зависимости от времени на различной глубине на диаграмме распада аустенита при температуре наплавляемого материала 1600°С и толщине слоя 1 мм М – мартенсит; Б – бейнит; Φ + Π – феррит и перлит



Рис. 2 Концентрация изотопа U₂₃₅ в зависимости от числа ступеней разделения для различных значений ε. 1- ε=0.9; 2-1.0; 3-1.03

К

[1] Теплообмен движущейся в переменном магнитном поле электрической дуги с материалом./ Самсонов В.А., Лыков А.М., Науменко Н.Н.// 1988-Тезисы докладов. "Тепломассообмен ММФ"- Секция II.- Минск. ИТМО им. А.В. Лыкова АН БССР-С.88-90.

[2]. Плазменное упрочнение гребней локомотивных и вагонных колес./ Лыков А.М. Маслов В.Э., Глибина Л.А.//-2005- Вестник ВНИИЖТ- №1-С.31-33.

[3] Нагрев дисперсного материала электрической дугой./ Васильев Д.В., Лыков А.М., Сурис А.Л. //Физика и химия обработки материалов- 1996. -№ 6. -С.99-105.

[4] Плазменная дистилляция изотопов урана. /Лыков А.М.// - 2010.-Перспективные материалы.-№3.-С. 34-37

УДК 533.9; 621.793.6

Е.С. Воропай, А.Р. Фадаиян, С.В. Проценко, А.П. Зажогин

СПЕКТРАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ОБРАЗОВАНИЯ НИТРИДОВ ТИТАНА В ПЛАЗМЕ ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ НА ТИТАН СЕРИЯМИ СДВОЕННЫХ ЛАЗЕРНЫХ ИМПУЛЬСОВ

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь pcwco@rambler.ru, zajogin an@mail.ru

Физические процессы, связанные с образованием приповерхностной лазерной плазмы, разлетом ее и осаждением на подложке настолько многофакторны, что не удается получить достаточно простых закономерностей, описывающих эти процессы [1, 2]. Анализ и целенаправленное изменение компонентного, зарядового и энергетического распределения состава лазерного факела возможно на основе дополнительного воздействия на первичную плазму дополнительного лазерного воздействия. При использовании схем и методов двухимпульсного лазерного воздействия на мишень и плазму возможно одновременное проведение высокочувствительного спектрального анализа [2], контроля концентрации возбужденных и заряженных частиц плазмы и управлением составом плазмы, направляемой на мишень для использования в технологиях напыления тонких пленок.

Основная цель работы состояла в исследовании влияния дополнительного лазерного импульса на целенаправленное формирование компонентного и зарядового состава приповерхностной лазерной плазмы титана и образования нанокластеров нитридов титана.

Для проведения исследований использовался лазерный многоканальный атомноэмиссионный спектрометр LSS-1. Для возбуждения плазмы в спектрометре используется двухимпульсный неодимовый лазер (модель LS2131 DM). Лазер обладает широкими возможностями как для регулировки энергии импульсов (от 10 до 80 мДж), так и временного интервала между импульсами (от 0 до 100 мкс). Лазер может работать с частотой повторения импульсов до 10 Гц и максимальной энергией излучения каждого из сдвоенных импульсов до 80 мДж на длине волны 1064 нм. Длительность импульсов ≈ 15 нс.

Динамика изменения ионного состава приповерхностной плазмы исследована методом многоканальной атомно-эмиссионной спектрометрии при воздействии сдвоенных лазерных импульсов на пластинки из титана и титаната бария от энергии их (40-60 мДж), изменения временного интервала между ними (0-20 мкс)

Динамика образования молекулы TiN, изучена по эмиссионным спектрам этой молекулы (λ =613,8 нм) при воздействии серии одиночных и сдвоенных лазерных импульсов Наибольшая интенсивность полос наблюдается при интервале между импульсами порядка 7-11 мкс, а наименьшая при одиночных импульсах (интервал 0 мкс). На рис 1а приведена зависимость интенсивности линии от энергии импульсов, а рис. 1б зависимость интенсивности от номера слоя (глубины отверстия) для различных энергий возбуждающих импульсов.



Рис. 1. Зависимость интенсивности полосы TiN (613,8 нм) от энергии накачки (а) и б - номера импульса (глубины) при воздействии последовательности импульсов на образцы чисто-го титана

Энергия первого и второго импульсов в серии от энергии накачки равны: 52 и 37 мДж для 17 Дж; 58 и 42 мДж для 18 Дж; 67 и 46 мДж для 19 Дж.

Видно, что процесс образования радикалов TiN существенно увеличивается с увеличением энергии импульсов до 67 мДж и особенно это заметно с увеличением глубины кратера для чистого титана. Как видно из анализа рис. 1б для меньших энергий импульсов наблюдается два подъема интенсивности. для большой энергии с глубиной отверстия процесс несколько замедляется.

Наличие резкого временного порога скорости образования однозаряженных ионов и молекул TiN указывает на то, что причину наблюдаемых явлений необходимо искать в особенностях плазмообразования внутри образующегося достаточно глубокого канала. Картина плазмообразования в воздушной среде существенно усложняется из-за явления последействия, практически неизбежного при формировании глубоких отверстий сдвоенными импульсами, что вызывается накоплением аблированных микрочастиц и кластеров в атмосфере образующихся полостей. При этом воздействие последующего импульса, следующего через небольшой интервал времени, приводит к низкопороговому оптическому пробою воздуха, насыщенного микрочастицами металла, и появлению одновременно двух разнесенных в пространстве плазменных образований. Одним из них является обычный факел лазерной плазмы на аблируемой поверхности и затем на дне формируемого отверстия, а другим – плазменно-пылевое облако, также возникающее на оси лазерного пучка, но отстоящее от поверхности на определенное расстояние. В этом случае появление плазменно-пылевой области, отстоящей на определенное расстояние от поверхности, приводит с одной стороны к дополнительной экранировке, а с другой к созданию высокотемпературного плазменного облака высокого давления, разлетающегося преимущественно по направлению отверстия. Последний эффект и обуславливает увеличение скорости образования ионов и молекул по сравнению с одиночными или редко повторяющимися импульсами.

Выполненные спектроскопические исследования приповерхностной лазерной плазмы, образуемой вблизи поверхности титановой мишени, при воздействии на нее последовательных сдвоенных импульсов (25 имп на точку) показали возможность контроля и управления степенью ионизации плазмы и образованием нитридов титана. Определены временные интервалы между импульсами (7-10 мкс) и энергии накачки, обеспечивающие возможность получения максимальной интенсивности линий нейтральных и ионизированных атомов титана и нитридов титана.

УДК 539.2

А.Г.Мкртчян¹, А.С.Абраамян¹, В.П.Кривобоков², В.В.Ажаронок³

ОБ АКУСТОПЛАЗМЕННОМ ЛАЗЕРЕ

¹Институт прикладных проблем физики НАНАрмении, Гр.Нерсисяна, 25, 0014, Ереван, Армения <u>malpic@sci.am</u> ²Физико-технический институт, пр.Ленина, 2а, 634050, Томск, Россия <u>krivobokov@tpu.ru</u> 3Институт физики им.Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр.Независимости, 68, 220072 *Минск, Беларусь* azharonok@imaph.bas-net.by

Нами установлено, что при питании разрядной трубки током разряда, содержащим постоянную и переменную компоненты создается акустоплазменный режим работы, при котором возможны:

a) акустическая контракция (при значениях разрядного тока, существенно меньше тех, при которых происходит тепловая контракция), или наоборот, расконтрагирование разряда и таким образом, изменение выноса тепла из центра разряда к стенкам трубки, что позволяет также изменить КПД лазера, увеличить оптимальный энерговклад в разряд и давление в трубке.

b) из-за плазменных неустойчивостей и усиления акустических колебаний в плазме возникают самопроизвольные колебания, которые синхронизитуются на одной из акустических мод резонатора, образованного разрядной трубкой и возможно "перескакивание" с одной моды на другую. Установлено, что глубина модуляции тока разряда (отношение переменной компоненты к постоянной) при самопроизвольной генерации акустических колебаний может доходить до 25%, вследствие чего могут изменяться параметры разряда, вплоть до изменения вида ВАХ. Использование брюстеровских окон ослабляет ее, но не устраняет целиком. При этом, в такой самопроизвольной акустоплазме возникают импульсы тока большой амплитуды и малой длительности, которые резко уменьшают когерентные свойства лазера, поэтому для стандартного CO₂-лазера без активной стабилизации частоты гарантированная стабильность частоты $\Delta v / v_0$ не превышает ~10⁻³ лля кратковременная многочастотного режима работы и ~10⁻⁶ для одночастотного режима работы (∆vфлуктуация оптической частоты, vo- частота оптической генерации). Создание управляемого акустоплазменного режима разряда позволяет подавить самопроизвольное возникновение акустоплазмы, а НЧ модуляция разрядного тока приводит к такому же медленному изменению оптической частоты. В результате кратковременная гарантированная стабильность частоты повышается.

c) в результате осуществления в акустоплазме фазовых переходов и увеличения энерговклада можно повысить давление газа и концентрацию возбужденных частиц в разрядной трубке и, таким образом, повысить выходную мощность оптического излучения лазера.

d) в мощных импульсных лазерах в режиме предыонизации возможно создание акустоплазменного режима с дополнительным энерговкладом и при разрушении акустоплазменного состояния, происходит излучение оптической мощности, обусловленной дополнительным энерговкладом.

е) при определенных конструкции трубки и параметрах модуляции разрядного тока в акустоплазме возможны сильные акустические колебания, которые могут привести к погасанию разряда, несмотря на то, что на трубку подается напряжение, достаточное для поддержания разряда. После погасания разряда акустические колебания, связанные с модуляцией тока разряда затухают и разряд снова зажигается, и все повторяется. Таким образом, без использования электрооптических и механических модуляторов получаеся НЧ модуляция интенсивности оптического излучения с глубиной 100%, причем с максимальным КПД, поскольку нет потерь оптической мощности в элементах оптических модуляторов.

Важно отметить следующее: исследования показали, что при акустоплазменном режиме работы с синусоидальной модуляцией разрядного тока для CO₂-лазера (типа ЛГ-23, или аналогичного по параметрам) при замене стандартного блока питания и разрядной трубки на специально разработанные, можно поднять КПД с 3-4 до 20% и более. Работа частично выполнена в рамках договора БРФФИ-ГКНРА.
Био-медицинская физика

УДК (335.34+535.37):577.3

В. Ю. Плавский¹, Н. В. Барулин², А. И. Третьякова¹, А.В. Микулич¹, Л. Г. Плавская¹, А. С. Грабчиков¹, И. А. Ходасевич¹, В. А. Орлович¹

ФОТОБИОЛОГИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ, ИНДУЦИРУЕМЫЕ ПРЯМЫМ ВОЗБУЖДЕНИЕМ МОЛЕКУЛЯРНОГО КИСЛОРОДА В ИК ПОЛОСУ ПОГЛОЩЕНИЯ

¹Институт физики имени Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь plavskii@dragon.bas-net.by

²Белорусская государственная сельскохозяйственная академия, ул. Мичурина, 5 213407, г. Горки, Могилевская обл., Беларусь barulin@list.ru

Принято считать, что фотобиологические реакции, протекающие в живых организмах или растворах молекул, инициируются либо собственным поглощением света биомолекулами, либо их сенсибилизацией экзогенными или эндогенными хромофорами. Один из частных случаев сенсибилизации – фотодинамический эффект, протекающий чаще всего с участием синглетного кислорода, возбуждаемого через триплетный уровень красителя фотосенсибилизатора. Вместе с тем еще в 30-40 годах прошлого столетия была известна возможность прямого возбуждения растворенного молекулярного кислорода в полосы его поглощения, расположенные в области ~1270 и ~760 нм. Долгое время возможное значение прямого триплет-синглетного возбуждения молекулярного кислорода в фотобиологии не рассматривалось в силу низкой вероятности такого перехода из-за запретов по спину и четности. Однако в конце прошлого столетия появились данные, что терапевтическое действие лазерного излучения может быть обусловлено «светокислородным эффектом».

В настоящей работе с использованием модельных биологических систем (растворов билирубина) и в опытах на живых организмах (жаброногий рачок *Artemia salina L*) показано, что прямое возбуждение растворенного молекулярного кислорода может приводить к структурным изменениям в биомолекулах, а также оказывать регуляторное действие на биохимические процессы, контролирующие выклев науплий при кратковременном одноразовом облучении их цист.

Воздействие на цисты осуществляли непрерывным излучением с длиной волны 632,8 нм (гелий-неоновый лазер); 808; 976 нм (полупроводниковые лазеры); 1064; 1342 нм (лазеры на кристаллах Nd:YVO₄ с диодной накачкой); 1176 нм (лазер с диодной накачкой и с последующим BKP–преобразованием излучения 1064 нм) при плотности мощности P = 3 мBт/см². Исследования закономерностей фотохимических реакций в молекуле *Z*,*Z*-билирубина IX α с участием синглетного кислорода при различных схемах его возбуждения: (а) при воздействии излучения светодиодного источника в спектральном диапазоне, соответствующем длинноволновой полосе поглощения пигмента (сенсибилизированная генерация ${}^{1}O_{2}$); (б) при прямом возбуждении растворенного молекулярного кислорода путем воздействия мощного лазерного излучения в полосу его поглощения в ИК–области спектра ($\lambda = 1064$ нм, мощность излучения 1–3 Вт). В последнем случае исключалось прямое возбуждение молекул билирубина.

Проведенные исследования показали, что, несмотря на малое значение коэффициента молярной экстинкции О₂ в области 1064 нм (ε~10⁻⁴ M⁻¹·см⁻¹), воздействие лазерного излучения плотностью мощности 20-30 Bt/cm² (время воздействия *t* = 30-60 мин) приводит к изменению спектров поглощения и флуоресценции билирубина в органических и водном растворителях. Эффект максимален при использовании растворителей (CCl₄), характеризующихся большим временем жизни синглетного кислорода. Фотохимические реакции фактически предотвращаются при добавлении в облучаемый раствор тушителей синглетного кислорода (азид натрия в водном растворе). Фотодеструкции билирубина также не наблюдается при облучении билирубин-альбуминового комплекса, в котором билирубин глубоко погружен в пространственную глобулу макромолекулы белка. Данный факт можно трактовать как наличие эффекта «белковой защиты» за счет экранирования молекулы билирубина аминокислотами САЧ, характеризующимися высокой константой скорости взаимодействия с синглетным кислородом. В отличие от процессов, протекающих при прямом возбуждении синглетного кислорода, при воздействии излучения в полосу поглощения билирубина реакции фотоокисления протекают как в изотропных растворителях (органических и водном), так и в комплексе билирубина с альбумином. Показано, что взаимодействие билирубина с синглетным кислородом, генерируемым при его селективном прямом возбуждении излучением $\lambda =$ 1064 нм, сопровождается образованием фотопродуктов, флуоресцирующих с более высоким квантовым выходом, чем Z,Z-билирубин IXa. Сделан вывод о возможности протекания процессов конфигурационной и структурной фотоизомеризации при взаимодействии молекул билирубина с синглетным кислородом.

Воздействие излучения на зоопланктон в зависимости от его длины волны приводит либо к стимуляции выклева науплий ($\lambda = 808$; 1176; 1342 нм), либо к ингибированию ($\lambda = 632,8$; 976; 1064 нм). Поскольку лазерное излучение с 1176; 1342 нм находится вне полосы поглощения порфиринов, то возможную роль фотосенсибилизированных реакций с их участием следует исключить. Наличие выраженного фотобиологического эффекта при воздействии излучения с $\lambda = 1176$; 1342 нм позволяет также поставить под сомнение возможную роль прямых фотохимических реакций с участием оксигемоглобина, так как воздействие лазерного излучения с длиной волны $\lambda = 1064$ нм на его растворы не вызывает каких-либо обратимых или необратимых спектральных изменений.

По нашему мнению, наиболее вероятно, что в качестве акцепторов лазерного излучения ближней инфракрасной области спектра, определяющих его биологическое действие, выступают растворенный молекулярный кислород и вода – универсальная биологическая среда, играющая ведущую роль в поддержании и регуляции гомеостаза в живых системах. Учитывая низкое значение коэффициента молярной экстинкции триплет-синглетного перехода для молекулярного кислорода и относительно низкую плотность мощности воздействующего излучения (3 мВт/см²) концентрация ${}^{1}O_{2}$ в биологической системе достаточно низка, чтобы вызвать заметное деструктивное действие. Скорее всего, его образование в биологической системе способно играть сигнальную (триггерную) функцию, влияющую на протекание биохимических и физиологических процессов в организме, например, таких как запуск апоптоза.

Имеются также прямые подтверждения структурной альтерации воды при воздействии излучения ближней ИК-области спектра.

УДК 535.34; 539.1.047; 543.42

Г. Б. Толсторожев¹, И. В. Скорняков¹, М. В. Бельков¹, О. И. Шадыро²

ОПТИКО-ФИЗИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ ДИАГНОСТИКИ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ АРОМАТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

² Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь shadyro@open.by

Системный анализ физико-химических и биологических свойств, квантовохимический расчет и установление спектроскопических параметров высокой биологической активности молекул гидроксилсодержащих ароматических соединений является основой получения нетоксичных лекарств нового типа, которые способны регулировать свободнорадикальные процессы взаимодействия биомолекул и ингибировать (замедлять) размножение вирусов в организме человека.

Кислородсодержащие ароматические соединения (КАС), которые ранее успешно применялись в качестве консервантов пищевых продуктов, перспективны для лечения различных вирусных инфекций.

Применение таких соединений в качестве химико-фармацевтических средств определяет конкретные задачи междисциплинарных исследований: синтез и системный анализ физико-химических свойств; выявление спектроскопических признаков биологической активности молекул; установление взаимосвязи «электронная структура – оптические свойства – биомедицинская функция»; получение лекарств с широким набором фармакологических параметров.

Комплексное использование ИК спектроскопических и спектральнолюминесцентных экспериментальных методов, а также теоретических квантовохимических расчетов позволило расширить представления о тех физико-химических свойствах молекул, которые формируют устойчивый антивирусный эффект, выявить новые закономерности в проявлении молекулами КАС фармакологического действия.

Для возникновения фармакологической активности необходимо наличие в структуре КАС незамещенных гидроксильных групп, которые способны участвовать в образовании внутримолекулярных и межмолекулярных водородных связей. Высокая антиоксидантная и антирадикальная активность наблюдается в молекулах фенолов и близких по структуре соединений со свободными гидроксильными группами [1, 2].

Внутримолекулярные водородные связи (ВВС) образуются в молекулах КАС, когда фенольная группа ОН находится в *орто*-положении к другим электроотрицательным атомам. Наличие в молекулах КАС водородных связей проявляется в ИК спектрах в снижении интенсивности поглощения в области колебаний свободных ОН-групп и, соответственно, в увеличении поглощения в диапазоне связанных колебаний О–Н.

Для проявления молекулами КАС антивирусной активности необходимо наличие в *орто*-положении ароматического кольца не менее двух центров с протонодонорными и протоноакцепторными свойствами, которые связаны между собой ВВС конкретного типа и способны блокировать первичный этап связывания вируса с клеткой.

Для фенил- замещенных аминофенолов, которые проявляют активность против вируса герпеса простого, характерно образование в молекулах ВВС типа О–Н…N. Антивирусная активность производных 4,6-ди-*трет*-бутил-2-аминофенола усиливается, когда частота связанных колебаний О–Н в ИК спектрах близка к частоте свободных колебаний N–H (v_{max} = 3425 см⁻¹) [1].

В карбонилсодержащих аминофенолах главным признаком высокой активности против вирусов гриппа A и герпеса является преобладание в молекулах N-(3,5-ди-третбутил-2-гидроксифенил)ацетамидов сильной ВВС типа О-Н…О=С, что проявляется в ИК спектрах в смещении полосы поглощения колебаний О–Н до $v_{max} = 3060 \text{ см}^{-1}$ [1]. Образование водородной связи такого типа обусловлено ростом отрицательного заряда на атоме кислорода фенольной группы ОН. То есть, в антивирусно активных соединениях электронная плотность (UOH) на атомах кислорода $U_{OH} \ge -400 \text{ кДж/моль}$, в неактивных - UOH ≤ -350 кДж/моль [1].Для SO₂ производных аминофенола, проявляющих антивирусную активность в отношении вирусов герпеса, гриппа и ВИЧинфекции, характерно образование в молекулах трех типов BBC с участием OH-, NH- и SO₂-групп. При этом протоноакцепторная способность UOH кислорода гидроксильной группы противовирусно активных соединений всегда выше (UOH ≥ -300 кДж/моль), чем для неактивных соединений (UOH ≤ -290 кДж/моль). Для проявления анти-ВИЧ активности важна BBC типа O-H···O=S=O, которая сохраняется даже при кристаллизации анти-ВИЧ активных соединений. Наличию этой связи в молекулах соответствует в ИК спектрах полоса связанных колебаний О–H с $v_{max} = 3285$ см⁻¹ [1].

Между процессами образования водородных связей в молекулах производных бензальдегида и наличием у них антивирусных свойств также найдена эмпирическая корреляция. Для проявления противовирусной активности необходимо наличие в бензольном кольце производных бензальдегида незамещенных гидроксильных групп, которые участвуют в образовании ВВС типов О–Н…О и О–Н…О=С. При замене в ароматическом кольце группы ОН на метокси- группу водородные связи в молекулах не образуются, и антивирусная активность отсутствует [2].

Таким образом, системные исследования оптико-физических, радикалрегуляторных и антивирусных свойств природных и синтетических КАС позволяет выявлять малотоксичные противовирусные вещества, перспективные для биомедицинских применений.

- [1] Толсторожев Г. Б. Спектроскопические свойства фармакологически активных фенолов / Г. Б. Толсторожев, И. В. Скорняков, М. В. Бельков, О. И. Шадыро, Г. И. Полозов, В. Л. Сорокин, Г. А. Ксендзова // Опт. и спектр. – 2012. – Т. 112. – С. 783.
- [2] Толсторожев Г. Б. Водородные связи и противовирусная активность производных бензальдегида / Г. Б. Толсторожев, И. В. Скорняков, М. В. Бельков, О. И. Шадыро, С. Д. Бринкевич, С. Н. Самович // Журн. прикл. спектр. – 2012. – Т. 79. – С. 658.

A.S. Stasheuski, S.V. Lepeshkevich, M.V. Parkhats, V.A. Galievsky, B.M. Dzhagarov

DOES PHOTODISSOCIATION OF MOLECULAR OXYGEN FROM HEMOGLOBIN AND MYOGLOBIN YIELD SINGLET OXYGEN?

Institute of Physics, av. Nezalezhnasci , 68, 220072 Minsk, Belarus a.stasheuski@ifanbel.bas-net.by

Many protein-bound chromophores like chlorophyll in the isolated reaction centre of Photosystem II can generate singlet oxygen ($^{1}O_{2}$). Singlet oxygen appears to be a key component in oxidation reactions of host defense and immune system. Today it is well-known that $^{1}O_{2}$ mediates both apoptotic and necrotic pathways of cell death induced by photodynamic therapy. This explains a strong interest in a direct observation of the generation and quenching of $^{1}O_{2}$ in biological objects.

The aim of the present study is to investigate whether singlet oxygen can be generated during the photodissociation of molecular oxygen from hemoglobin and myoglobin [1].

Photodissociation of liganded myoglobin and hemoglobins is a well-known phenomenon. This process has been extensively used to investigate ligand rebinding kinetics and protein relaxation dynamics [2]. A 532-nm photon excites the heme into its ¹Q state, thereby depositing 53.8 kcal/mol of energy. The enthalpy difference between Hb + O₂ (gas) and HbO₂ is approximately 15.7 kcal/mol (averaged over α and β subunits of hemoglobin), so the heme group and O₂ share approximately 38.1 kcal/mol of excess energy. The partitioning of this excess energy is critically dependent on the mechanism of photodissociation, *i.e.* which electronic states are involved. A lot of spin-allowed reactions as a source of ground-state molecular oxygen can be proposed. If the excess energy contained in O₂ is more than 22.6 kcal/mol, then singlet oxygen can be generated.

After the photodissociation, a certain fraction of ligands rebinds from within the protein matrix. This process is called geminate recombination. For those proteins from which ligands succeed in escaping into the surrounding medium, rebinding is a bimolecular reaction. With respect to ${}^{1}O_{2}$ emission, the studied protein solutions are nonhomogeneous mediums.

Time-resolved luminescence in the near-infrared region (NIR) was measured on a nanosecond laser NIR spectrometer designed and developed in our laboratory [1], being a modified version of a previously described one [3]. The simple and highly sensitive method of luminescence quantification was developed and used to determine the upper limits for the quantum yields of singlet oxygen production [1].

We assume that the time window of the kinetic signal is known *a priori*, *i.e.* the moment, when the signal disappears practically completely after the photoexcitation, is known. Hence, each kinetics can be measured in a specially chosen time interval, which can be divided into two sequential parts containing an equal considerable number of time bins, so that (*i*) the signal has nonzero values only in the first part of the time interval and (*ii*) the noise and background in the former and latter parts of the kinetics are the same.

The proposed method was preliminary evaluated using model data sets and confirmed with experimental data for 5,10,15,20-tetrakis(4-*N*-methylpyridyl) porphyrin solutions. The method was shown to provide a determination of the integral luminescence intensity in a wide range of values even for kinetics with extremely low signal-to-noise ratio.

It is found that oxymyoglobin and oxyhemoglobin irradiation with visible light does not produce any detectable amount of singlet oxygen. The experimental data, obtained with the state-of-the-art technique, do not deny the possibility of singlet oxygen generation during the photodissociation of molecular oxygen from myoglobin and hemoglobin (Fig. 1).



Fig. 1 Dependencies of the upper limits for the primary quantum yield of ${}^{1}O_{2}$ production after the photodissociation, Q_{Δ}^{p} , and the quantum yield of ${}^{1}O_{2}$ production in the surrounding medium after the photodissociation, Q_{Δ}^{s} , on the sum of the rate constant of ${}^{1}O_{2}$ deactivation within the proteins, k_{Δ}^{p} , and the rate constant for the geminate ${}^{1}O_{2}$ rebinding to the heme iron, k_{gem} . The dependencies of Q_{Δ}^{p} and Q_{Δ}^{s} for myoglobin are shown by *solid* and *dashed curves*, respectively. The decision region for Q_{Δ}^{p} is shown as *gray area*. For comparison, the value of the primary quantum yield of photodissociation, $\gamma_{0}=0.23$, is presented as *open circles*

It is speculated that within the distal heme pocket, singlet oxygen should be mainly quenched by the heme. Moreover, the singlet oxygen deactivation by the heme is suggested to proceed through a collisional complex with appreciable charge transfer character, the physical deactivation channel being dominating. The estimated quantum yields of ${}^{1}O_{2}$ production in the surrounding medium after the photodissociation for oxyhemoglobin and oxymyoglobin are $3.4 \cdot 10^{-3}$ and $2.3 \cdot 10^{-3}$, respectively, being at least 68 and 105-times smaller than the primary quantum yields of photodissociation, γ_{0} . This means that, on the average, no more than one molecule of singlet oxygen from every hundred photodissociated oxygen molecules can succeed in escaping from the protein matrix of myoglobin as well as hemoglobin.

- Does photodissociation of molecular oxygen from myoglobin and hemoglobin yield singlet oxygen? / S.V. Lepeshkevich et al. // Journal of Photochemistry and Photobiology B: Biology. - 2013. - Vol. 120. - P.130.
- [2] A kinetic description of dioxygen motion within alpha- and beta-subunits of human hemoglobin in the R-state: geminate and bimolecular stages of the oxygenation reaction / S.V. Lepeshkevich et al. // Biochemistry. – 2004. – Vol. 43. – P. 1675.
- [3] Laser NIR lifetime spectrometer with nanosecond time resolution / V.A. Galievsky et al. // Instruments and Experimental Techniques. – 2010. – Vol. 53. – P. 568.

Andrei V. Pisliakov and Yuji Sugita

MECHANISM OF PROTON TRANSFER IN CYTOCHROME C OXIDASES AND NITRIC OXIDE REDUCTASES

RIKEN Advanced Science Institute, Wako-shi, Japan apisliakov@riken.jp

A key tool used by nature for energy storage and conversion is creation of the proton and ion gradients across various biological membranes by large, membrane-bound enzyme complexes. Recent breakthroughs in structural determination of membrane proteins have provided a basis for studying the action of such bioenergetic membrane systems at the molecular level. Understanding the function of biomolecular systems in terms of their structure (the so called structure-function relationships) is one of the major challenges of modern biophysics, biochemistry and structural and molecular biology.

Computational studies are of particular importance in providing the missing links between the (static) structures of proteins and their dynamics and function. I will present a summary of our recent projects [1-4], which focused on mechanisms of several important bioenergetic systems. The state-of-the-art biomolecular simulation methods, such as all-atom molecular dynamics (MD), hybrid quantum mechanics/molecular mechanics (QM/MM) and empirical valence bond (EVB), were used as a primary research tool. Specific examples include the cytochrome c oxidase (CcO) proton pumps, which are terminal enzymes in the *aerobic* respiration chain, and nitric oxide reductases (NOR) – the key enzymes of the *anaerobic* bacterial denitrification process. I will show how computational studies provide new insights into the mechanisms of proton transfer and pumping, enzymatic reactions, and evolution of respiratory enzymes.

Our simulations of a proton pump caa_3 oxidase from *T. thermophilus* [1] have revealed unique features of its proton transfer (PT) design comparing to the canonical (mitochondriallike) aa_3 enzyme [2] and, for the first time, directly demonstrated the proton shuttling mechanism, which involves the central Lys residue in the so-called K-channel. Another important finding includes a proton exit pathway (to a periplasmic side of the membrane), which is common to all A-type COXs, but not to NORs.

The first structure-based computational studies of nitric oxide reductases – the cNOR [3] and qNOR [4] enzymes – have fully characterized water channels and PT pathways inside these proteins, including a novel pathway in cNOR, which was not evident in the X-ray structure. Our results revealed that, despite their high structural similarity, cNOR and qNOR enzymes utilize strikingly different PT mechanisms, from the periplasm and cytoplasm, respectively. The finding implies that qNOR can be electrogenic, which would make it the first ever established proton pump in anaerobic organisms. In addition, a systematic computational analysis has yielded a number of *in silico*-designed NOR mutants, which either unambiguously disrupt the existing proton pathways or provide completely new pathways, thus demonstrating steps of molecular evolution "reconstructed" on a computer.

- [2] Pisliakov A.V. et al. Proc. Natl. Acad. Sci. USA 2008, vol. 105, p. 7726.
- [3] Pisliakov A.V. et al. PLOS Comp. Biol. 2012, vol. 8, e1002674.
- [4] Matsumoto Y. et al. Nature Struct. Mol. Biol. 2012, vol. 19, p. 238.

^[1] Lyons J.A. et al. Nature – 2012, vol. 487, p. 514.

УДК 535.34; 535.33/.34; 535.33/.34:621.373.826 Е. С. Жарникова, А. С. Сташевский, М. В. Пархоц

ВЛИЯНИЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СРЕДЫ НА ИЗЛУЧАТЕЛЬНУЮ И БЕЗЫЗЛУЧАТЕЛЬНУЮ КОНСТАНТЫ СКОРОСТИ ДЕЗАКТИВАЦИИ СИНГЛЕТНОГО КИСЛОРОДА В ЖИДКИХ РАСТВОРАХ

Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь e.jarnikova@ifanbel.bas-net.by

Синглетный молекулярный кислород ¹О₂ (a¹Δ₂) является главным действующим агентом в различных окислительных реакциях. Впервые зарегистрированная в 1976 году люминесценция (фосфоресценция) синглетного кислорода в жидких растворах позволила приступить к прямым спектральным исследованиям механизма и динамики фотофизических и фотохимических процессов с его участием [1]. Однако детектирование люминесценции синглетного кислорода ограничено низкими значениями квантовых выходов этого вида свечения в конденсированных средах. сигнала напрямую связано с константой скорости спонтанного Качество излучательного перехода $a^1 \Delta_g \rightarrow X \, ^3\Sigma_g$ в молекуле кислорода. Помимо этого, особый интерес уделяется тому, каким образом изменяются величины τ_{Λ} и k_r в зависимости от типа растворителя.

Величина τ_{Δ} очень сильно зависит от природы растворителя, изменяясь в пределах от 4 мкс в воде до 100 мс в некоторых пергалогенированных растворителях. Что касается излучательной константы скорости k_r , то существует прямое эмпирическое соответствие между k_r и показателем преломления среды n, а также функциями от n, такими, например, как поляризуемость среды $P=n^2-1/n^2+2$.

В изолированной молекуле O_2 в вакууме переход $a^1\Delta_g \rightarrow X^3\Sigma_g$ имеет природу магнитного дипольного, так как электрический дипольный переход строго запрещен. В диэлектрической среде в результате образования контактного комплекса с молекулой растворителя снимается запрет по симметрии и переход приобретает электрический дипольный характер и зависит от свойств среды. Детальный механизм этого явления проанализирован во многих работах.

В качестве объекта наших исследований использовали фотосенсибилизатор синглетного кислорода мезопорфирин IX диметиловый эфир в толуоле, ацетоне, а также смесях толуола и ацетона (с объемными соотношениями 80:20, 60:40, 40:60, 20:80). Все растворители были предварительно высушены и перегнаны. Измерения проводили не менее трех раз в каждом растворителе при температуре $20 \pm 1^{\circ}$ С. Люминесценция синглетного кислорода в области 1270 нм регистрировалась на созданном в Институте физики НАН Беларуси лазерном флуорометре синглетного кислорода с рабочим диапазоном 950 – 1400 нм. Возбуждение ФС осуществлялось на длине волны 531 нм (максимальная энергия импульса 4 мкДж, частота 1 кГц). Измерение показателей преломления п для всех растворителей и смесей проводили на рефрактометре Аббе ИРФ-22 на длине волны желтой линии натрия λ_D =589.3 нм.

Контрольные спектры поглощения регистрировались на спектрофотометре Cary-500 Scan (Varian) [2].

Используя мезопорфирин IX диметиловый эфир, для которого известен и надежно установлен квантовый выход фотосенсибилизированного образования ${}^{1}O_{2}$ (γ_{Δ} =0.82±0.10), одинаковый во всех растворителях и смесях, расчитывали значение величины k_{r} , при условии, что излучательная константа скорости прямо пропорционально отношению I_{so}/τ_{Δ} , где τ_{Δ} – время жизни, измеренное прямым методом из кинетики затухания ${}^{1}O_{2}$, а I_{so} – интегральная интенсивность люминесценции синглетного кислорода. Таким образом, в нашей работе величина относительной излучательной константы скорости $k_{r}^{\text{отн}}$ вычислялась относительным методом, и нормировалась на значение $k_{r}^{\text{толуол}}$ =1.0 в толуоле [2].

Следует отметить, что в спектрах поглощения наблюдается смещение максимумов полос в длиноволновый диапазон длин волн на ~7,5 нм и характер сдвига максимумов носит линейный характер в зависимости от объемных соотношений растворителей.

Полученные экспериментальные значения τ_{Δ} и относительные величины констант скоростей люминесценции $a^{1}\Delta_{g}$ -кислорода представлены в таблице 1. Анализ экспериментальных данных показал, что значения k_{r}^{oTH} хорошо коррелируют как с линейной функцией от показателя преломления среды n, так и с зависимостью от поляризуемости растворителя **P=n²-1/n²+2**. Линейный характер этой зависимости объясняется тем, что в диапазоне изменений показателя преломления n =1.359÷1.497 изменение функции P близко к линейному.

Растворитель	n	k_r^{OTH}	τ_{Δ} , мкс	Р
Толуол	1.497	1.0	29.8	0.29
Толуол:ацетон (80:20)	1.473	0.88	31.9	0.27
Толуол:ацетон (60:40)	1.444	0.74	35.7	0.26
Толуол:ацетон (40:60)	1.415	0.62	41.0	0.25
Толуол:ацетон (20:80)	1.386	0.50	46.3	0.23
Ацетон	1.359	0.39	52.9	0.22

Таблица 1. Относительные константы скоростей люминесценции $k_r^{\text{отн}}$ и времена жизни синглетного состояния кислорода τ_{Δ} , молярная поляризуемость среды Р.

Таким образом, методами лазерной кинетической флуорометрии определены излучательные константы скорости k_r люминесценции синглетного кислорода в растворах с изменяющимся коэффициентом преломления, а также времена жизни синглетного состояния молекулярного кислорода. Установлена корреляция между k_r и параметрами среды, такими как, показатель преломления n и поляризуемость P.

- Krasnovskii A.A., jr. Photosensitized luminescence of singlet oxygen in solution. / A.A. Krasnovskii, jr. // Biofizika – 1976. – V.21, № 4. – P. 748-749.
- [2] Джагаров Б.М. Влияние диэлектрических свойств среды на спонтанное излучение молекулярного синглетного кислорода. / Б.М. Джагаров и [др.] // ЖПС. – 2012. – Т.79, № 6. – С.898-874.

УДК 535.34

А. П. Иванов¹, В. В. Барун^{1,2}

АНАЛИТИЧЕСКИЙ УЧЕТ ПРОЯВЛЕНИЯ КООПЕРАТИВНЫХ ЭФФЕКТОВ В ПОКАЗАТЕЛЕ ПОГЛОЩЕНИЯ ЦЕЛЬНОЙ КРОВИ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

ivanovap@dragon.bas-net.by

² Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П. Бровки, 6, 220013 Минск, Беларусь <u>barun@dragon.bas-net.by</u>

В природе существует большое число объектов, в которых превалирующий вклад в поглощение света средой на определенных длинах волн вносят локальные, пространственно-ограниченные включения, а не весь ее объем. Одним из таких объектов является кровь, где основными поглощающими центрами являются эритроциты. Остальной объем крови, вне эритроцитов, практически не поглощает свет видимого и ближнего ИК диапазонов. Хорошо известно, что абсолютные значения показателя поглощения однородной массы вещества и дисперсной системы, содержащей отдельные включения, могут сильно различаться. Во втором случае поглощение всегда меньше, т.к. в объеме среды всегда имеются участки или «дырки», где свет ослабляется слабо. Опубликован ряд работ, например [1, 2], в которых изучен вклад пространственно-локализованных эритроцитов в показатель поглощения крови. Однако эти оценки получены в предположении о разреженной дисперсной системе, в которой включения независимы и не взаимодействуют друг с другом. Между тем, для цельной крови это не так. Объемная концентрация эритроцитов в ней достигает десятков %, так что среда является плотно упакованной, в которой должны проявляться кооперативные эффекты. Ответу на вопрос, сколь же сильно они влияют на показатель поглощения k цельной крови, посвящена данная работа. Физической предпосылкой учета влияния плотности упаковки *H* эритроцитов (гематокрита) на *k* является близость к 1 их показателя преломления относительно окружающей плазмы крови.

Разобьем мысленно объем цельной крови на «однорядные» слои, нормальные к падающему свету, так что в пределах каждого из них излучение проходит только через один эритроцит. Тогда

$$k = CH\mu_{a},\tag{1}$$

где μ_a - показатель поглощения гемоглобина, содержащегося в эритроцитах, а поправочный коэффициент *C* имеет вид

$$C = \ln[1 - \eta(1 - T_p)]/(\eta \ln(T_p)).$$
⁽²⁾

В (2) η - доля площади однорядного слоя, занимаемой частицами, *T*_p – коэффициент пропускания света эритроцитом. Можно показать, что

$$\eta = \bar{S} \left(H/V \right)^{2/3} = \gamma (H)^{2/3}, \tag{3}$$

где \overline{S} и V – средняя площадь проекции одного эритроцита на направление падения света и его объем. Таким образом, формулы (1–3) дают искомую аналитическую связь.

В работе [3] выполнены измерения показателя k(H) цельной крови в зависимости от H. Для относительных значений $k_{rel}(H) = k(H)/k(H = 0.086)$, усредненных по спектральному интервалу 250 – 600 нм, предложены линейные аппроксимации $k_{rel}(H) =$ 12.3H в интервале 0 < H < 0.42, а при $\lambda = 600 \div 1100$ нм – $k_{rel}(H) = 12.1H$. Коэффициенты корреляции этих приближений с экспериментальными данными больше 0.99. Вычислим $k_{rel}(H)$ с использованием предложенного подхода. Для оценок ограничимся только двумя членами разложения числителя формулы (2) в ряд Маклорена при H > 0.086. После простых преобразований получим

$$k_{\rm rel}(H) \approx (H/0.086)[1 + 0.5 \,\gamma H^{2/3}(1 - T_{\rm p})].$$
 (4)

Из (4) следуют два вывода, качественно согласующихся с опубликованными экспериментальными данными. Во-первых, влияние гематокрита H на показатель поглощения крови возрастает с увеличением H. Во-вторых, относительные значения $k_{\rm rel}$ меньше в области слабых поглощений (т.к. здесь коэффициент пропускания $T_{\rm p}$ ближе к 1), а именно – при $\lambda = 600 \div 1100$ нм, чем при $\lambda = 250 \div 600$ нм, так что коэффициент пропорциональности у зависимости $k_{\rm rel}(H)$ меньше при $\lambda = 600 \div 1100$ нм. Линейность приведенных выше аппроксимаций $k_{\rm rel}(H)$ связана с малостью второго слагаемого в правой части (4) по сравнению с 1 из-за усреднения по широкому интервалу длин волн. Действительно, значительная доля этого интервала включает малые значения $\mu_{\rm a}$ показателя поглощения крови, при которых оптический диаметр эритроцитов << 1, так что $T_{\rm p} \approx 1$ и кооперативные эффекты сита не наблюдаются. Если ограничиться только областью сильных поглощений (например, рассмотреть полосу Соре (Soret) около $\lambda = 415$ нм), то функция $k_{\rm rel}(H)$ заметнее отклоняется от линейной.

Сравнение результатов расчетов с опубликованными экспериментальными зависимостями показателя поглощения крови от гематокрита [3] показало их приемлемое согласие. Предложенный подход можно использовать для исследования световых полей в биотканях, содержащих кровеносные сосуды, и развития оптических методов определения объемной концентрации включений в дисперсную среду, например, концентрации эритроцитов в крови.

- Finlay J. C. Effect of pigment packaging on diffuse reflectance spectroscopy of samples containing red blood cells. / J. C. Finlay, T. H. Foster // Opt. Lett. - 2004. - V. 29. -P. 965.
- [2] Барун В. В. Локализованное поглощение света гемоглобинами суспензии эритроцитов. // В. В. Барун, А. П. Иванов // ЖПС. 2009. Т. 76. С. 516.
- [3] Meinke M. Empirical model functions to calculate hematocrit-dependent optical properties of human blood. // M. Meinke [et al.] // Appl. Opt. 2007. V. 46. P. 1742.

УДК 577.3+535.34

Г.А. Залесская, Л.Г. Астафьева

ИЗМЕНЕНИЕ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ОКСИГЕНАЦИИ КРОВИ ПРИ ФОТОГЕМОТЕРАПИИ

Институт физики им.Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 22072 Минск, Беларусь zalesskava@imaph.bas-net.by

B работе результаты комплексного приводятся анализа спектральных оксиметрии, данных характеристик облученной крови, показателей общего и биохимического анализов крови, которые использовались для изучения закономерностей фотомодификации крови при облучении *in vivo*. Рассмотрены результаты применения фотогемотера90

пии (ФГТ) - внутривенного (ВЛОК) и надвенного облучения крови (НЛОК) в комплексном лечении больных с сердечно-сосудистыми заболеваниями. На основании полученных результатов сделаны следующие выводы.

(1) При ФГТ преобразование поглощенной кровью световой энергии протекает через обратимый процесс диссоциациии комплексов гемоглобина с лигандами с изменением характеристик оксигенации венозной крови: степени насыщения гемоглобина кислородом S_vO_2 , содержания оксигемоглобина $F_v(HbO_2)$, парциального давления кислорода p_vO_2 .



Рис.1. Объемное распределение интенсивности источников излучения в плоскости сечения вены диаметром 3 мм, нормальной к оси цилиндра (НЛОК, $\lambda = 670$ нм, W= 20 мВт/см², t = 20 мин). При переходе от максимально освещенной части сосуда плотность энергии плавно уменьшается до минимального значения вблизи теневой поверхности сосуда

(2) Показано, что наблюдаемые при ΦГТ эффекты имеют нетепловую природу, термодиссоциация оксигемоглобина отсутствует. При режимах облучения, типичных для ВЛОК и НЛОК, методами компьютерного моделирования радиационно-тепловых полей оценены максимальные температуры нагрева кожи и тканей, пространственновременные распределения температурных полей. Максимальный нагрев крови не превышал 1-2 °C, Т_{мкс} снижалась до исходной температуры в течение нескольких секунд, терморегуляция тканей определялась кровотоком внутри сосуда.

(3) Впервые установлено, что $\Phi\Gamma T$ оказывает избирательное действие на показатели оксигенации отдельных пациентов (S_vO₂, F_v(HbO₂), p_vO₂, p_vCO₂). При одной и той же дозе они изменялись в пределах: 20% S_vO₂ <65%, 17 < p_vO₂ <50 мм рт.ст. при

УФОК ($\lambda = 254$ нм); 20% $< S_vO_2 < 60\%$, 17 $< p_vO_2 < 30$ мм рт.ст. при НЛОК ($\lambda = 670$ нм) и зависели от исходных значений S_vO_2 в венозной крови пациентов. Поэтому наряду с традиционными оценками средних величин по обследуемой группе пациентов представляется важным анализ причин, обуславливающих вариабельность изменений исследуемых показателей под влиянием ФГТ у отдельных пациентов, а также длительность их сохранения.

(4) Установлены отличия в закономерностях оксигенации крови во время процедур ФГТ и после окончания курса. У пациентов с первоначально сниженными показателями оксигенация во время каждой из процедур ФГТ они увеличивались, но затем снижались к началу следующей процедуры. Показатели отдельных пациентов, достигнутые к окончанию курса ФГТ, были как ниже, так и выше исходных, демонстрируя зависимость от резервных возможностей организма.

Сделан вывод, что ФГТ, оказывая влияние на кислородзависимые процессы, инициирует изменения кислород-транспортной функции крови и сродства гемоглобина к кислороду, облегчая отделение кислорода в комплексах гемоглобина с лигандами. В основе механизма терапевтического воздействия оптического излучения на кровь лежат фотопревращения комплексов гемоглобина с лигандами, нормализующие баланс между образованием активных форм кислорода (АФК) И ИХ ингибированием антиоксидантными системами [1]. Тем самым при ФГТ создавались условия для нормализации внутриклеточного содержания АФК. Регуляция процессов образования АФК в клетках и последующего развития свобонорадикальных реакций обуславливает единый механизм действия биостимуляции низкоинтенсивным оптическим излучением, поглощаемым кровью, применительно ко всем патологиям.

[1] Залесская Г.А. Молекулярные механизмы действия фотогемотерапии. / Г.А. Залесская, В.С. Улащик // Журн. прикл. спектр. – Т.76. – С. 51.

УДК 535.36; 535.24

С. А. Лысенко, М. М. Кугейко

ЭКСПЕРЕСС-АНАЛИЗ КОМПОНЕНТНОГО СОСТАВА ЦЕЛЬНОЙ КРОВИ

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск,

Беларусь <u>lisenko@bsu.by</u>

Компонентный состав крови определяет жизнедеятельность всего организма человека, поэтому его анализ является необходимой и наиболее массовой клинической процедурой. Важнейшими компонентами крови, определяющими транспорт кислорода, являются основные производные гемоглобина (окси-, деоксигемоглобина) и дисгемоглобины (карбокси-, мет- и сульфгемоглобин). Для неонатологии важным также является анализ крови на билирубин (продукт распада гемоглобина).

В настоящее время содержание гемоглобина и дисгемоглобиновых фракций (карбокси-, мет- и сульфгемоглобина) в крови определяют методом абсорбционной спектрофотометрии гемолизированной крови. Гемолиз крови проводится ультразвуком под давлением, либо с добавлением химического гемолизирующего раствора. Определение билирубина выполняется путем фотометрирования плазмы крови, предварительно получаемой центрифугированием крови в капилляре и разделением ее на плазму и эритроциты. Большая диагностическая значимость процедуры анализа крови и ее частая повторяемость в медучреждениях делает необходимой разработку новых методов и устройств, позволяющих врачу в режиме реального времени определять как можно большее количество параметров цельной крови пациента (без ее предварительной обработки) и оперативно принимать решение.

Авторами разработан оперативный метод компонентного анализа цельной крови, заключающегося в измерении коэффициента пропускания $T(\lambda)$ кюветы с цельной кровью толщиной 200 мкм в спектральном диапазоне $\lambda = 450-800$ нм, и определение содержаний в крови общего гемоглобина, дисгемоглобиновых фракций и билирубина, а также степени оксигенации крови, гематокрита и обобщенного параметра эритроцитов, связанного с их объемом и формой, из решения обратной задачи с использованием $T(\lambda)$ аналитических выражений, связывающих с искомыми параметрами. Разработанный метод учитывает многократное рассеяние света эритроцитами и возможные вариации их формы, что дает возможность выполнять компонентный анализ крови без ее предварительной обработки и использования дополнительных операций, присутствующих большинстве известных методов анализа крови (например, разбавление, гемолиз, центрифугирование, сферизация эритроцитов и т. д.). Вышеотмеченные аналитические выражения получены путем аппроксимации численных расчетов характеристик однократного и многократного рассеяния крови в зависимости от ее компонентного состава и морфологических параметров эритроцитов. Проведен анализ погрешностей метода, В условиях общей вариативности определяемых параметров.

УДК 535.37

Г. Б. Толсторожев¹, И. В. Скорняков¹, В. И. Пехньо², А. Н. Козачкова², Н. И. Царик², Н. И. Шарыкина³

ИК СПЕКТРОСКОПИЯ В ДИАГНОСТИКЕ И КОНТРОЛЕ ЛЕЧЕНИЯ ЗЛОКАЧЕСТВЕННЫХ НОВООБРАЗОВАНИЙ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

gbt@imaph.bas-net.by

² Институт общей и неорганической химии НАН Украины, Киев, Украина ³Институт фармакологии и токсикологии АМН Украины, Киев, Украина

В связи с устойчивой тенденцией роста заболеваемости злокачественными новообразованиями профилактика, диагностика и лечение онкологических заболеваний является актуальной задачей современной науки и медицины.

Поскольку любое онкологическое заболевание сопровождается биохимическими изменениями в таких молекулярных компонентах клеток как белки, липиды, нуклеиновые кислоты и углеводы, считается, что процессы образования и перерождения опухоли могут проявляться в ИК спектрах тканей органов [1].

Безусловный интерес представляет применение методов ИК спектроскопии для анализа молекулярных изменений в раковых клетках при введении в организм различных противоопухолевых препаратов. Полученная информация позволит конкретизировать представления о фармакологических свойствах вновь синтезированных лекарственных соединений, установить на молекулярном уровне механизмы их действия на возникновение, развитие и лечение злокачественных опухолей и разработать новые технологии ранней диагностики и лечения онкологических заболеваний.

В данной работе исследуются закономерности изменения ИК Фурье спектров тканей различных органов человека и других живых организмов (мыши линии C₅₇B1/6), как при возникновении в органах онкологических патологий, так и при лечении заболеваний новыми, малотоксичными лекарственными препаратами на основе комплексов палладия с метилендифосфоновой кислотой (МДФ).

Ранее было показано, что при наличии в тканях молочной железы человека опухолей злокачественной природы таких как инфильтрирующий рак в ИК спектрах тканей наиболее интенсивная полоса поглощения колебаний С=О находится в интервале 1700–1685 см⁻¹. В ИК спектрах тканей молочной железы при доброкачественной патологии (фиброаденома) и при дисгормональных процессах (мастопатия) интенсивные полосы поглощения расположены в интервале 1665–1650 см⁻¹ [1].

Аналогично, в ИК спектрах тканей щитовидной железы человека при таких распространенных заболеваниях, как недифференцированная форма рака и папиллярный рак, наиболее интенсивная полоса колебаний С=О регистрируется в интервале 1710–1685 см⁻¹ [2]. При не злокачественных заболеваниях (зоб, фиброзная

Далее, при исследовании ИК спектров тканей легких мышей линии $C_{57}B1/6$ в норме интенсивная полоса колебаний C=O с $v_{max} = 1656$ см⁻¹ зарегистрирована в интервале 1660–1650 см⁻¹. После перевивки мышам злокачественной опухоли меланомы B-16 и появления в легких множественных метастазов в ИК спектрах тканей легких наиболее интенсивная полоса с $v_{max} = 1692$ см⁻¹ присутствует в интервале 1700–1685 см⁻¹ [3].

Следовательно, появление злокачественных новообразований проявляется в ИК спектрах тканей органов одинаковым образом. При наличии в органах опухолей злокачественной природы в ИК спектрах тканей наиболее интенсивная полоса поглощения колебаний С=О находится в интервале $1710-1685 \text{ см}^{-1}$. В ИК спектрах тканей органов в норме или при доброкачественной патологии интенсивные полосы поглощения колебаний С=О расположены в интервале $1670-1650 \text{ см}^{-1}$. Это означает, что стабильно воспроизводимые закономерности изменений ИК спектров взаимосвязаны с колебаниями атомных групп молекул в тканях органов и могут быть использованы при разработке новых методов ранней диагностики рака.

Лечение мышей линии $C_{57}B1/6$ осуществлялось введением комплексов палладия с МДФ в дозе соответствующей 1/4 средней летальной дозы раствора 5 введений через 2 суток внутрибрюшинно. После курса лечения в ИК спектре ткани легкого полоса колебаний C=O с $v_{max} = 1657 \text{ см}^{-1}$ – самая интенсивная, а полоса с $v_{max} = 1691 \text{ см}^{-1}$ наименее интенсивна из всех анализируемых полос в области C=O колебаний [3].

Итак, ИК спектры тканей легкого животных, в которых присутствовали множественные метастазы меланомы В-16, после использования в качестве лечебного препарата комплексов палладия с МДФ соответствуют ИК спектрам тканей здорового легкого. Полученные спектроскопические данные подтвердили перспективность использования в химиотерапии синтезированных комплексов палладия с МДФ.

Таким образом, междисциплинарные исследования физиков, химиков, медиков и фармакологов продемонстрировали высокую эффективность методов ИК спектроскопии в диагностике онкологических заболеваний и в разработке лекарственных препаратов нового типа на основе комплексов палладия с МДФ.

- [1] Толсторожев Г. Б. Диагностика онкологических патологий тканей человека методами инфракрасной спектроскопии (Обзор) / Г. Б. Толсторожев, И. В. Скорняков, В. А. Бутра // Журн. прикл. спектр. – 2009. – Т. 76. – С. 805.
- [2] Толсторожев Г. Б. ИК-спектроскопические признаки злокачественных новообразований щитовидной железы / Г. Б. Толсторожев, И. В. Скорняков, В. А. Бутра // Журн. прикл. спектр. – 2012. – Т. 79. – С. 155.
- [3] Толсторожев Г. Б. Проявление противометастазной активности комплексов палладия с метилендифосфоновой кислотой в ИК спектрах / Г. Б. Толсторожев, И. В. Скорняков, В. И. Пехньо, А. Н. Козачкова, Н. И. Шарыкина // Журн. прикл. спектр. – 2012. – Т. 79. – С. 471.

УДК 577.345(047.2)+547.979.733:615.277-022.532 (047.2) В.А. Решетов¹, Ж. Гаррье², Л. Бездетная², В.П. Зорин¹

ПРИМЕНЕНИЕ ОПТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ДЛЯ АНАЛИЗА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЛИПОСОМАЛЬНЫХ ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРОВ В ВАСКУЛЯРНОЙ СИСТЕМЕ В ПРЕДКЛИНИЧЕСКИХ ЖИВОТНЫХ МОДЕЛЯХ

¹Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

vpzorin@mailru

² Лаборатория CRAN, Университет Лотарингии, 54500 Нанси, Франция

Детальное исследование процессов выхода фотосенсибилизаторов (ФС) из состава липосом и процессов разрушения липосомальных носителей в крови, определяющих поведение липосомальных форм лекарств в организме и возможности использования липидных носителей при доставке ФС к биологическим структураммишеням, является необходимым для прогнозирования результативности фотовоздействия при проведении фотодинамической терапии. Несмотря на растущее число работ с использованием липосомальных форм ФС, указанные вопросы редко рассматриваются комплексно.

В данной работе в качестве предклинической модели для анализа распределения классических и стерически защищенных липосомальных форм порфиринового ФС (мета-тетрагидроксифенилхлорин) в кровеносной системе *in vivo* использовалась хориоаллантоисная мембрана (ХАМ) куриного эмбриона без и с перевитой экспериментальной опухолью. Нами было показано, что измерения степени фотоиндуцированного тушения флуоресценции ФС являются поляризации И чувствительными методами оценки его выхода из липосом в модельных системах, дающими количественно совпадающие результаты. Для оценки кинетики выхода ФС метод фотоиндуцированного XAM использовался тушения ИЗ липосом В флуоресценции, характеризующийся высокой чувствительностью в широком диапазоне локальных концентраций хлорина в липосомах. С использованием данного метода, а других физико-химических методов показано, процессы также ряда что фармакокинетики ФС в крови сопряжены как с разрушением липидных носителей, так и с диффузионным перераспределением молекул ФС из наноразмерных везикул на белки плазмы крови.

Определение фармакокинетики ФС необходимо для количественного описания поведения лекарственного соединения в организме и оценки возможности накопления липосомальных форм ФС в составе опухоли за счет эффекта увеличенной проницаемости и удержания опухолевой ткани. Исследование фармакокинетики липосомальных ФС проводилось с помощью высокоэффективной жидкостной хроматографии. На рисунке 1 представлены результаты определения изменений концентрации мТГФХ в крови ХАМ при введении классической и стерически защищенной липосомальных форм данного ФС.



Следует отметить, что методом высокоэффективной жидкостной хроматографии не представляется возможным различить ФС, находящийся в крови в составе липосом, и перераспределившийся из состава носителей на компоненты крови. Для анализа поведения истинно липосомальных форм ФС в крови необходимо комбинировать данные о прераспределении ФС из липосом, разрушении носителей и концентрации ФС в крови, как представлено на рисунке 2. Как видно из полученных данных, стерически защищенная липосомальная форма ФС значительно дольше циркулирует в крови эмбриона.

Анализ распределения липосомальных ΦC в стенках кровеносных сосудов был проведен с помощью конфокального макроскопа на базе Leica SP2 / Leica Z16Аро. Полученные экспериментальные данные показали, что для накопления ΦC в стенках сосудов и дальнейшего перераспределения в прилежащие ткани требуется более 3 ч после инъекции ΦC .

УДК 535.21; 534

Г. И. Желтов¹, О. Г. Романов², Г. С. Романов³

ТЕРМООПТИЧЕСКОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ АКУСТИЧЕСКИХ ИМПУЛЬСОВ В БИОТКАНЯХ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ИМПУЛЬСНОГО ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>zheltov@dragon.bas-net.by</u>

² Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

romanov@bsu.by

³ Институт тепло- и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси, ул. П.Бровки, 15, 220072 Минск, Беларусь

Исследования процессов, происходящих при лазерном воздействии на биологические структуры, формируют фундаментальные основы развития новых наукоемких медицинских технологий и аппаратуры в офтальмологии, хирургии, неврологии и других областях. Актуальность и высокая эффективность этих исследований подтверждена многолетней медицинской практикой.

Одним из ярких эффектов воздействия импульсного лазерного излучения на светопоглощающие среды является термооптическое возбуждение акустических колебаний [1]. При умеренных плотностях поглощенной энергии основной вклад в процесс генерации акустических волн дает тепловое расширение той области среды, где происходит поглощение излучения [2].

Данная работа посвящена исследованию термомеханического воздействия лазерного излучения на биологические ткани. Проведено моделирование кинетики развития термических напряжений и деформаций, возникающих при воздействии импульсного лазерного излучения на биологические ткани в широком диапазоне длительностей лазерных импульсов. Построенные модели позволяют предсказать развитие кавитационных явлений при лазерном воздействии на различные биологические структуры. Результаты теоретических исследований сравниваются с модельными экспериментами [3].

Основу теоретического рассмотрения процесса термооптического возбуждения акустических импульсов в сплошной среде при действии на нее импульсного лазерного излучения, используемого в данной работе, составляет решение уравнений движения среды в форме Лагранжа, а также уравнения теплопроводности в геометрии, адекватной рассматриваемой задаче. В частности, если биологическая среда является пространственно-неоднородной, т.е. содержит включения в виде частиц, гранул различной геометрии и достаточно малой концентрации, процессы генерации и распространения акустических возмущений в ней могут быть рассмотрены на уровне единичного включения [4].

Развитая в работе физико-математическая модель позволяет описать процессы термомеханического действия импульсного и импульсно-периодического лазерного излучения на биологические ткани в широком диапазоне длительностей и частот повторения лазерных импульсов. В результате проведенного численного

моделирования процесса термооптического возбуждения акустических импульсов рассчитаны поля изменения температуры, давления, плотности, скорости среды в зависимости от параметров лазерных импульсов и структуры биоткани. Показано, что в области энерговыделения происходит формирование биполярного акустического сигнала, амплитуда и временная форма которого определяется длительностью лазерного импульса. Распространение волны сжатия – разрежения в окружающее пространство может приводить к образованию кавитационной фрагментации тканей в случае превышения прочности среды.

Разработанная методика расчета термомеханических явлений, развивающихся в пространственно-неоднородных средах при поглощении энергии коротких и ультракоротких лазерных импульсов, была также с успехом использована для исследования процессов воздействия лазерного излучения на поглощающие микро- [5] и наночастицы [6], внедренные в биологические ткани, и для описания селективного лазерного воздействия на ткани хориоретинального комплекса [7].

Уже сегодня ряд представленных результатов положен в основу новой эффективной технологии лечения структурно-функциональных нарушений после эндовитреальной хирургии отслойки сетчатки, включающей облучение глазного дна пациента сериями коротких лазерных импульсов [8]. Результаты подобных исследований могут быть также использованы для анализа процессов взаимодействия излучения с веществом в различных сферах применения импульсных лазеров, таких метрология, технологии неразрушающего контроля и других.

- [1] Лямшев Л. М. Лазерное термооптическое возбуждение звука. М.: Наука, 1989.
- [2] Романов О. Г. Лазерное возбуждение акустических импульсов в поглощающих средах: численное решение уравнений Лагранжа / О. Г. Романов, Г. С. Романов, Г. И. Желтов // Вестник ФФИ. – 2012. №3. – С. 38.
- [3] Zheltov G. I. Low-threshold cavitation in water using IR laser pulse trains / G. I. Zheltov, V. A. Lisinetskii, A. S. Grabtchikov, V. A. Orlovich // Applied Optics. – 2008. – V.47. – P. 3549.
- [4] Романов О. Г. Численное моделирование термомеханических процессов при поглощении лазерного излучения в пространственно-неоднородных средах / О. Г. Романов, Г. И. Желтов, Г. С. Романов // Инженерно-физический журнал – 2011. – Т.84. – №4. – С.715-722.
- [5] Романов О. Г. Численное моделирование воздействия импульсного лазерного излучения на малоразмерные поглощающие мишени / О. Г. Романов, Г. С. Романов, Г. И. Желтов // Известия РАН. Серия физическая. – 2010. – Т.74. – № 12. – С. 1744.
- [6] Романов О. Г. Воздействие фемтосекундных лазерных импульсов на металлические наночастицы в жидкости / О. Г. Романов, Г. И. Желтов, Г. С. Романов // Известия РАН. Серия физическая. – 2011. Т.75. – №12. – С. 1693.
- [7] Желтов Г. И. Селективное действие лазерных импульсов на ретинальный пигментный эпителий. Физические основы / Г. И. Желтов, Г. С. Романов, О. Г. Романов, Е. В. Иванова // Новое в офтальмологии. – 2012. – №3. – С. 37.
- [8] Тахчиди Х. П. Эффективность новой лазерной технологии микроимпульсного воздействия в лечении структурно-функциональных нарушений после эндовитреальной хирургии отслойки сетчатки / Х.П. Тахчиди, Г.Ф. Качалина, Г.И. Желтов, Т.А. Касмынина, И.М. Горшков, Е.В. Иванова // Офтальмохирургия. – 2010. – №2. – С.35.

УДК 535.672, 617-089

<u>А.В.Аладов¹</u>, С.Б. Бирючинский², М.В.Дубина³, А.Л.Закгейм¹, М.Н.Мизеров¹

ПОЛИХРОМНЫЙ СВЕТОДИОДНЫЙ ДИНАМИЧЕСКИ УПРАВЛЯЕМЫЙ СВЕТИЛЬНИК ДЛЯ ХИРУРГИИ

¹ Научно-технологический центр микроэлектроники и субмикронных гетероструктур РАН, Россия, Санкт-Петербург, 194021, Политехническая ул. 26 aaladov@mail.ioffe.ru

²Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики, Россия, Санкт-Петербург, 197101, Саблинская ул. 14. sbiruchinsky@yahoo.com

³ Санкт-Петербургский академический университет – научно-образовательный центр нанотехнологий РАН, Санкт-Петербург, 195220, Хлопина ул. 8, корп. 3 <u>dubina@spbau.ru</u>

Светодиодные (СД) мультикристальные источники света, построенные на принципе RGB-смешения цветов, обладают, по сравнению с лампами, возможностью простого и практически безынерционного управления количественными и качественными характеристиками излучения: яркостью, координатами цветности и спектральным составом[1]. Возможности RGB-смешения могут обеспечивать более комфортное восприятие операционного поля хирургами и реалистичное отображение цветовой гаммы тканей без их нагревания и наличия УФ-спектра. Новые светодиоды обладают увеличенным сроком службы, сниженным потреблением электроэнергии [2]

Проведенные спектральные исследования различных биологических тканей показывают существенное различие в коэффициенте поглощения в различных областях видимого спектра (рис. 1. а), что позволяет за счет смешения спектров сотавляющих RGB-светодиодов (рис. 2. б) создавать максимальное качество изображения оперируемой области.

В качестве элементной базы для создания управляемого источника света на принципе смешения цветов были проанализированы 3 версии полихромных излучателей: мультикристальных четырехцветная RGBA (красный/зеленый/синий/желтый), RGBW_c (красный/зеленый/синий/ + холодный белый) и RGBW_n (красный/зеленый/синий/ + нейтральный белый). Исследования показали, что RGBA и RGBW_n система обладает преимуществом более высоких значений индексов цветопередачи по отношению к RGBW_с версии, особенно для цветовых температур. Однако, что касается светоотдачи, то диапазона теплых RGBW_n система обладает более высокой светоотдачей (80-90 lm/W) по сравнению с четырехцветной (60-70 lm/W). В работе подробно исследуется поведение энергетических, спектральных и цветовых характеристик излучающих кристаллов различных цветов в зависимости от рабочего тока и температуры и влияние этих факторов на синтезируемые цвета.

В работе описывается прототип интеллектуального источника света, разработанный для исследований оптимальных алгоритмов освещения биологических тканей во время хирургических операции Функционально светильник за счет

варьирования освещенности и цветовой гаммы подсветки, избирательно обеспечивает максимальное качество визуализации выбранной биологической ткани.

Кратко, основные характеристики разработанного управляемого RGB источника света сводятся к следующему.

• Выходной световой поток до 4000 лм, обеспечивает освещенность до 25000 лк площадки 200х200 мм, с равномерным распределением по цвету порядка 5% и по интенсивности не более 30%;

• Область синтезируемых цветов составляет более 75% локуса реальных цветов по диаграмме цветности XYZ МКО 1931;

• Диапазон цветовых температур для белого света составляет 2500-12000К при индексе цветопередачи 70-90;

• Диаграмма направленности излучения при этом составляет около 20°

Конструктивно управляемый RGB источник света объединяет в одном корпусе собственно излучатель – мощный RGBW- светодиод, схему его питания, включающую платы процессора, драйверов, блока питания и радиоканала обмена данными с управляющим компьютером. Соответствующий интерфейс позволяет задавать цветовые и яркостные параметры и изменять их во времени по заданному алгоритму, а также отображать в специальном окне дисплея. Для поддержания стабильности цветовых параметров в широком диапазоне интенсивностей использовался метод широтно-импульсной модуляции по току и вводились системы обратной связи на базе датчиков цветности.



Рис.1 а - экспериментальные измеренные спектры отражения различных биологических тканей, б - спектры излучения кристаллов составляющих светодиодный модуль, в - оптическая схема хирургического светильника

Важным элементом конструкции полупроводникового источника света является выходная оптическая система, в задачи которой входит эффективное смешение излучения различных цветов от дискретных источников и формирование однородной по интенсивности и цвету освещаемой зоны. Для этой задачи была разработана и использовалась оптическая схема (рис.1 в) состоящая из призменного концентратора и трехлинзового объектива. Выполнение условий однородности подтверждается экспериментальными измерениями

[1] E.F.Schubert, J.K.Kim. Science v.308. (5726), 1274 (2005)

[2] А.В.Аладов, Е.Д. Васильева, А.Л.Закгейм, Г.В.Иткинсон, В.В.Лундин, М.Н.Мизеров, В.М. Устинов, А.Ф. Цацульников // Светотехника, N. 3, (2010), с. 8-17 УДК 573.6.086.83

С. Б. Кашевский

ПРОСТАЯ АНАЛИТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОБЪЕМНОЙ ИММУНОМАГНИТНОЙ СЕПАРАЦИИ В ПОЛЕ ПОСТОЯННОГО ЦИЛИНДРИЧЕСКОГО МАГНИТА

Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси, ул. П.Бровки, 15, 220072 Минск, Беларусь sbkashevski@tut.by

Сепарация клеток является важнейшей составляющей современной экспериментальной биологии и медицины [1]. Среди множества методов, использующих физические и биохимические различия клеток, отдельную группу составляют методы иммуномагнитной сепарации. Выделение целевых клеток в данном случае происходит под действие неоднородного магнитного поля на предварительно связанные с ними полимерные микросферы, содержащие в своем объеме магнитные наночастицы, а на поверхности – высокоспецифичные антитела.

Рассмотрен процесс выделения клеток, меченых суперпарамагнитными частицами, из вертикального цилиндрического контейнера, расположенного вплотную к диаметрально намагниченному цилиндрическому постоянному магниту. Теоретический анализ выполнен в пределе магнита бесконечной длины, напряженность магнитного поля которого неизменна по высоте, а в поперечной к оси цилиндра плоскости его распределение дается соотношением $\mathbf{H} = -(2\pi I_m R_m^2/R^2)(\mathbf{e} - 2(\mathbf{e}\mathbf{R})\mathbf{R}/R^2)$, где \mathbf{e} , I_m , R_m – направление намагниченности, намагниченность и радиус магнита соответственно, R – радиус-вектор, проведенный в данную точку от оси магнита. Фундаментальное свойство распределения – абсолютная величина напряженности поля диаметрально намагниченного магнита не зависит от направления его намагничивания и определяется только расстоянием до оси магнита: $H = 2\pi I_m R_m^2 / R^2$. Выражение для силы, действующей на меченую клетку получено в виде $\mathbf{F} = -4\pi I_m R_m^2 M[H(R)]R^{-4}\mathbf{R}$, где M[H(R)] - 3ависимость намагниченности метки от напряженности поля. Из последнего выражения можно видеть, что извлечение клеток, меченых суперпарамагнитными частицами, диаметрально намагниченным цилиндрическим магнитом бесконечной длины происходит независимо от направления намагниченности магнита. Уравнение движения меченой клетки в безынерционном приближении получено в виде

$$\frac{dR}{dt} = -\frac{4\pi I_m R_m^2 M_s}{3\eta d_h} \frac{1}{R^3} \left(1 + \frac{I_s}{2\pi \chi I_m} \frac{R^2}{R_m^2} \right)^{-1}.$$

где η — вязкость жидкости, d_h — гидродинамический диаметр клетки, χ — начальная магнитная восприимчивость метки.

Получены соотношения, связывающие основные эксплуатационные характеристики системы с ее геометрическими и физическими параметрами:

– время полной сепарации:

$$T = \frac{3\eta d_{\rm h}}{2M_s I_m} \left[(k+1)R_c R_m + (5k+3)R_c^2 + \left(\frac{40}{3}k+4\right)\frac{R_c^3}{R_m} + (20k+2)\frac{R_c^4}{R_m^2} + 16k\frac{R_c^5}{R_m^3} + \frac{16}{3}k\frac{R_c^6}{R_m^4} \right],$$

где $k = I_s / (2\pi \chi I_m)$, R_c – радиус сосуда с клетками,

– оптимальное отношение R_m/R_c , минимизирующее время сепарации:





Проведена экспериментальная апробации полученных результатов. Использован постоянный магнит NdFeB (N35) длиной 80 мм, радиусом 7.5 мм и намагниченностью 1070 Γc. Сферическая магнитная частица изготовлена из пластилина с диспергированными в нем суперпарамагнитными частицами магнетита.

Согласно представленным результатам, модель, разработанная для магнита бесконечной длины, может быть использована для расчетов устройств для объемной иммуномагнитной сепарации.

Рис. 1 – Время выделения частицы с относительного расстояния R_0/R_m (по отношению к радиусу магнита) до стенки контейнера, измеренное для различных положений контейнера относительно цилиндрического магнита. а,б,с – различные положения по высоте магнита z=L/2,L/4 и 0 соответственно, точки 1,2 и 3 – различное азимутальное положение относительно направления намагниченности магнита: $\varphi=0, \pi/4$ and $\pi/2$ соответственно. Сплошная линии – аналитическая зависимость.

[1] Eds. M. Zborowski, J. J. Chalmer Magnetic cell separation (Amsterdam: Elsevier, 2008).

УДК 612-006.6:615.837.3

Б.Э. Кашевский¹, С.Б. Кашевский¹, В.С. Кореньков¹, Т.И. Терпинская², В.С. Улащик²

РАЗРАБОТКА И АПРОБАЦИЯ IN-VIVO ОПТИМАЛЬНОЙ СИСТЕМЫ ЛОКАЛЬНОЙ МАГНИТНОЙ ГИПЕРТЕРМИИ ЗЛОКАЧЕСТВЕННЫХ ОПУХОЛЕЙ

¹ Институт тепло- и массообмена имени А.В. Лыкова НАН Беларуси, ул. П. Бровки, 15 220072 Минск, Беларусь.

<u>bekas@itmo.by</u>

²Институт физиологии НАН Беларуси, ул. Академическая, 28, 220072 Минск, Беларусь

Локальная магнитная гипертермия рака, заключающаяся в термическом разрушении опухоли за счет поглощения энергии переменного магнитного поля введенными в опухоль магнитными наночастицами, привлекает в последние годы большой интерес [1]. Подавляющая часть работ связана с получением магнитных наночастиц и изучением поглощения энергии переменного поля. При этом, в стремлении к достижению максимального тепловыделения, в лабораторных экспериментах и в экспериментах с мелкими животными, как правило [1], используют магнитные поля, неприменимые к человеку, прежде всего, из-за общего перегрева возбуждаемыми в теле токами Фуко. В основе наших работ [2-3], направленных на создание практической системы магнитной гипертермии, лежат два концептуальных положения. Во-первых, ΜЫ отказались от традиционно исследуемых суперпарамагнитных наночастиц (размерами ~ 10-15 нм) в пользу более крупных (~50-100 нм) высококоэрцитивных частиц и обосновали их преимущество, во-вторых, мы рассматриваем магнитную гипертермию как систему «частицы-поле», изучая возможности ее оптимизации с учетом ограничений, накладываемых как на параметры поля (физиологические ограничения), так и на характеристики частиц (ограничения, обусловленные особенностями динамического магнитного гистерезиса в системе подвижных частиц в жидкости). В данной работе обоснованы следующие подходы, обеспечивающие оптимальное функционирование пригодной для человека системы, использующей высококоэрцитивные магнитные наночастицы. Во-первых, для исключения непредсказуемого в живых тканях механического перемагничивания частиц, они должны обладать коэрцитивной силой, не превышающей 300-400 Э. При этом, для исключения существенного влияния тепловой вращательной диффузии магнитного момента в теле частицы, размеры частиц должны составлять не менее 50 нм. Далее, оптимальная амплитуда переменного магнитного поля определяется из амплитудной зависимости отношения $F(H_0) = w_1(H_0)/H_0$, в условия максимума котором H₀ - амплитуда поля, w₁ - удельная энергия, поглощаемая частицами за период изменения поля. В этом случае оптимальная частота поля определяется с учетом физиологического ограничения и составляет величину $f(\tilde{A}\ddot{o}) = 4.85 \cdot 10^8 (A/\dot{i} \cdot c))/H_0(\dot{A}/\dot{i})$. Исходя из этих представлений получены частицы железо-кобальтового оксида [4] оптимального состава (3% кобальта от общего содержания металлов). На рис.1 представлена измеренная оптимизирующая функция $F(H_0)$ для частиц различного состава. В экспериментах с различными жидкими носителями и различной

концентрацией частиц оценено влияние изменения в сеансе гипертермии механических



Рис. 1 – Зависимость оптимизирующей функции от амплитуды поля для частиц с различной массовой концентрацией Со (с)

свойств внутриопухолевой жидкости и процессов агрегирования магнитных частиц на поглощение энергии поля. На рис.2 представлены зависимости поглощаемой частицами в одном цикле изменения поля энергии в жидкостях с различной вязкостью (а) и при различном объемном содержании частиц (б).

В экспериментах с модельными опухолями на мелких животных (мыши) оценена эффективность метода в чистом виде (гипертермия в режиме 44 °C, 20 мин. привела к полному регрессу опухолей у ¹/₄



Рис. 2. - Удельное поглощение энергии переменного магнитного поля за один цикл перемагничивания в зависимости от амплитуды поля: (а) жидкости с разной вязкостью, 1 – керосин, 2 – масло АМГ-10, 3 – трансмиссионное масло, (б) суспензии с разной концентрацией частиц в Гемодезе, с= 1%(1), 5% (2), 10%(3)

животных) и в сочетании с химиотерапией (введение циклофосфана в дозе 50 мг/кг за 8 суток до сеанса гипертермии привело к увеличению числа регрессии опухолей до 1/3). Полученные результаты положены в основу разрабатываемого экспериментального комплекса для изучения локальной магнитной гипертермии на крупных животных.

- [1] Q. A. Pankhurst [et al.]. J. Phys. D: Appl. Phys. 2009. V. 42. P. 1-15
- [2] B. E. Kashevsky, S. B. Kashevsky, I.V. Prokhorov. Particuology, 2009. V. 7. P. 451-458
- [3] B.E. Kashevsky [et al.]. AIP CP 2010 V. 1311, P. 280-287.
- [4] K. A. Kekalo B. E. Kashevsky et al. J. Magn. Magn. Mater. 2009. V. 321. P. 1514-1516

УДК 615.015.3+616.314+543.429.22

В. А. Кириллов

РЕКОНСТРУКЦИЯ ДОЗ ОБЛУЧЕНИЯ МЕТОДОМ ЭПР ДОЗИМЕТРИИ ЭМАЛИ ЗУБОВ

Белорусский государственный медицинский университет, пр. Дзержинского, 83, 220116 Минск, Беларусь kirillov@bsmu.by

Суть метода ЭПР-дозиметрии эмали зубов заключается в образовании в зубной эмали под действием гамма радиации стабильных долгоживущих (>10⁶ лет) радикалов, количество которых находится в линейной зависимости от дозы облучения в интервале 0-300 Гр. Считывание информации о накопленной дозе в таком природном дозиметре осуществляется по спектрам ЭПР эмали зубов. Определяемая при этом индивидуальная поглощенная доза эквивалентна дозе, рассчитанной на все тело.

Разработан протокол ЭПР дозиметрических исследований, который включает в себя ряд последовательных этапов: отбор зубов, заполнение паспорта на удаленный зуб, препарирование эмали, регистрация спектров, дополнительное облучение образцов, математическая обработка спектров с последующей реконструкцией доз.

Создана компьютерная программа, в которой реализованы функции нелинейного моделирования спектров ЭПР эмали зубов, расчета формы линий и амплитуды сигналов модели, оценки радиационной чувствительности эмали, сложения индивидуальных спектров, построения калибровочной прямой с последующей оценкой дозовой нагрузки. Программное обеспечение позволяет в автоматическом режиме реконструировать накопленные дозы облучения по исходному спектру ЭПР эмали зубов с приемлемой точностью. Использование такого подхода позволяет сократить примерно в 15 раз сто-имость и продолжительность ЭПР-дозиметрических исследований по сравнению с методом добавленных доз.

В аварийных ситуациях дозовая нагрузка формируется за счет внешнего гамма облучения. Однако в эмали зубов парамагнитные центры могут образовываться за счет различных видов электромагнитного излучения (медицинские Х-лучи, ультрафиолетовая компонента солнечного света, естественный радиоактивный фон) и механического воздействия на эмаль в процессе лечения зубов. Эти побочные свободные радикалы дают вклад в амплитуду дозиметрического сигнала, что, как следствие, приводит к завышению величины дозы аварийного облучения. Устранение вклада этих артефактов в дозовую нагрузку является одной из приоритетных задач ЭПР дозиметрических исследований.

Прохождение диагностического рентгеновского обследования зубочелюстной системы приводит к формированию в эмали зубов парамагнитных центров. В случае раздельного воздействия на эмаль зубов Х-лучей или гамма радиации реконструкция индивидуальных поглощенных доз по спектрам ЭПР проводилась путем дополнительного облучения образцов эмали от источника электромагнитного излучения одинаковой энергии с источником, под действием которого были сформированы парамагнитные центры. При одинаковой приложенной дозе интенсивность сигнала ЭПР, индуцированного в эмали зубов Х-лучами, на порядок превышала интенсивность сигнала, индуцированного гамма радиацией. Такой эффект приводил к неравнозначному завышению дозовой нагрузки, сформированной в эмали зубов внешней гамма радиацией. В частности, реконструированная по спектрам ЭПР эмали зубов доза, сформированная сочетанным воздействием Х-лучей/гамма радиации в отношении 100/200, 100/250 и 100/300мГр, превышала примерно в 3,5 раза приложенную дозу от источника гамма радиации, в 8,4 – от источника рентгеновских лучей и в 2,5 – суммарную приложенную дозу от обоих источников. В дальнейших модельных экспериментах при тех же соотношениях приложенных доз установлено, что при вычитании дозы, сформированной в эмали только Х-лучами, из суммарной дозы от обоих видов электромагнитного излучения величина рассчитанной дозы практически совпадает с приложенной дозой от источника гамма радиации. Результаты этих экспериментов легли в основу способа расчета аварийных доз облучения лиц, которые были подвергнуты рентгеновскому обследованию зубов, челюсти и черепа.

Ультрафиолетовое излучение также вызывает образование свободных радикалов в эмали зубов. Эти парамагнитные центры тождественны по природе радикалам, сформированным под действием Х-лучей и гамма радиации. Устранение таких радикалов осуществляется снятием тонкого поверхностного слоя эмали с зубов путем механической обработки стоматологическими борами на низких оборотах вращения.

Фоновое гамма-излучение характеризуется мощностью 12×10⁻⁸ Гр/час. При такой мощности за год проживания накапливается доза около 1,0 мГр. Величина дозы фонового облучения рассчитывалась с учетом возраста индивидуума.

В ЭПР дозиметрии используются удаленные по стоматологическим показаниям зубы. Эти зубы, как правило, подвергались лечению *in vivo* с использованием современных высокоскоростных бормашин. Выявлено, что такое механическое воздействие приводило к формированию в зубной эмали парамагнитных центров. Механо-индуцированный сигнал находился в одной спектральной области с радиационно-индуцированным сигналом. При сочетанном механическом и радиационном воздействии на эмаль зубов независимо от последовательности этих операций происходило увеличение интенсивности дозиметрического сигнала в спектрах ЭПР. В отличие от радиационно-индуцированный сигнал представлял собой изотропный синглет. Такое различие спектральных характеристик позволило провести деконволюцию этих сигналов в спектрах ЭПР эмали зубов путем нелинейного компьютерного моделирования и учесть вклад механо-индуцированных радикалов в амплитуду дозиметрического сигнала ЭПР, сформированного внешней гамма радиацией.

Таким образом, для окончательного расчета аварийной дозы облучения по спектрам ЭПР эмали зубов требуется учесть вклад в ее величину диагностического рентгеновского обследования зубочелюстной системы, фонового космического излучения, ультрафиолетовой компоненты солнечного света и механо-индуцированных радикалов. Точная оценка индивидуальных поглощенных доз является необходимым условием для адекватного выявления группы риска среди населения Беларуси, пострадавшего в результате аварии на Чернобыльской АЭС. УДК 537.876:615.849.11

В.В. Лукьяница

ПЕРВИЧНЫЙ МЕХАНИЗМ ВОЗДЕЙСТВИЯ КВЧ-ИЗЛУЧЕНИЯ НА БИООБЪЕКТЫ, ОБУСЛОВЛЕННЫЙ СТРУКТУРНЫМИ ПЕРЕСТРОЙКАМИ ВОДЫ

Белорусский государственный медицинский университет, пр. Дзержинского 83, 220116 Минск, Беларусь bsmu@bsmu.by

Известно, что электромагнитное излучение КВЧ-диапазона может оказывать существенное влияние на биообъекты и даже используется для лечения человека. Однако предпринимаемые в течение 25-30 лет попытки по установлению первичного механизма воздействия КВЧ – излучения на биообъекты до сих пор не увенчались успехом.

Целью данной работы является определение этого первичного механизма.

В связи с этим нами выдвинута рабочая гипотеза, согласно которой данный механизм связан со структурными перестройками воды – основного компонента любых биообъектов. Основанием для этого являются следующие факты: вода способна поглощать КВЧ – излучение и изменять при этом свою структуру [1].

Проведены сравнительные исследования изменения структуры дистиллированной воды и эффективности (скорости) роста и развития растений пшеницы в зависимости от времени (дозы) воздействия КВЧ – излучением (f=53, 5 ГГц) от 5 до 90 минут.

Для обнаружения и визуализации структурных изменений воды использовался метод замораживания с последующим микрофотографированием [2]. Воду наливали в чашки Петри ($\Phi = 35$ мм), облучали и затем замораживали при температуре -23 фотографировали °C. Полученный лед на микроскопе «Биолам» микрофотонасадкой МФН – 12 фотоаппаратом CanonEOS – 40 D на увеличении 56^{x} (объектив 8^{x} , фотоокуляр 7^{x}). Снимкиформата 2816 х 1880 пикселов обрабатывались с помощью компьютерной программы контрастирования «ACDSee Pro2».

Каждая партия семян пшеницы (по 20 штук)перед посадкой в одинаковые ёмкости с землёй облучалась в течение того же времени, что и образцы воды, налитой в чашки Петри.

Установлено, что с увеличением времени облучения происходит как усложнение структуры воды (возрастает ее «дефектность»), так и появление более высоких растений при одновременном увеличении их доли в общем числе растений. Совместный анализ этих результатов показал, что имеют место коррелированные по времени КВЧ – облучения изменения структуры воды и скорости роста растений. Кроме того, при временах облучения более 60 минут в объеме льда (воды) формируется 3D –матрица плотности, а на его поверхности наблюдаются участки с игольчатой структурой, которая свидетельствует о наличии электростатического поля, генерируемого дипольными моментами ассоциаций молекул воды.

355

С учетом полученных результатов сделано заключение, что первичный механизм воздействия КВЧ – излучения на биообъекты обусловлен электростатическим полем, генерируемым образующимися под воздействием КВЧ – облучения крупномасштабными ассоциациями молекул воды (их суммарными дипольными моментами) и отражающим их внутреннюю структуру.

- [1] Лукьяница В.В. Структурные изменения воды под действием аппарата КВЧ терапии / В.В.Лукьяница, И.А.Мельников, Л.Л.Малькевич // Медицинский журнал. 2013. № 1. С. 92-94.
- [2] Эмото М. Послание воды: тайные коды кристаллов льда / М.Эмото, София, 2005.

УДК 535.36; 535.24

С. А. Лысенко, М. М. Кугейко

КОЛИЧЕСТВЕННАЯ МУЛЬТИСПЕКТРАЛЬНАЯ ЭНДОСКОПИЯ СЛИЗИСТЫХ ОБОЛОЧЕК

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

<u>lisenko@bsu.by</u>

Из всех существующих методов ранней диагностики опухолей, поражающих слизистую оболочку полых органов, включая дыхательные пути и пищеварительный остается эндоскопическое исследование. Современные тракт, ведущим эндоскопические системы формируют высококачественное изображение ткани в реальном времени непосредственно на дисплее компьютера. Однако изображения ткани в естественном цвете не позволяют достигнуть высокой точности диагностики, в связи с влиянием на них анатомических особенностей ткани и спектральной чувствительности эндоскопической системы. Кроме того, обычное эндоскопическое исследование основывается на субъективной оценке изображения врачом, исходя из его опыта, квалификации и психоэмоционального состояния (при утомлении цветовосприятие врача снижается, при возбуждении – усиливается).

Функциональные возможности современной эндоскопической аппаратуры могут быть существенно расширены за счет увеличения спектральных слоев изображения исследуемой ткани. Это позволит дополнить обычную визуальную диагностику слизистой оболочки картами пространственных распределений ее структурноморфологических параметров, характеризующих патологический процесс.

Авторами разработан метод оперативного мониторинга диагностически важных параметров слизистых оболочек (концентрации гемоглобина, степени оксигенации крови, среднего диаметра капилляров и параметра, характеризующего средний размер рассеивателей ткани). Метод основан на получении эндоскопического изображения ткани в диффузно отраженном свете с длинами волн 450, 480, 577, 600, 660 и 700 нм и попиксельной обработки полученного изображения с использованием устойчивых регрессионных связей между относительными спектральными характеристиками изображения и искомыми параметрами ткани. Выбранные длины волн возбуждающего обеспечивают наилучшую обусловленность обратной излучения, задачи И устойчивость ее решения к погрешностям оптических измерений. Вышеотмеченные регрессий получены на основе численного моделирования спектра диффузного отражения ткани методом Монте-Карло при широкой вариации модельных параметров. Корректность модельных расчетов подтверждена их хорошим соответствием экспериментальным данным. Оценены погрешности предлагаемого метода в условиях общей вариативности структурно-морфологических параметров ткани. Проведено его традиционными сравнение с методами интерпретации мультиспектральных изображений биологических тканей, основанными на решении обратной задачи для каждого пикселя изображения в приближении различных аналитических или численных молелей.

УДК 577.345 (075.8)

Л.В. Кухаренко¹, С.А. Чижик², Е.С. Дрозд², С.В. Сыроежкин², М.В. Гольцев¹, Л.Г. Гелис³, Е.А. Медведева³, И.В. Лазарева³

АСМ В ДИАГНОСТИКЕ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ ТРОМБОЦИТОВ

¹Белорусский государственный медицинский университет, пр-т. Дзержинского, 83, 220116, Минск, Беларусь

lvk@europe.com

²Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларуси, ул. П. Бровки, 15, 220072, Минск, Беларусь

lizadr@tut.by

³Республиканский научно-практический центр «Кардиология», ул. Р.Люксембург, 110, 220036, Минск, Беларусь

В последние годы атомно-силовая микроскопия (ACM) широко используется для исследования морфофункциональных особенностей тромбоцитов, что позволяет выявить ранние этапы их внутрисосудистой активации, охарактеризовать гемостазиологический статус у лиц со стабильной стенокардией (ФК II/ III) и у лиц с нестабильным течением ИБС, а также контролировать применение фармакологических средств, влияющих на их функции. В данной работе методом АСМ визуализировались спонтанные тромбоцитарные агрегаты, определялось их количество и количество тромбоцитов в агрегатах, а так же определялись морфометрические характеристики тромбоцитов у здоровых лиц и у лиц со стабильной стенокардией.

Оценка внутрисосудистой активации тромбоцитов осуществлялась с помощью ACM NT-206 (ОДО «Микротестмашины», Беларусь) в режиме прерывистого контакта на воздухе с использованием стандартных кремниевых кантилеверов NSC11 (MikroMasch). Исследования поверхностной морфологии тромбоцитов при больших окнах сканирования проводились на ACM Nanoscope (R) IIIa MultiMode (Digital Instruments/Veeco) в tapping режиме на воздухе с использованием стандартных кремниевых кантилеверов NSC15/100 (NT-MDT, Россия). Алгоритмы для определения морфофункционального состояния тромбоцитов реализованы в виде компьютерной модели в пакете MatLab.

Циркулирующие в кровотоке тромбоциты при отсутствии патологических активирующих факторов интактны, практически не взаимодействуют друг с другом, с другими клетками крови и эндотелием сосудов. Интактные тромбоциты имеют вид бесцветных телец размерами 2-5 мкм дисковидной или овальной формы. На рис.1 представлено ACM изображение тромбоцитов здорового человека при окне сканирования 35х35 мкм². Диаметр интактных тромбоцитов здоровых лиц в среднем составлял 2,5 – 3 мкм, высота варьировала от 300 нм до 500 нм.

При ишемической болезни сердца наблюдается высокая чувствительность кровяных пластинок к индукторам активации и их повышенная готовность к спонтанной агрегации в кровяном русле. На рис.2 представлено ACM-изображение тромбоцитов пациента со стабильной стенокардией напряжения при окне сканирования



Рис.1. а - АСМ-изображение тромбоцитов здорового человека при окне сканирования 35х35 мкм²; б - профиль сечения для определения диаметра тромбоцита.

45х45 мкм². Активированные тромбоциты из дисковидной формы превращаются в сферические с многочисленными короткими и длинными выпячиваниями мембраны. Высота кровяных пластинок изменяется от 300 нм до 1,9 мкм. Визуализировано образование длинных узких филоподий тромбоцитов. Ширина филоподий составляет от 30 нм до 390 нм, их длина варьирует от 250нм до 3,2 мкм. На данном ACM изображении также визуализированы небольшие тромбоцитарные агрегаты. Количество тромбоцитов в агрегатах изменяется от 2 до 5.



Рис.2. а - АСМ-изображение тромбоцитов пациента со стабильной стенокардией напряжения при окне сканирования 45х45 мкм²; б - профиль сечения для определения диаметра тромбоцита.

Таким образом, методом ACM показано, что у лиц со стабильной стенокардией напряжения наблюдается увеличение числа дискоэхиноцитов и сфероэхиноцитов. Возрастание внутрисосудистой активации тромбоцитов способствует образованию спонтанных тромбоцитарных агрегатов циркулирующих в кровотоке. Метод ACM позволяет дифференцировать внутрисосудистую активацию кровяных пластинок в кровяном русле и может быть использован в качестве диагностического.

УДК 535.34; 539.1.047; 543.42

Г. Б. Толсторожев¹, М. В. Бельков¹, И. В. Скорняков¹, О. И. Шадыро², С. Д. Бринкевич², С. Н. Самович²

БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ГИДРОКСИЛСОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗАЛЬДЕГИДА И ЕЕ ПРОЯВЛЕНИЯ В ИК СПЕКТРАХ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

² Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь shadyro@open.by

Гидроксилсодержащие производные бензальдегида (БА) обладают высокими антиоксидантными и радикалрегуляторными свойствами, проявляют радиопротекторную, антибактериальную, противовирусную активность, могут стать противораковыми химиотерапевтическими средствами. Проблема создания на основе производных БА новых лекарственных препаратов диктует необходимость глубоких и всесторонних исследований физико-химических и медико-биологических свойств этих соединений [1-3].

Целью данной работы является выявление эмпирических корреляций между биологической активностью и изменениями ИК Фурье спектров близких по строению, но разных по биологической активности гидроксилсодержащих производных БА: 4-гидроксибензальдегид (БА 1), 3-метокси-4-гидроксибензальдегид (БА 2), 3,5-диметокси-4-гидроксибензальдегид (БА 3), 2-гидроксибензальдегид (БА 4) и 2,3-дигидроксибензальдегид (БА 5).

Соединение БА 1 биологически мало активно. Остальные соединения БА 2–5 способны эффективно замедлять реакции свободнорадикальной фрагментации, что предполагает использование этих соединений в качестве модуляторов свободнорадикальных процессов в организме человека. Исследования на клеточных культурах показали, что соединения БА 2, БА 4 и БА 5 обладают также противовирусной активностью [1].

ИК спектры 10^{-3} М растворов гидроксилсодержащих производных БА в CCl₄ регистрировались на ИК Фурье-спектрометре NEXUS при спектральном разрешении 2 см⁻¹ с усреднением 256 сканирований.

В ИК спектре раствора БА 1 в области свободных колебаний О–Н зарегистрирована интенсивная полоса с частотой максимума поглощения (v_{max}) при 3598 см⁻¹, в области связанных колебаний О–Н, поглощение практически отсутствует.

В спектре биологически активного БА 2 в области связанных колебаний О–Н наблюдаются полоса поглощения (ПП) с $v_{max} = 3538 \text{ см}^{-1}$. Аналогично в ИК спектре БА 3 регистрируется интенсивная ПП связанных колебаний О–Н с $v_{max} = 3536 \text{ см}^{-1}$.

Эти полосы обусловлены образованием в молекулах БА 2 и БА 3 внутримолекулярной водородной связи (BBC) типа О-H…O-CH₃ [2].

В ИК спектре раствора активного соединения БА 4 зарегистрированы две широкие ПП колебаний О–Н с $v_{max} = 3313$ и 3145 см⁻¹. В области связанных колебаний

C=O имеются две ПП, которые смещены в низкочастотную область до $v_{max} = 1668$ и 1648 см⁻¹. По данным [2] наличие выше перечисленных ПП в ИК спектре БА 4 взаимосвязано с образованием в молекуле BBC типа O–H…O=C.

В ИК спектре раствора БА 5 в области связанных колебаний О–Н зарегистрированы ПП с $v_{max} = 3556$, 3136 и 3070 см⁻¹ и присутствует ПП связанных колебаний С=О с $v_{max} = 1660$ см⁻¹.

Следует отметить, что ПП с $v_{max} = 3556 \text{ см}^{-1}$ в ИК спектре БА 5 по форме полосы и положению v_{max} близка к ПП с $v_{max} = 3538 \text{ см}^{-1}$ в ИК спектре БА 2 и к ПП с $v_{max} = 3536 \text{ см}^{-1}$ в ИК спектре БА 3. В то же время, другие ПП связанных колебаний О–Н и С=О в ИК спектре БА 5 по своим характеристикам близки к ПП в ИК спектре БА 4 для связанных колебаний ОН и С=О групп. Близость спектральных характеристик обусловлена тем, что в молекулах БА 5 могут одновременно образовываться двойные ВВС типа О–Н…О–Н и О–Н…О=С. Полоса колебаний О–Н с $v_{max} = 3556 \text{ см}^{-1}$ обусловлена участием двух фенольных групп ОН молекулы БА 5 в образовании BBC типа О–Н…О–Н [2]. Низкочастотные ПП колебаний О–Н с $v_{max} = 3136$ и 3070 см $^{-1}$, а также колебаний С=О с $v_{max} = 1660 \text{ см}^{-1}$ в ИК спектре раствора БА 5 обусловлены участием ОН и С=О групп в образовании в молекулах BBC типа О–Н…О=С.

Таким образом, системный ИК спектроскопический анализ близких по строению, но разных по биологической активности гидроксилсодержащих производных БА позволил установить характер BBC связей, образующихся в биологически активных соединениях и выявить функциональные группы молекул, которые могут активно участвовать в различных биохимических реакциях.

Если в молекулах биологически активных производных БА фенольная гидроксильная группа находится в *орто*-положении к группе со свойствами акцептора протона (группы OH, OCH₃ и C=O), в растворах таких соединений образуются разные по силе внутримолекулярные водородные связи следующих трех типов O–H…O–H, O–H…O–CH₃, O–H…O=C.

Для проявления биологической активности, которая связана с модуляцией свободнорадикальных процессов в организме человека, существенно наличие в молекулах выше перечисленных ВВС. Подобные ВВС в молекулах БА защищают реакционный центр антиоксиданта – фенольную группу ОН от блокирования электронодонорными молекулами биологической среды [3].

- [1] Шадыро О. И. Ингибиторы размножения вируса герпеса в культуре клеток / О. И. Шадыро, С. Д. Бринкевич, С. Н. Самович // заявка на патент РБ № а20110727 (2011)
- [2] Толсторожев Г. Б. Водородные связи и противовирусная активность производных бензальдегида / Г. Б. Толсторожев, И. В. Скорняков, М. В. Бельков, О. И. Шадыро, С. Д. Бринкевич, С. Н. Самович // Журн. прикл. спектр. – 2012. – Т. 79. – С. 658.
- [3]. Тавадян Л. А. Химические механизмы антирадикальной активности антиоксидантов пероксидного окисления липидов / Л. А. Тавадян // Хим. журн. Армении.– 2007. Т. 60. С. 602.
УДК 577.352

Ю.М. Гармаза, Н.М. Козлова, Е.И. Слобожанина

БИОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ, ОТРАЖАЮЩИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ИОНОВ ЦИНКА С ПОВЕРХНОСТЬЮ МЕМБРАН ЭРИТРОЦИТОВ ЧЕЛОВЕКА

Институт биофизики и клеточной инженерии НАН Беларуси, ул. Академическая, 27, 220072 Минск, Беларусь garmaza@yandex.ru

В последние годы исследователи уделяют особое внимание действию металлов на биологические системы, т.к. металлы повсеместно присутствуют в окружающей среде и могут биоаккумулировать, взаимодействовать со специфическими системами и приводить к тератогенному, канцерогенному и/или нейротоксичному эффектам. На данный момент разработано большое число физиологически обоснованных токсикокинетических моделей для оценки воздействия ионов тяжелых металлов, таких как кадмий, свинец, никель, но до сих пор не существует подобных моделей для цинка (Zn²⁺) даже на уровне животных. С одной стороны, цинк – жизненно необходимый микроэлемент, который играет важную роль в химических, структурных и регуляторных процессах биологических систем. С другой стороны, цинк цитотоксичен, т.к. является одним из наиболее распространенных токсичных крупномасштабного загрязнения окружающей компонентов среды, а при ингаляционном воздействии паров, содержащих цинк даже в низких концентрациях, выявлены серьезные нарушения здоровья человека. В этой связи необходим поиск способов коррекции таких нарушений, который невозможен без знаний о механизмах Zn-индуцированных патологий.

В настоящей работе с помощью люминесцентных методов было изучено взаимодействие ионов цинка в повышенных концентрациях (от фармакологических до токсичных) с мембранами эритроцитов человека *in vitro*. Эритроциты человека были выбраны в качестве объекта исследования, так как они являются подходящими клетками для оценки статуса цинка в организме (при попадании соединений цинка в кровь человека более 90% металла поступает именно в них), а отсутствие ядра позволяет исключить возможные генотоксические эффекты этого микроэлемента.

В работе использована кровь здоровых доноров в консерванте "глюгицир". Эритроциты отделяли от плазмы путем центрифугирования крови при 2000×g 10 мин и трижды отмывали в 155 мМ NaCl. Эритроцитарные мембраны выделяли по методу Доджа. Затем клетки и мембраны инкубировали в 10 мМ трисHCl буфере (pH 7,4), содержащем 50, 100 и 500 мкМ сульфата цинка. Об изменении физического состояния мембран эритроцитов судили по степени поляризации флуоресценции липофильного зонда 1-(4-триметиламмоний)-6-фенил-1,3,5-гексатриена (ТМА-ДФГ) и по изменению генерализованной поляризации лаурдана; о количестве свободного холестерина в мембранах – по величине интенсивности флуоресценции полиенового антибиотика филипина. Об уровне NH₂- и SH-групп на поверхности клеточных мембран судили по параметрам флуоресценции флуорескамина и N-(1-пирен)малеимида, соответственно.

Перераспределение фосфатидилсерина в мембранах эритроцитов оценивали с помощью FITC-конъюгированного рекомбинантного аннексин V. Флуоресцентные измерения были выполнены на спектрофлуориметре "Cary Eclipse" (Varian, Австралия) и на проточном цитофлуориметре FACScan (Becton Dickenson, CША) в FL-1H канале.

Ранее нами совместно работе с сотрудниками Института физики им. Степанова НАН Беларуси методом атомно-силовой микроскопии были обнаружены различия в топографической структуре поверхности мембран эритроцитов человека после воздействия Zn^{2+} в токсичных концентрациях – профили "шероховатостей" поверхности мембран эритроцитов, модифицированных Zn^{2+} , обладали более сглаженной структурой по сравнению с интактными клетками [1, 2]. Однако оставалась не ясной природа обнаруженных Zn-индуцированных модификаций клеточных мембран.

Методом атомно-эмиссионной спектрометрии с индуктивно-связанной плазмой (ICPE-9000, Shimadzu) показано, что воздействие сульфата цинка в фармакологических (50-100 мкМ) и токсичных концентрациях (> 100 мкМ) на эритроциты человека in vitro приводит к аккумуляции в них Zn²⁺. При этом содержание NH₂- и SH-групп на поверхности мембран эритроцитов, модифицированных Zn²⁺, увеличивается. Также установлено, что ионы цинка в исследуемых концентрациях при взаимодействии с плазматической мембраной эритроцитов модифицируют как физическое состояние фосфолипидов, так и латеральное распределение холестерина, что играет важную роль в функционировании мембранных белков-транспортеров семейства MRP. Одним из механизмов обнаруженных Zn-индуцированных изменений является нарушение структуры и функции специализированных гликолипидных микродоменов ("рафтов"). Обнаружено также, что при наличии в среде инкубации эритроцитов свыше 100 мкМ сульфата цинка происходит нарушение асимметрии липидного бислоя мембран. Полученные данные свидетельствуют о преимущественно мембранотропном действии ионов цинка на эритроциты человека, приводящем к изменению структурнофункционального мембранных Zn-индуцированная состояния компонентов. модификация топографии поверхности мембран эритроцитов скорее обусловлена конформационными изменениями белковых компонентов на их поверхности вследствие нарушения структуры гликолипидных доменов.

- [1] Исследование оптических и наноструктурных металлоиндуцированных измерений эритроцитарных мембран методами рассеяния и атомно-силовой микроскопии / А.Я. Хайруллина, Т.В. Ольшанская, Д.С. Филимоненко, В.М. Ясинский, Е.И. Слобожанина, Н.М. Козлова // Оптика и спектроскопия. – 2008. – Т. 105, № 1. – С. 141–148.
- [2] Оптические, наноструктурные и биофизические свойства Zn-индуцированных изменений мембран эритроцитов человека / А.Я. Хайруллина, Т.В. Ольшанская, Д.С. Филимоненко, Н.М. Козлова, Ю.М. Гармаза, Е.И. Слобожанина // Оптика и спектроскопия. – 2011. – Т. 110, № 4. – С. 574–580.

УДК 533.9.082.5; 621.373.826; 621.793.79

М.П. Патапович¹, И.Д. Пашковская², Лэ Тхи Ким Ань¹, Н.И. Нечипуренко², Ж.И. Булойчик¹, А.П.Зажогин¹

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ МЕТАБОЛИЗМА МАКРОЭЛЕМЕНТОВ В ОРГАНИЗМЕ БОЛЬНЫХ (ОНМК) МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ АТОМНО-ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ ВОЛОС ПО ИХ ДЛИНЕ

¹ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск,

Беларусь

Masha_P@tut.by; zajogin_an@mail.ru

² РНПЦ неврологии и нейрохирургии. ул. Ф. Скорины, 24, 220114, Минск, Беларусь

Среди причин смертности по частоте церебральный инсульт конкурирует с ишемической болезнью сердца и злокачественными новообразованиями. Ишемический инсульт находится на первом месте среди причин инвалидизации взрослого населения во всем мире. В 2005 году, по приблизительным оценкам ВОЗ, в мире насчитывалось 62 миллиона людей, перенесших инсульт. Каждый год около 15 миллионов человек переносят первичный инсульт; из них у 5 миллионов болезнь имеет летальный исход и в 5 миллионах случаев отмечается стойкая инвалидизация. Неврологи и ученые пытаются изменить эту печальную статистику. В медицинской диагностике различных стрессовых ситуаций развивается новый подход, основанный на выявлении нарушений баланса макро- и микроэлементов в организме человека за длительный период времени.

В последнее время все больший интерес представляют исследования волос для выявления состояния обмена макро- и микроэлементов в организме и токсического воздействия отдельных тяжелых металлов. В Республике Беларусь проводятся исследования, выясняющие участие и роль макро- и микроэлементов в развитии острой церебральной ишемии [1]. В то же время многие вопросы не совсем ясны. Требуется дальнейшее изучение роли эссенциальных макро- и микроэлементов (Ca, Mg, K, Na, Fe, Cu, Zn и др.) для выяснения механизмов адаптации организма при данной патологии. Анализ содержания элементов в волосах является одним из наиболее лучших методов оценки состояния минерального обмена в организме.

Для разработки перспективных методов экспресс-анализа состояния обмена макро- и микроэлементов в организме в течение нескольких лет проведены экспериментальные исследования образцов волос по их длине с помощью лазерного излучения. Для проведения исследований использовался лазерный атомно-эмиссионный многоканальный спектрометр LSS-1. Анализировались суммарные результаты действия 20 последовательных лазерных импульсов (энергия 60 мДж, межимпульсный интервал 8 мкс) на точку для образца волос через 0,5 см (примерно соответствующий интервалу роста волос в половину месяца). В случае необходимости каждый участок может быть разбит на точки размером 0,3 мм.

Забор волос произведен у 12 женщин в остром периоде различных нарушений мозгового кровообращения. У всех больных острые нарушения мозгового кровообращения развились на фоне артериальной гипертензии различных степеней. Полуколичественная оценка динамики изменения содержания элементов оценивалась

по длине волос в интервале, предшедствующем госпитализации, от 5 месяцев до 2,5 лет.

О сложности процессов, происходящих во время заболевания, свидетельствуют данные, полученные для кальция, натрия и калия. На рис.1 приведены примеры изменения содержания определяемых элементов для двух больных с диагнозом повторный атеротромбический ифаркт мозга в правом КБА. Конечный диагноз для госпитализированных больных одинаков, а предшедствующие периоды довольно сильно различаются.



Рис. 1. Интенсивность спектральных линий Са, К и Na в последовательных точках по длине волос пациентов с острым нарушением мозгового кровообращения.

Приведенные графики отчетливо демонстрируют определенную закономерность между интенсивностью линий кальция и натрия и течением болезни. Анализ изменения концентрации натрия в течение 6 месяцев для больной №8 показывают, что за 4 месяца до госпитализации уровень натрия изменялся скачкообразно, а затем возвращался примерно на прежний уровень. Аналогичные изменения наблюдаются и для больной №10. За последний месяц, предшедствующий госпитализации, уровень натрия у №10 резко вырос, в то время как у больного №8 эти изменения наблюдаются на месяц раньше, а ко времени госпитализации уровень кальция и натрия резко упал.

Все это свидетельствует об изменении вне- и внутриклеточного содержания натрия и калия в плазме и эритроцитах и устойчивом нарушении работы «калийнатриевого насоса» в этот период [1].

Определение содержания основных макро- и микроэлементов может являться хорошим дополнительным индикатором для выявления причин существующего дисбаланса, что поможет целенаправленно подбирать биологически активные добавки, препараты, корректировать питание. Важно также и то, что эффективность проведенной коррекции может быть проконтролирована повторными анализами в реальном масштабе времени, вплоть до нескольких десятков минут.

[1] Нечипуренко Н.И., Лихачев С.А., Пашковская И.Д., Зажогин А.П., Недзьведь Г.К. // Весци НАН Беларуси. Серия мед. наук. 2009. №2. С. 5-9.

УДК 535.082.5:616.155.392-07 Г.И. Рубан¹, Д.В. Маринич², Н.В. Гончарова², В.А. Лойко¹

ИССЛЕДОВАНИЕ МОНОНУКЛЕАРОВ ДЛЯ ВЫЯВЛЕНИЯ ИНФИЦИРОВАННЫХ ИНДИВИДУУМОВ И БОЛЬНЫХ С ОСТРОЙ ЛЕЙКЕМИЕЙ

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

² РНПЦ трансфузиологии и биомедицинских технологий, Долгиновский тракт, 160, 220053 Минск, Беларусь <u>ddna@.mail.by</u>

Характеризация клеток крови, в частности, мононуклеаров, с помощью каналов светорассеяния рассеяния проточного цитометра представляет большой интерес по целому ряду обстоятельств [1]. Однако проточный цитометр дорогостоящ. Кроме того, возможности метода светорассеяния, даже в сочетании с другими современными методами, такими как иммунофенотипирование и молекулярное зондирование, иногда недостаточны для выявления заболеваний, например, острых лейкемий. Поэтому мы предлагаем, в таких ситуациях, выявлять злокачественные заболевания с помощью позволяющего дополнительного метода, снизить, в некоторых случаях, диагностические расходы, а также исследовать кластер опухолевых клеток более детально.

Мононуклеары периферической крови исследованы параллельно для здоровых индивидуумов, а также пациентов с гепатитом В / С, миелодиспластическим синдром и острым лимфобластным лейкозом (возраст пациентов от 26 до 48 лет). Интенсивность света, рассеянного клетками, определяли численным моделированием и измерением на проточном цитометре (FACScan, Becton Dickinson). Измеряли интенсивность рассеяния света вперед (FSC) и в поперечном направлении (SSC). Размеры мононуклеаров определяли в клеточной суспензии. Измерения производили методом световой микроскопии с использованием микроскопа Leica DMLB2 в режимах светлого поля, дифференциального интерференционного контраста и флуоресценции.

Численным моделированием и экспериментальным исследованием рассеяния света лимфоцитами показано, что каналы светорассеяния проточного цитометра позволяют быстро, в реальном режиме времени, выявлять индивидуумов, инфицированных вирусом гепатита В/С, по интенсивностям рассеянного света в диапазоне углов рассеяния от 80 до 180 градусов [1]. Выявление осуществляется без использования дорогостоящего моноклонального маркирования клеток.

Полученные результаты основаны на использовании каналов светорассеяния проточного цитометра. В некоторых случаях, однако, можно попытаться минимизировать использование такого дорогостоящего оборудования. Идея состоит в том, чтобы повысить надежность выявления лейкемии с помощью метода на основе микроскопии дифференциально-интерференционного контраста (ДИК). ДИКмикроскопия морфометрические позволяет исследовать характеристики жизнеспособных неокрашенных мононуклеаров в клеточной суспензии. Исследование жизнеспособных клеток дает возможность оценить истинные формы и размеры клеток, в отличие от других подходов, где морфология клеток может искажаться при их окрашивании и фиксировании [1].

Результаты ДИК-микроскопии показывают, что распределения размеров мононуклеаров для пациентов и здоровых индивидуумов значительно отличаются друг от друга. В частности, максимумы распределений для пациентов с острой миелоидной лейкемией и миелодиспластическим синдромом существенно смещаются к большим размерам по сравнению с распределениями для здоровых индивидуумов.

Распределения размеров мононуклеаров, доступные также измерению обычными анализаторами крови, предлагаются в качестве простого и наглядного критерия выявления острых лейкозов и миелодиспластического синдрома. Распределения размеров мононуклеаров особенно полезны для мониторинга указанных заболеваний. Это наиболее значимо для пациентов в развивающихся странах. Важно отметить также, что полученные нами данные по распределениям размеров мононуклеаров полезны еще и в качестве входных параметров для решения обратной задачи теории светорассеяния применительно к проблемам сканирующей проточной цитометрии [4-6] для лучшего выявления острого лейкоза и миелодиспластического синдрома.

Предлагаемый оптический и морфометрические методы имеют следующие преимущества. Они не используют дорогостоящее маркирование клеток. Кроме того, избегая маркирования клеток, которое токсично или препятствует нормальному функционированию клеток, мы получаем возможность дополнительно изучать те же клетки другими методами, что повышает надежность обнаружения заболевания. Морфометрический метод имеет еще одно важнейшее преимущество: он эффективен независимо от иммунофенотипического сдвига и клональной эволюции изучаемых клеток крови, что существенно повышает диагностические возможности.

Таким образом, обнаружены оптические и морфометрические особенности популяции мононуклеарных клеток, которые позволяют выявлять гепатит В / С, острые лейкемии и миелодиспластический синдром.

- [1] Ruban G. I., Berdnik V., Marinitch D. V., Goncharova N. V., Loiko V. A. Light scattering and morphology of the lymphocyte as applied to flow cytometry for distinguishing healthy and infected individuals // J. Biomed. Opt. – 2010. – V.15 – P. 057008.
- [2] Hsiao A., Hunter M., Greiner C., Gupta S., Georgakoudi I. Noninvasive identification of subcellular organization and nuclear morphology features associated with leukemic cells using light-scattering spectroscopy // J. Biomed. Opt. – 2011. – V.16 – P. 037007.
- [3] Konrad M., Metzler M., Panzer S., I. Ostreicher, et al. Late relapses evolve from slow-responding subclones in t(12;21)-positive acute lymphoblastic leukemia: evidence for the persistence of a preleukemic clone // Blood. -2003. -V.101. P.3635.
- [4] Ruban G.I., Kosmacheva S. M., Goncharova N. V., Bockstaele D., Loiko V. A. Investigation of morphometric parameters for granulocytes and lymphocytes as applied to a solution of direct and inverse light scattering problems // J. Biomed. Opt. – 2007. – V.50. – P. 044017.
- [5] Berdnik V., Loiko V., Gilev K., et al. Characterization of spherical particles using highorder neural networks and scanning flow cytometry // JQSRT. – 2006. – V.102. – P.62.
- [6] Loiko V., Berdnik V. Retrieval of size and refractive index of spherical particles by multi-angle light scattering: the neural networks method application // Appl. Opt. – 2009 – V.48. – P.6178.

УДК 577.322.24+577.322.72

Я.В. Диченко, А.В. Янцевич, С.А. Усанов

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ СТАБИЛЬНОСТИ БЕЛКОВОЙ ГЛОБУЛЫ МУТАНТНОЙ ФОРМЫ СҮР7В1 Arg486Cys

Институт биоорганической химии НАН Беларуси, ул. академика В.Ф. Купревича, 5 корп. 2, 220141 Минск, Беларусь <u>dichenko@iboch.bas-net.by</u>

Цитохромы P450 – группа монооксигеназ, окисляющих широкий спектр органических соединений и тем самым участвующих во множестве важных физиологических процессов, среди которых особое место занимают метаболизм стероидов и ксенобиотиков [1].

Цитохром Р450 7В1 (СҮР7В1, ЕС 1.14.13.100) – фермент, катализирующий ба- и 7 α -гидроксилирование стероидов [2]. Данный фермент является гемопротеидом, состоящим из 506 аминокислот с молекулярной массой ~56 кДа, локализованный в эндоплазматическом ретикулуме, также как и его редокс-партнер – NADPH-зависимая цитохром Р450 редуктаза (СРR). Наибольшее количество кодирующей СҮР7В1 мРНК обнаружено в клетках печени и мозга (гиппокамп) [3]. Специфика распределения цитохрома Р450 7В1 в тканях организма человека, приводит к особой функциональной нагрузке данного фермента. СҮР7В1 участвует в синтезе желчных кислот [2], лигандов эстрогеновых и андрогеновых рецепторов [2]. Помимо этого фермент косвенно участвует в регуляции синтеза иммуноглобулинов [4]. Однако наиболее важной функцией СҮР7В1 в организме является метаболизм нейростероидов [2] — стероидов, синтезируемых *de novo* в клетках нервной ткани и способных модулировать активность нейронов.

К настоящему времени известны 8 мутаций гена *сур7b1*, которые приводят к ряду генетических заболеваний: дисфункция печени у новорожденных (как правило, летальное заболевание) и спастическая параплегия 5-го типа (аутосомальное рецессивное заболевание, характеризующееся параличом нижних конечностей и общей слабостью, вызванной дегенерацией моторных нейронов спинного мозга) у взрослых [2]. Однако в связи с тем, что свойства мутантных форм СҮР7В1 к настоящему времени до сих пор не изучены, определить причину возникновения данных заболеваний на молекулярном уровне не представляется возможным.

В данной работе представлены результаты исследования конформационной стабильности белков дикого типа СҮР7В1 (WT) и мутантной формы СҮР7В1 Arg486Cys (R468C) с использованием метода флуоресцентной спектроскопии.

В работе получены высокоочищенные гомогенные препараты рекомбинантных гемопротеидов WT и R468C. Результаты ДСН-электрофореза в денатурирующих условиях и спектры поглощения подтверждают, что в полученных образцах ферментного препарата содержится не менее 90% функционально активного белка.

Изучение влияния точечной мутации на структурную стабильность белковой глобулы проводилось посредством измерения констант концентрационного тушения (Штерна-Фольмера) флуоресценции триптофановых остатков WT и R468C для

нативной и полностью денатурированной формы белка и анализа полученных значений. В работе были использованы различные типы тушителей, несущие отрицательный, нейтральный и положительный заряды.

Полученные значения констант Штерна-Фольмера для WT и R468C указывают на изменение степени упаковки полипептидной цепи в результате точечной мутации, что может привести к искажениям структуры активного центра фермента и изменению каталитической активности CYP7B1 по отношению к определенным субстратам. Контрольные эксперименты по влиянию сопровождающего иона и ионной силы раствора не показали наличия детектируемых эффектов.

Полученные результаты вносят вклад в понимание молекулярных механизмов возникновения и развития тяжелых генетических заболеваний, связанных с нарушением функционирования СҮР7В1.

- Guengerich F.P. Cytochrome P450 and chemical toxicology. / F.P. Guengerich // Chem. Res. Toxicol. – 2008. – V.21. – P.70-83.
- [2] Stiles A.R. CYP7B1: one cytochrome P450, two human genetic diseases and multiple physiological functions / A.R. Stiles [at al]. // J. Biol. Chem. – 2009 – V. 284. – P. 28485 - 28489.
- [3] Steckelbroeck S. Characterization of the dehydroepiandrosterone (DHEA) metabolism via oxysterol 7alpha-hydroxylase and 17-ketosteroid reductase activity in the human brain / S. Steckelbroeck, M. Watzka, D. Lutjohann, P. Makiola, A. Nassen, V.H. Hans, H. Clusmann, A. Reissinger, M. Ludwig, L. Siekmann, D. Klingmuller // J. Neurochem. 2002. V. 83. P. 713-726.
- [4] Bauman D.R. 25-Hydroxycholesterol secreted by macrophages in response to Toll-like receptor activation suppresses immunoglobulin A production / D.R. Bauman, A.D. Bitmansour, J.G. McDonald, B.M. Thompson, G. Liang, D.W. Russell // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. – 2009. – V. 106 – P. 16764-16769.

УДК 539.1.074+621.039.76 К. А. Веренич, В. Ф. Миненко, С. А. Кутень, А. А. Хрущинский

КОНВЕРСИОННЫЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ ДЛЯ ОЦЕНКИ АКТИВНОСТИ ЙОДА-131 В ЩИТОВИДНОЙ ЖЕЛЕЗЕ С ПОМОЩЬЮ ДОЗИМЕТРОВ

Институт ядерных проблем БГУ, ул. Бобруйская, 11, 220030 Минск, Беларусь <u>Kiryl verenich@tut.by</u>

Во всех атмосферных выбросах радиоактивных веществ предшествующих радиационных аварий на АЭС всегда присутствовал радиоактивный йод [1]. Попадая в организм человека, йод накапливается главным образом в щитовидной железе. Облучение щитовидной железы радиоактивным йодом может вызывать рак и другие заболевания этого органа. Риск заболеваемости зависит от величины полученной дозы облучения. Для оценки индивидуальной дозы облучения необходимо оценить содержание радиоактивных изотопов йода в щитовидной железе. Своевременная и точная оценка содержания радиоактивного йода в щитовидной железе одно из первостепенных мероприятий ликвидации аварийных последствий для пострадавшего населения. События на ЧАЭС [2] и Фукусиме показали особенности организации широкомасштабных измерений активности йода в щитовидной железе населения. Как показал опыт ликвидации последствий, для организации своевременных измерений количества людей наряду со специализированным оборудованием большого приходится привлекать в большом количестве неспециализированные приборы (дозиметры и радиометры), которыми в основном оснащены службы контроля и надзора за радиационной обстановкой

Дозиметр позволяет измерить мощность дозы над щитовидной железой. Между мощностью дозы над щитовидной железой и содержанием йода-131 в железе существует прямо пропорциональная зависимость. Коэффициент пропорциональности этой зависимости сам является зависимым от условий измерения. Однако его можно рассчитать, например, с помощью метода Монте-Карло, если правильно смоделировать условия измерения. Т.о. мощность дозы и активность будут связаны коэффициентом пропорциональности, который можно назвать конверсионным (калибровочным) коэффициентом. Задача эта остается актуальной и своевременной в свете строительства Белорусской АЭС.

Нами рассчитаны калибровочные коэффициенты для отечественных радиометрических приборов (МКС-АТ1117, МКС-АТ1120, МКС-АТ6130, ДКС-АТ1121, ДКС-АТ1123, ДКГ-АТ2503). Приборы имеют сцинтилляционный детектор и работают в токовом режиме измерения. Токовый режим измерений позволяет учесть всю энергию, поглощённую в объёме сцинтиллятора.

Для построения модели измерения была использована цифровая модель человека. В качестве цифровой модели тела человека был взят математический фантом ORNL [3], широко применяемый для подобных задач.

Проведена серия экспериментальных исследований с использованием точечных источников гамма-излучения ОСГИ. Построена цифровая модель условий

эксперимента для установления соответствие между откликом детектора и энергетическим выделением в детекторе, рассчитанным методом Монте-Карло.

Показано, что калибровочные коэффициенты заметно зависят от возраста измеряемого человека, от смещения блока детектирования вдоль щитовидной железы и от фронтального удаления его от центра щитовидной железы.

- [1] Ильин Л. А. Экологические особенности и медико-биологические последствия аварии на Чернобыльской АЭС. / Л. А. Ильин, М. И. Балонов, Л. А. Булдаков // Мед. Радиология. 1989. Т. 34. № 12. С. 59-81.
- [2] Степаненко В. Ф. Внутреннее облучение щитовидной железы жителей Калужской области по результатам измерений содержания ¹³¹I в мае 1986 г. / В. Ф. Степаненко, Е. К. Яськова, М. Ю. Орлов и др. // Атомная энергия. 2008. Т. 105. Вып. 2. С. 97-103.
- [3] Cristy M. Specific absorbed fractions of energy at various ages from internal photon sources. I. Methods. / M. Cristy and K. F. Eckerman. // Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tenn. – 1987. ORNL/TM-8381/V1.

УДК 535.361, 53.086, 612.13, 616-08-039.11, 681.7: 681.787 Ю.Л. Денисова¹, Н.Б. Базылев², С.П. Рубникович¹, Н.А. Фомин²

ЛАЗЕРНАЯ ДИАГНОСТИКА МЯГКИХ И ТВЁРДЫХ БИОТКАНЕЙ В ОРТОПЕДИЧЕСКОЙ СТОМАТОЛОГИИ

¹ Белорусский государственный медицинский университет, пр. Дзержинского, 83, 220116, Минск, Беларусь <u>rubnikovichs@mail.ru</u> ² Институт тепло– и массообмена им. А.В. Лыкова НАН Беларуси, ул. П. Бровки, 15, 220072, Минск, Беларусь fomin@hmti.ac.by

Лазерное зондирование биотканей является простым и удобным методом бесконтактной и неинвазивной диагностики состояния биотканей и широко используется в биологии и медицинской практике [1]. Развитие этих работ в последние три десятилетия было стимулировано успехами в лазерной технике и высокоинформативных цифровых технологиях ввода когерентных изображений в ПЭВМ с использованием ПЗСкамер и ИК-тепловизоров высокого пространственного разрешения [2].

В биомедицинских применениях весьма успешными оказались приёмы применения лазерных спекл-полей, состоящих из микронных спеклов — «гранул» лазерного излучения, являющихся виртуальными реперными точками при корреляционном анализе получаемых изображений исследуемых биотканей. Такие методы исследований получили названия цифровой динамической спекл-фотографии (ЦДСФ). В математическом плане ЦДСФ биотканей использует те же приемы пространственно - временного кросс-корреляционного анализа спекл-полей, что и в современных цифровых системах диагностики течений жидкостей, газа и плазмы, таких как "Digital Particle Image Velocimetry (DPIV)", являющихся развитием голографических систем измерения с использованием приёмов спекл-фотографии.





Рис. 1. Слева: формирование биоспекл-поля при зондировании биоткани лазерным излучением: 1 — модель биоткани; 2 — поверхность биоткани; 3 — движущиеся рассеиватели (эритроциты крови); 4 — зондирующий лазер; 5 — формирующийся спекл; 6 — неподвижные рассеиватели в биоткани. Справа: блок-схема лазерной диагностики биотканей: 1, зондирующий лазер; 2, исследуемая биоткань; 3, цифровая камера для регистрации спекл-полей; 4, ПЭВМ; 5, монитор, на который выводится обработанная информация



Рис.2. Пространственно-временные кросс-корреляционные функции динамического биоспекл-поля.

Как показывают вычисления, коэффициент взаимной пространственно-временной корреляции интенсивностей излучения в спекл- поле $\tilde{\gamma}_{\Delta I}$ может быть выражен следующим образом:

$$\tilde{\gamma}_{\Delta I} - 1 = \exp\left(-\frac{\left|\vec{r}\right|^2}{r_s^2} + \frac{\tau_d^2}{\tau_c^2}\right) \exp\left[-\frac{1}{\tau_c^2}(\tau - \tau_d)^2\right],$$

где τ_c и τ_d времена когерентности и задержки динамического спекл-поля, см. рис. 2. Различают два основных механизма изменения спекл-полей. Это «смещение» спекл-поля, при котором некоторая совокупность спеклов смещается как целое, не изменяя их взаимного расположения, и «кипение» спеклов, когда отдельные спеклы хаотически появляются и исчезают в одних и тех же точках пространства, не испытывая заметных смещений. Режим «смещения» используется в данной работе для напряжений деформаций диагностики механических И В ортопедических стоматологических конструкциях, а режим «кипения» позволяет получить информацию о подвижности основных рассеивателей лазерного излучения в биотканях ротовой полости – эритроцитов [2].

Статистическая обработка последовательных изображений био-спекл-полей позволяет определить смещение спеклов в каждом выделенном окне усреднения с субпиксельной точностью и определяет высокую чувствительность техники к выявлению ранних аномалий в исследуемых биотканях.

- Briers J.D. Laser speckle techniques in biology and medicine // SPIE Proc. 1994. Vol. 2083. – P. 238.
- [2] Рубникович С.П., Фомин Н.А. Лазерно-оптические методы диагностики и терапии в стоматологии. Минск, 2010. 361с.

УДК 535.37:535.36

Н. А.Немкович¹, Ю. Г. Шанько², А. Н. Рубинов¹, А. Н. Собчук¹, Ю. В. Крученок¹, А. И. Чухонский²

ЛАЗЕРНО-ОПТИЧЕСКАЯ ДИАГНОСТИКА АДЕНОМЫ ГИПОФИЗА

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>j.kruchenok@ifanbel.bas-net.by</u> ² Республиканский научно-практический центр неврологии и нейрохирургии,

ул. Ф. Скорины, 24, 220114 Минск, Беларусь

В последнее время все большее количество исследований посвящено поиску высоко чувствительных, точных и экспрессных методов диагностики доброкачественных и злокачественных опухолей тканей. Наиболее перспективным направлением в решении этой задачи в настоящий момент считается использование оптических методов. В тканях человека присутствуют биомолекулы, которые хорошо флуоресцируют в ультрафиолетовой, видимой и ближней ИК областях спектра, такие как тирозин, триптофан, коллаген и другие. Возникновение патологического процесса затрагивает гистологические и гистохимические особенности тканей, и приводит к изменениям в параметрах аутофлуоресценции и диффузно рассеянного света тканей.

Одним из известных оптических методов диагностики является способ идентификации опухолей мозга, основанный на поочередной регистрации спектров аутофлуоресценции спектров диффузно рассеянного И света тканей [1]. Аутофлуоресценция возбуждается монохроматическим светом лазера с длиной волны 337 нм, а диффузно рассеянный свет регистрируется при падении на ткань света с непрерывным спектром в широком диапазоне длин волн. Данный способ имеет низкую идентификации опухолей, обусловленную точность искажением спектра аутофлуоресценции из-за поглощения гемоглобина, который содержится в крови, а также деформацией спектров аутофлуоресценции и спектров диффузно рассеянного света в фиолетовой области спектра из-за рассеяния мощного излучения лазера.

В настоящей работе стояла задача повышения точности идентификации аденомы гипофиза и других опухолей мозга, а также проведения экспрессной и ранней диагностики новообразований мозга. Для решения данной задачи мы регистрировали кинетику затухания аутофлуоресценции на ряде длин волн, а также спектры диффузно рассеянного света тканей гипофиза в широком спектральном диапазоне, определяли длительность затухания аутофлуоресценции и по значениям длительности затухания аутофлуоресценции и области спектра идентифицировали опухоль. Регистрация кинетик затухания является более предпочтительной по сравнению с регистрацией спектров аутофлуоресценции, так как их форма не искажается из-за поглощения гемоглобина находящегося в крови, а концентрация крови отличается даже в различных частях отдельной ткани.

Проведены исследования кинетик затухания аутофлуоресценции в длинноволновой области спектра, а также спектров диффузно рассеянного света тканей

гипофиза в спектральном диапазоне 650 нм – 900 нм. Измерения проводились на образцах здоровых и опухолевых тканей гипофиза, взятых после операции, проведенной В Республиканский научно-практический центр неврологии И нейрохирургии Минздрава PБ. Кинетики аутофлуоресценции затухания регистрировали в спектральном диапазоне 380 нм – 600 нм через 20 нм при возбуждении квазимонохроматическим излучением полупроводникового диода с длиной волны излучения 340 нм. Спектры диффузно рассеянного света регистрировали в спектральном диапазоне 380 нм – 850 нм при их освещении галогеновой лампой с непрерывным излучением от 300 нм до 1000 нм.

Нами исследовано 23 образца, из них 12 образцов аденом гипофиза и 11 образцов здоровой ткани гипофиза. Средняя длительность аутофлуоресценции образцов аденом гипофиза при регистрации в синей области спектра составляет 5,2 нс и по мере перехода к красной области спектра плавно уменьшается до значения 3,5 нс. В тоже время средняя длительность аутофлуоресценции образцов здоровой ткани гипофиза в синей области спектра составляет 4,6 нс и по мере перехода к зеленой области спектра плавно увеличивается до значения 5,5 нс, а затем уменьшается в красной области спектра до значения 4,9 нс. Таким образом, установлено, что среднее время жизни флуоресценции образцов нормальной и опухолевой ткани значительно отличаются при регистрации кинетик в области длин волн 500-600 нм. Характеристики диффузно рассеянного света образцов нормальной ткани и аденомы гипофиза имеют ярко выраженные различия по форме и интенсивности спектра в области длин волн 650-900 нм. Интенсивность диффузно рассеянного света образцов здоровых тканей значительно меньше, чем у образцов аденомы гипофиза. Спектр диффузно рассеянного света образцов аденомы гипофиза имеет ярко выраженный максимум в районе 690 нм, чего не наблюдается в спектрах здоровых образцов.

Таким образом, проведенные исследования показали, что путем измерения длительности аутофлуоресценции и интенсивности диффузно рассеянного света в проводить экспрессную длинноволновой области спектра можно И высокочувствительную идентификацию опухолевых тканей гипофиза. При использовании компьютера анализ зарегистрированных оптических характеристик и идентификация тканей осуществляется оперативно и с высокой точностью.

Внедрение данного способа в медицинскую практику позволит значительно сократить временные и экономические затраты на патологоанатомическую диагностику опухолей. Использование способа для диагностики и локализации опухолей мозга непосредственно во время хирургических операций позволит в ряде случаев отказаться от повторного оперативного вмешательства и увеличит вероятность положительной динамики процесса лечения.

 Wei-Chiang Lin. Identification of Human Tissue Using Optical Spectroscopy. / Lin Wei-Chiang, A. Mahadevan-Jansen, Jansen E. Duco, A. Tomas Steven // Patent number: US2004044287(A1). – 2004-03-04. УДК 612.13

В.А. Мансуров 1 , Ю.В. Сытый 2

МЕСТНОЕ ГИДРАВЛИЧЕСКОЕ СОПРОТИВЛЕНИЕ ПРИ УГЛОВЫХ АНЕВРИЗМАХ

¹ УО БГМУ, Кафедра медицинской и биологической физики, пр. Дзержинского, 83, 220116 Минск, Беларусь

<u>mansurov@tut.by</u>

² УЗ «5-я Городская клиническая больница г. Минска», ул. Филатова, д. 9, 220026 Минск, Беларусь

Цель: моделирование течения, обусловленного наличием местного гидравлического сопротивления аневризмы, при искривлении артерии для ньютоновской и неньютоновской жидкостей.

Рассматривается двумерное установившееся течение несжимаемой жидкости, текущей из среды неограниченного объема в искривленный сосуд при наличии аневризмы на изгибе при скачке давления. На стенках артерии и полости аневризмы предполагается условие прилипания, при выполнении условий неразрывности. В качестве начальных условий было принято, что средняя скорость течения на входе в данный сосудистый сегмент постоянная величина, равная 0,3 м/сек. На выходе артерии давление полагалась равным нулю. Изменение геометрических параметров (угла искривления, радиуса артерии и размеров аневризмы) отражается в виде изменения локальной скорости течения, а, следовательно, локального *Re* и перепада давления. Численные расчеты проводились пакетом COMSOL 4.0.

Показано, что при входе потока в область аневризмы значительно изменяется форма течения: имеются 1) разветвления потока на левом краю аневризмы; 2) расширения потока в центре; 3) сужения и разветвления потока на левом краю. Таким образом, местные сопротивления приходится на участок, определяемый областью внедрения аневризмы в артерию. Результат вычислений местного перепада давления в зависимости угла искривления артерия для двух случаев: 1) отсутствие аневризмы, только искривление и 2) наличие аневризмы. Показано, что расширение потока в области аневризмы уменьшает местное гидравлическое сопротивление в этой области.

Значение перепада давления, обусловленного коэффициентом местного гидравлического сопротивления, представляется в виде изолиний в координатах угол искривления сосуда и местный перепад давления. Наличие двух областей в таком представлении, вероятно, связано с вертикальной осью аневризмы. При небольшой высоте происходит только уширение потока, дальнейшее увеличение высоты вызывает появление вихревого течения в внутри аневризмы.

- [1] Taylor, C., T. Hughes, C. Zarins, Computational investigations in vascular disease, Computers in Physics, Vol. 10, 3, pp. 224-232, 1996.
- [2] Шульман З.П., Мансуров В.А., Митьковская Н.П., Тагхизадех Г.Х., Каминская Т.В., Колядко М.Г. Реологические изменения крови и плазмы и дисфункция эндотелия у больных ишемической болезнью сердца и сахарным диабетом // Инженер, физич. журн. - 2006. Т. 79 -№1. - С. 96-101.

УДК 615.849.19

М. М. Кугейко¹, И. А. Кобак¹, А. М. Лисенкова¹, С. А. Лысенко¹, Т. А. Железнякова¹, Н. М. Орел¹, В. А. Щербатюк¹, В. М. Дюба²

Методы и аппаратные средства проведения лазерофореза

¹ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

<u>kugeiko@bsu.by</u>

² Городской клинический кожно-венерологический диспансер, ул. Прилукская, 46а, 220089 Минск, Беларусь

Увеличение средней продолжительности жизни и старение населения, ухудшение экологии, неправильное питание, физические и нервные перегрузки, гиподинамия и т.д. приводят к росту численности больных с различными хроническими заболеваниями даже в ряде высокоразвитых стран. Современная медицина столкнулась с целым рядом заболеваний, трудно поддающихся фармакотерапии.

Все большее внимание привлекают к себе немедикаментозные и сочетанные методы лечения в связи с высоким уровнем аллергизации населения, большим количеством противопоказаний и побочных эффектов при назначении лекарственных препаратов, высокой стоимостью последних, особенно импортного производства.

Наблюдается стремительное развитие неинвазивных оптических методов, применяемых в современной медицине для диагностики, терапии и хирургии различных заболеваний. При воздействии лазерного излучения на биоткань выбор параметров излучения (длины волны и мощности) и времени воздействия, как правило, осуществляется эмпирически, исходя из опыта и статистически накопленной информации. В тоже время именно знание спектральной зависимости глубины проникновение лазерного излучения в биоткань является одним из ключевых моментов при выборе оптимальных условий проведения лазеротерапии, включая лазерофорез или наблюдение разных слоев биоткани во время диагностики.

Нами разработан оптический метод и устройство для определения глубины проникновения света в кожу в условиях общей вариативности ее структурноморфологических параметров, основанные на регистрации потоков отраженного от кожи излучения в трех или более узких или широких спектральных участках и их спектральном анализе с использованием регрессионного подхода к решению обратных задач оптики светорассеивающих сред. Показана возможность оценки спектральной глубины проникновения света в кожу по изображениям кожи в трех широких спектральных участках (красном, зеленом и синем). Оценены погрешности метода, проанализирована его устойчивость к погрешностям оптических измерений [1].

Разработаны и запатентованы портативные устройства для определения местоположения биологически активных точек (БАТ) на теле человека с минимальным воздействием на организм пациента и состояние БАТ, и предложены лазерные технологии введения лекарственных средств в область БАТ [2, 3]. Теоретические и экспериментальные исследования показали, что импульсное или модулированное по интенсивности лазерное излучение более эффективно, чем непрерывное, при

проведении лазерофореза [4]. Разработано устройство питания лазерного излучателя с микроконтроллером для проведения лазерофоретического введения препаратов, в котором излучение лазера синхронизировано с пульсовой волной [3].

биодоступности Значительное увеличение лекарственных средств при применении НИЛИ наблюдалось нами при проведении модельных экспериментов лазерофореза in vitro, а также in vivo на очагах поражения и точках акупунктуры при кожных заболеваниях. Лазерные технологии успешно применялись при лечении группы больных в Минском Городском клиническом кожно-венерологическом диспансере [2]. Дальнейшие всесторонние исследования приведут к разработке новых аппаратных методик И средств для диагностики И лечения различных заболеваний [5, 6].

Возрастающее внедрение в медицинскую практику лазерофореза требует дальнейших исследований для установления оптимальных параметров по всем компонентам его проведения, создания новых методик и аппаратуры для проведения лазеротерапии, разработки методов контроля биодоступности лекарственных средств, оптимизации управляемых характеристик лазерного излучения, определения эффективных мест введения лекарственных средств при различных патологиях.

- [1] Лысенко, С.А. Неинвазивная диагностика микрофизических параметров кожи на основе спектроскопии диффузного отражения с пространственным разрешением / С.А. Лысенко, М.М. Кугейко // Журн. прикл. спектр. – 2012. – Т. 79, № 6. – С. 932– 941.
- [2] Лисенкова, А.М. Разработка методик и аппаратных средств лазерофореза для лечения кожных заболеваний / А. М. Лисенкова, Т. А. Железнякова, И. А. Кобак, В. А. Щербатюк, Б. Н. Лисенков, В. М. Дюба // Медэлектроника–2010. Средства медицинской электроники и новые медицинские технологии: сборник науч. статей VI Междунар. науч.-тех. конф., Минск, Беларусь; 8–9 дек. 2010 г. – Минск: БГУИР, 2010. – С. 268–271.
- [3] Лисенкова, А.М. Проведение лазерофореза в область биологически активных точек при патологии печени / А.М. Лисенкова, Н.М. Орёл, Т.А. Железнякова, И.А. Кобак, В.А. Щербатюк // Медэлектроника–2012. Средства медицинской электроники и новые медицинские технологии: сборник науч. статей VII Междунар. науч.-тех. конф., Минск, Беларусь; 13–14 дек. 2012 г. – Минск: БГУИР, 2012. – С. 24–26.
- [4] Железнякова, Т.А. Метод лазерофореза посредством излучения с периодически изменяющейся во времени интенсивностью / Т.А. Железнякова, М.М. Кугейко, С.В. Солоневич, А.А. Рыжевич // Вестн. БГУ. Сер. 1. 2009. № 3. С. 24–30.
- [5] Лысенко, С.А.Персонифицированная лазерная терапия биотканей / С.А. Лысенко, М.М. Кугейко, А.М. Лисенкова // Медэлектроника–2012. Средства медицинской электроники и новые медицинские технологии: сборник науч. статей VII Междунар. науч.-тех. конф., Минск, Беларусь; 13–14 дек. 2012 г. – Минск: БГУИР, 2012. – С. 177–180.
- [6] Орёл, Н.М. Регуляция метаболизма в печени крыс с экспериментальным холестазом путем воздействия лазерным излучением на биологически активные точки / Н.М. Орёл, Е.С. Пышко, Д.Ю. Соколовский, Т.А. Железнякова, А.М. Лисенкова, И.А. Кобак, В.А. Щербатюк // ЛФиОТ–2012: сборник науч. статей IX Междунар. конф. Гродно, 30.05-2.06.2012. – Ч. 1. – Минск: ИФ НАНБ, 2012. – С. 118–120.

УДК 57.081.23 + 577.344.3

Хлудеев И. И.¹, Дик С. К², Терех А. С.², Смирнов А. В.², Зорин В. П.¹

НЕИНВАЗИВНЫЙ МЕТОД КОНТРОЛЯ ОТКЛИКА КОЖНОЙ МИКРОЦИРКУЛЯЦИИ НА ВНЕШНЕЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ

¹Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

ivan2khl@mail.ru

²Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, ул. П.Бровки, 6,220013 Минск, Беларусь

Известно, что характеристики микроциркуляции (МЦ) в тканях чувствительны к различным внешним воздействиям, в том числе, связанным с действием фотоизлучения. Например, при фототерапии помимо основных лечебных эффектов (противовоспалительного, обезболивающего, иммунокоррегирующего и регенераторного) часто наблюдается улучшение МЦ. С другой стороны повреждение васкулярной системы (ВС), вызывающее ишемию и анексию в ткани-мишени, часто определяет эффективность фотодинамической терапии (ФДТ). Таким образом, характеристики МЦ могут служить важными прогностическими параметрами при оценке эффективности терапевтических воздействий, поэтому развитие методов контроля кровотока in situ представляет несомненный интерес.

В нашей работе использовался неинвазивный оптический метод, основанный на анализе параметров спекл-поля, которое формируется в результате интерференции отраженного или рассеянного тканями лазерного излучения. Рассеяние света на движущихся эритроцитах крови приводит к динамической трансформации спекл-поля, которое изменяется в пространстве и во времени с характерными для исследуемых биотканей частотами (от единиц Гц до нескольких КГц). Регистрация и анализ амплитудно-частотных характеристик флуктуации интенсивности единичных спеклов (мощность спектра, полосовой коэффициент) с помощью разработанной системы«Speckle Scan» [1] позволяют получить информацию об изменении скорости и интенсивности кожного кровотока.

Ранее нами было показано, что ФДТ индуцирует запуск процессов тромбообразования в микрососудах, приводящих к нарушению МЦ, которые можно зарегистрировать спекл-оптическим методом [2]. В данной работе мы провели сравнительные исследования изменения кожной МЦ под действием различных физических и химических факторов и при фотодинамическом воздействии, используя спекл-оптический и тепловизионный методы контроля.

Модуляцию МЦ на участках кожи предплечья человека проводили локальным воздействием аккумулятора холода в течение 4-5 минут (холодовая проба) и с помощью накожной аппликации препарата Финалгон (тепловая проба). Анализ регистрируемых с помощью системы «Speckle Scan» и тепловизионной камеры MobIR М4 изменений параметров кровотока в исследуемых участках кожи показал наличие обратной корреляции между температурой кожи и величиной полосового

коэффициента. Данный результат подтверждает информативность спекл-оптических измерений при оценке кожной МЦ.

Исследование реакции ВС на ФДТ с использованием хлорина е₆ (Хл е₆) и диметилового эфира хлорина e₆ (ДМЭ) показало, что физико-химические свойства фотосенсибилизаторов (ФС) влияют на динамику развития повреждения микрососудов. Для Хл е₆ фотосенсибилизированное повреждение ВС при малых интервалах между введением ФС и фотооблучением было незначительным и носило обратимый характер, но эффект значительно возрастал при длительном (24 часа) интервале между введением Хл е₆ и облучением. При использовании ДМЭ наблюдали значительное (более 50%) и необратимое снижение МЦ при фотооблучении сразу после введения ФС, а увеличение введение/фотооблучение до 24 часов заметно снижало интервала эффект повреждающего воздействия ФДТ на ВС. Результаты опытов коррелируют с данными, полученными при исследовании фотосенсибилизированного повреждения ВС мышцы cremaster muscle методом интравитальной микроскопии [3].

Таким образом, разработан адекватный и информативный спекл-оптический метод оценки МЦ для неинвазивного контроля состояния ВС ткани-мишени при ФДТ.

- [1]. Применение прибора «SPECKLE-SCAN» для оценки состояния поверхностной микрогемодинамики в эксперименте/С.К. Дик [и др.] //Известия Гомельского государственного университета им. Ф.Скорины. 2011. №6 (69). С. 56-62.
- [2]. Estimation of blood microcirculation in integuments by non-invasive speckle-optical method under the photodynamic action / S. Dick [et al.]// Z. Med. Phys. – 2009. – V.19. – P. 90–96.
- [3]. Хлудеев И.И. Сравнительный анализ процессов локализации хлориновых фотосенсибилизаторов в кровеносных сосудах и сенсибилизации ими реакции гемостаза. / И.И. Хлудеев, И.Е. Кравченко, В.П. Зорин // Доклады БГУИР. - 2011. -№3(57). - С.18-24.

УДК 53.043+577.344.3 А. В. Микулич¹, S. Kavaliauskiene², А.И. Третьякова¹, Л.Г. Плавская¹, В.Ю. Плавский¹, Р. Juzenas²

О ФОТОДИНАМИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ БЛЕББИСТАТИНА

¹ Институт физики им. Б.И.Степанова НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь

a.mikulich@dragon.bas-net.by

² Институт исследования рака, Университет г. Осло, NO-0310 Осло, Норвегия petras. juzenas@rr-research.no

Ежегодно онкологические заболевания диагностируются у более чем 3.2 миллиона жителей Европы [1]. По данным всемирной организации здравоохранения (BO3) число пациентов с указанными заболеваниями возрастет до уровня 22 миллионов новых случаев к 2030 году. С целью решения данной проблемы постоянно ведется поиск новых высокоэффективных методов и препаратов. По нашему мнению, одним из таких препаратов может стать соединение «блеббистатин» (далее - блеббистатин). Впервые блеббистатин был открыт при изучении роли миозина II в процессах цитокинеза биологических клеток [2]. Вместе с тем, возможность применения блеббистатина в качестве терапевтического средства в борьбе с онкологическими заболеваниями изучена весьма поверхностно. Исследования, проведенные в данной работе, дают основания полагать, что блеббистатин обладает ярко выраженным селективным фотодинамическим эффектом по отношению к раковым клеткам человека. В качестве объектов исследования были выбраны следующие культуры клеток человека - аденокарцинома простаты (Du145 и LNCaP), глиобластома (U87), меланома (FEMX-I) и иммортализированные фибробласты (F-11hTERT). Облучение указанных культур проводили с помощью установки из 4 флуоресцентных ламп со спектром излучения 390 - 470 нм с максимумом λ = 420 нм (плотность мощности мВт/см²). Определение механизма действующего излучения – 11 действия блеббистатина проводили помощью специальных флуоресцентных с зондов. чувствительных к образованию активных радикалов.

Цитотоксическое действие блеббистатина на культуры клеток человека в условиях *in vitro* исследовали в широком диапазоне концентраций в течение 3 и 24 ч после его добавления. Установлено, что в диапазоне концентраций блеббистатина до 100 мкМ выживаемость клеток находится в пределах $90\pm10\%$. Применение максимальной концентрации (200 мкМ) увеличивает цитотоксичность до $75\pm10\%$. При инкубации блеббистатином в течение 24 ч наблюдается зависимое от концентрации цитотоксическое действие для всех культур клеток. Так, для концентрации блеббистатина 200 мкМ выживаемость клеток составляет 20% для F11-hTERT, 30% для U87, ниже 10% для Du145, FEMX-I и LNCaP.

Исследование фотодинамического действия блеббистатина проводили при инкубации культур клеток в течение 24 ч сублетальной концентрацией блеббистатина (25 мкМ), оказывающей минимальное цитотоксическое действие (рис.1). Из рис.1 видно, что облучение оптическим излучением 390 – 470 нм ($\lambda_{\text{макс.}} = 420$ нм) вызывает

фототодинамический эффект, причем выживаемость клеток при облучении в отсутствии блеббистатина не изменяется или изменяется незначительно.



Рис.1. Фотодинамическое действие блеббистатина (25 мкМ) на культуры клеток человека при облучении оптическим излучением 390 – 470 нм ($\lambda_{\text{макс.}} = 420$ нм, плотность мощности – 11 мВт/см²): А) Du145, Б) LNCaP, В) U87, Г) FEMX-I, Д) F11-hTERT. Е) Усиление токсичности, вызываемое облучением, вычислено по отношению к группам с блеббистатином без облучения.

Наблюдается ярко выраженное селективное действие блеббистатина по отношению к культурам раковых (Du145, LNCaP, FEMX-I) и здоровых (F-11hTERT) клеток. Следует отметить, что фотодинамическое действие на клетки U87 практически не отличается от действия на клетки F11-hTERT. Возможным объяснением таких различий могут быть морфологические особенности и степень подвижности указанных клеток. Известно также, что концентрация блеббистатина 5 – 25 мкМ оказывает стимулирующее действие на подвижность клеток астроцитомы (клетки U87, U251, SNB19, T98), увеличивая при этом активность миозина II [3]. Мы полагаем, что ослабление фотодинамического действия в случае клеток U87 и F11-hTERT связано с ингибированием активности миозина II.

С помощью флуоресцентных зондов установлено, что фотодинамическое действие блеббистатина протекает через механизм с образованием активных радикалов (тип реакций I), а не через синглетный кислород.

- Ferlay J. Estimates of cancer incidence and mortality in Europe in 2008. / J. Ferlay, D.M. Parkin, E. Steliarova-Foucher // Eur. J. Cancer. – 2010. – 46. – p. 765 – 781.
- [2] Straight A.F. Dissecting temporal and spatial control of cytokinesis with a myosin II Inhibitor. / A.F. Straight, A. Cheung, J. Limouze, I. Chen, N.J. Westwood, J.R. Sellers, T.J. Mitchison // Science. – 2003. – 299. – p. 1743 – 1747.
- [3] Salhia B. Role of myosin II activity and the regulation of myosin light chain phosphorylation in astrocytomas / B. Salhia, J.H. Hwang, C.A. Smith, M. Nakada, F. Rutka, M. Symons, J.T. Rutka // Cell Motil. Cytoskeleton. 2008. 65. p. 12 -24.

УДК 533.9.082.5; 621.373.826; 621.793.79

Чинь Н.Х.¹, Фам Уиен Тхи¹, А.Л. Танин², А.В.Щемелев², Ж.И. Булойчик¹, Г.Т. Маслова¹, А.П. Зажогин¹

ОЦЕНКА СОСТОЯНИЯ ЧЕЛОВЕКА ПО ПРОСТРАНСТВЕННОМУ РАСПРЕДЕЛЕНИЮ Са и Mg В ВЫСУШЕННЫХ КАПЛЯХ ПЛАЗМЫ КРОВИ МЕТОДАМИ ЛАЗЕРНОЙ АТОМНО-ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ

¹ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

ngochoangch10@yahoo.com, zajogin an@mail.ru

² РНПЦ неврологии и нейрохирургии. ул. Ф. Скорины, 24, 220114, Минск, Беларусь

В последние десятилетия все большее применение в медицинской диагностике находят методы исследования структур, образованных при кристаллизации солей в биологических жидкостях (плазма крови, спинномозговая жидкость, слюна и т.д.) [1].. Этот метод обладает неоспоримыми достоинствами для диагностики различных заболеваний человека на доклинической стадии.

В настоящей работе для разработки методик оценки здоровья человека анализируется пространственное распределение (по диаметру) кальция и магния при высыхании капли крови на гладкой поверхности нескольких пациентов с опухолями ЦНС.

Для оценки локального пространственного распределения макро- и микроэлементов в каплях экспериментально с помощью лазерной многоканальной спектрометрии исследованы образцы высушенных капель крови. Для проведения исследований использовался лазерный многоканальный атомно-эмиссионный спектрометр LSS-1.

Образцы готовили по следующей методике. Каплю крови (плазмы крови) наносили на поверхность тщательно промытой подложки из полиметилметакрилата (ПММА) с помощью микропипетки. Объем капли составлял 10 мкл. Процесс сушки проходил при температуре 20-25 0 С и относительной влажности воздуха 60-65 % в течение примерно 20-24 часов. Диаметр высохших капель на поверхности подложки из ПММА равен примерно 6 мм. Снимки высохших капель плазмы крови пациентов с диагнозом грыжа межпозвонкового диска до и после операции приведены на фотографии (рис. 1). Для получения снимков использовался фотоаппарат Canon PowerShot SX40 HS.



Рис. 1. Снимки высохших капель плазмы крови больных 1, 3 и 4а на плоской поверхности подложки из ПММА: 1 и 3 - до операции, 3а и 4а - после операции

При использовании в качестве образца крови или плазмы крови сыворотки крови больного человека растрескивание носит хаотический характер (рис. 1). Очевидно, что структура поверхности образцов до операции и после существенно различается, как это видно при сравнении снимков 3 и 3а.

Динамику развития процессов абляции и пространственного распределения (по диаметру) кальция и магния при высыхании капли крови и плазмы крови человека исследовали методом атомно-эмиссионной многоканальной спектрометрии при воздействии сдвоенных лазерных импульсов на поверхность образцов при энергии импульсов излучения 58 и 42 мДж (первый и второй импульсы соответственно) и временном интервале между сдвоенными импульсами 8 мкс.

На рис. 2 представлена зависимость интенсивности линий кальция и магния в спектрах высушенных капель крови больных до операции 1 и 3, и после – 4а. По диаметру капли анализ проводили в 10 точках.



Рис 2. Интенсивность линий Са II (393,239 нм), Mg I (383,896 нм) в атомно-эмиссионных спектрах высушенной капли крови

Как видно из приведенного графика, наблюдается определенная закономерность между интенсивностью линий магния и кальция и положением точки. Кальций в основном распределен по краям, а магний (и остальные элементы) преимущественно в тех областях, где концентрация кальция меньше. При сравнении кривых распределения кальция обращает на себя резкое возрастание концентрации его в точках 8 в крови пациента 4a. Одновременно с этим в этих же точках концентрация магния резко падает. Таким образом, прослеживаются определенные закономерности в изменении кальция и магния по поверхности капли у больных до и после операции.Полученные данные хорошо коррелируют с картинками, приведенными на рис. 1.

Настоящее исследование с использованием метода лазерного искрового спектрального анализа показало, что возбуждение сдвоенными лазерными импульсами анализируемой поверхности высохшей капли биологической жидкости является перспективным направлением для полуколичественной оценки распределения эссенциальных элементов по диаметру капли и может быть со временем использовано для поиска маркеров заболеваний.

[1] Шабалин В.Н., Шатохина С.Н.. Морфология биологических жидкостей человека. Хризостом, 2001. 304 с. УДК 533.9.082.5; 621.373.826; 621.793.79

М.П. Патапович¹, Т.В. Докукина², С.А. Марчук², А.П. Зажогин¹

ОЦЕНКА СТРЕСС-РЕКЦИИ МАТЕРИ И РЕБЕНКА МЕТОДАМИ ЛАЗЕРНОЙ АТОМНО-ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ ВОЛОС

¹ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

² РНПЦ психического здоровья, Долгиновский тракт, 152. 220053 Минск, Беларусь <u>Masha_P@tut.by</u>; <u>zajogin_an@mail.ru</u>

Будущее современного общества связано с инновационным развитием. В этих условиях особую ценность приобретает человеческий ресурс, особенно его интеллектуальный компонент. Его сохранение и восстановление во многом зависит от успехов неврологии и психиатрии. По разным данным только больные эпилепсией составляют от 0,5 до 1% в общей популяции населения. Эпилепсия является одним из наиболее распространенных заболеваний нервной системы. Заболеваемость эпилепсией составляет 50-70 случаев на 100 тыс. человек, распространенность 5-10 на 1 тыс. человек, не менее 1 припадка в течение жизни переносят 5% населения, у 20-30% больных заболевание является пожизненным.

Расстройства аутического спектра (РАС), также известные как общие нарушения развития, по своему характеру относятся к группе поведенческих расстройств развития нервной системы и обычно диагностируются в раннем детстве, существенно чаще у мальчиков. На 01.07.2012 г. в Республике Беларусь на диспансерном / консультативном учете состояло 565 детей с РАС или 3,26 случая на 10 тыс. детского населения [1,2].

В последнее время все больший интерес представляют исследования волос матери и больного ребенка для выявления состояния обмена макро- и микроэлементов в организме и психологического воздействия на такой обмен. У детей как повышенное, а часто и очень пониженное, содержание кальция отмечено при церебральных параличах, аутизме. Магний играет важную роль в формировании судорожной готовности. Так в ряде исследований описаны судороги у больных с изолированной идиопатической гипомагнезиемией. С другой стороны, у больных эпилепсией детей часто наблюдается гипомагнезиемия, имеющая положительную корреляцию с тяжестью течения заболевания. Анализ элементарного состава волос дает важную информацию, которая, в комбинации с симптомами и остальными лабораторными данными может помочь врачу в диагностике физиологических нарушений, связанных с отклонениями в общем метаболизме эссенциальных элементов за определенный промежуток жизни больного ребенка. В волосах, в отличие от крови, которая, в транспортную основном, выполняет в организме функцию, происходит концентрирование макро- и микроэлементов [1,2]. Волосы наиболее полно отражают уровень содержания как токсичных (ртуть, свинец, кадмий и т.д.), так и жизненно необходимых элементов (цинк, селен, железо и т.д.).

В настоящей работе для разработки методов анализа состояния обмена макро- и микроэлементов в организме и определения времени получения человеком стресса за промежуток несколько месяцев - несколько лет проведены экспериментальные

исследования образцов волос матери и ребенка с помощью лазерного излучения. Для использовался проведения исследований лазерный многоканальный атомноэмиссионный спектрометр LSS-1. Анализировались суммарные результаты действия 20 последовательных лазерных импульсов (энергия 60 мДж, межимпульсный интервал 8 мкс) на точку для натуральных образцов волос. Натуральные образцы волос исследованы через один см (примерно соответствующий интервалу роста волос в один месяц). Анализ волос открывает новые перспективы для решения проблем со здоровьем малолетних детей, потому что для них содержание макро- и микроэлементов в большой степени зависит от баланса элементов в организме матери. Интенсивности спектральных линий кальция (а) и магния (б) в последовательных точках по длине для образцов волос ребенка и матери представлены на рисунке 1.



Рис. 1. Интенсивности спектральных линий кальция (а) и магния (б) в последовательных точках по длине волос для образцов ребенка и матери.

Видно, что интенсивность линий кальция и магния (концентрация) в течение года у матери изменяется более существенно, чем у ребенка. Сопоставление полученных результатов с жизненным промежутком матери может выявить корреляционную связь между психологическим стрессом и резким падением уровня кальция и магния в организме. При этом наблюдается явное уменьшение уровня кальция у ребенка. Также в этом случае интересно и резкое падение уровня магния у матери в срок примерно до пяти месяцев до забора волос. Такие исследования помогают диагностировать хронические заболевания до клинических проявлений, проследить изменения метаболизма за определенный период и дать динамическую картину баланса веществ в организме. Методом лазерной атомно-эмиссионной спектрометрии, на примере анализа интенсивности линий Са и Mg в спектрах волос матери и ребенка по их длине, показана возможность выявления наличия стрессов и патологических процессов на пред клинической стадии.

Такие исследования дают возможность искать причину существующего дисбаланса элементов, целенаправленно подбирать биологически активные добавки, препараты, корректировать питание, во время оказать психологическую помощь.

[1] Голубева Т.С., Сергеева Н.А., Докукина Т.В., Григорьева Н.К., Алыко Т.Н., Марчук С.А., Лосева В.М. Инвалидность вследствие аутизма у детей в Республике Беларусь. // Репродуктивное здоровье. Восточная Европа, международный научно-практический журнал. 2012. № 6 (24). С. 49-59.

[2] Кэрол Сток Крановиц. Разбалансированный ребенок. Санкт-Петербург. Изд. Редактор. 2012

УДК 615.849.19

А. А. Рыжевич¹, Т. А. Железнякова², С. В. Солоневич¹

ПАРАМЕТРЫ СПЕКЛ-СТРУКТУРЫ В БИОТКАНИ

¹ Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь <u>a.ryzhevich@dragon.bas-net.by</u>

² Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

<u>zhelez@bsu.by</u>

После попадания внутрь биоткани когерентное поляризованное лазерное излучение с длиной волны в диапазоне 600-900 нм остается внутри ткани когерентным и поляризованным на протяжении нескольких миллиметров и более в прозрачных средах организма. Пока свет сохраняет поляризованность и когерентность, в его структуре наблюдаются спеклы, имеющие интерференционную природу и представляющие собой не что иное, как локальные трехмерные максимумы интенсивности. Спеклы могут иметь довольно высокий градиент интенсивности, причем наиболее интенсивными являются спеклы малых размеров, формируемые парциальными световыми пучками, сходящимися под наибольшими углами.

По нашему мнению, самые яркие спеклы будут оказывать максимальное локальное воздействие на ткань, а спеклы с наиболее распространенными параметрами будут определять в целом уровень воздействия излучения на биоткань за счет градиентов интенсивности. Для того, чтобы определить максимальные градиенты интенсивности светового поля, возникающие в биоткани, в ходе экспериментального исследования мы зарегистрировали интенсивность излучения в различных поперечных сечениях лазерного пучка, прошедшего через слой мышечной ткани толщиной 1 мм. Было обнаружено, что средний уровень интенсивности светового поля после образца прямо пропорционален интенсивности падающего пучка, а интенсивность в пиках спеклов может в 3-4 раза превышать среднее значение интенсивности. При изменении среднего уровня интенсивности падающего на образец пучка в выходном поле не происходит изменения формы максимумов интенсивности ни на макро- ни на микроуровне, т. е. спеклы сохраняют свою прежнюю форму и размеры. Это означает, что величина градиентов интенсивности в световом поле после прохождения образца также прямо пропорциональна средней интенсивности в ходного светового поля.

Имевшиеся в наличии оптические приборы в силу своей конструкции не позволяли непосредственно измерить, какие по размеру спеклы создают наибольший градиент интенсивности внутри образца и на его поверхности. Поэтому исследовано продольное распределение интенсивности в прошедшем сквозь образец биоткани излучении. Во всех сечениях выходящего из образца светового поля наблюдаются спеклы разных размеров, однако среди них имеются спеклы с преобладающими размерами и наиболее яркие спеклы. Мы, построив зависимости (рис.1 и 2) размера и максимальной интенсивности этих спеклов от продольной координаты и экстраполировав их к нулевому значению продольной координаты, определили, спеклы какого размера и интенсивности преобладают на глубине, равной толщине образца, и



какой максимальный градиент интенсивности в принципе достижим на этой глубине.

Рис. 1. Зависимость среднего диаметра наиболее ярких (1) и наиболее вероятных (2) спеклов от продольной координаты *s*



Рис. 2. Пиковая интенсивность наиболее ярких (1) и наиболее вероятных (2) спеклов в зависимости от продольной координаты *s*

Максимальный угол схождения спеклобразующих пучков в плоскости образца равен 180°, максимальный угол для расстояния *s* после образца биоткани – φ =2arctg(0,5*D*/*s*), где D – размер образца. Угол схождения парциальных пучков, участвующих в формировании наиболее ярких спеклов, равен φ_B =2arctg(0,3*D*/*s*). Данный угол обеспечивает наличие максимального количества когерентных между собой парциальных пучков при минимальном размере самого спекла. Угол схождения парциальных пучков, формирующих наиболее вероятные спеклы, равен φ_P =2arctg(0,4*D*/*s*).

Наборы (1) и (2) экспериментальных точек на рис. 2 достаточно хорошо описываются функциями вида $y = y + Aexp(-(x-x_0)/t)$. Экстраполяция к s = 0 для аппроксимирующих функций дает, что внутри биоткани соотношение максимумов интенсивностей наиболее ярких и наиболее вероятных спеклов в биоткани составляет примерно 2,6. Поскольку пиковая интенсивность наиболее вероятных спеклов примерно в 3-4 раза превышает среднюю интенсивность светового пучка в целом, при освещении биоткани даже изначально гладким по распределению интенсивности световым пучком в биоткани будут существовать области размером около 15 мкм и максимальным значением интенсивности, превышающим примерно в 10 раз среднее значение интенсивности в световом пучке. В таких «сверхосвещенных» микрообластях биоткани свет, несомненно, будет сильнее воздействовать на процессы, происходящие в них, в том числе, на процессы переноса вещества. Наличие спеклов в распространяющемся излучении, по всей видимости, может влиять на транспорт препаратов, во-первых, за счет неравномерного во времени и пространстве нагрева участков билипидной мембраны, а во-вторых, за счет быстрого разогрева участков молекул химически активных биосоединений ферментного типа, ответственных, например, за транспорт молекул и обмен веществ. Особенно заметным может быть воздействие на ферменты, принцип действия которых основан на явлении туннелирования, где важно даже небольшое (на градусы) повышение температуры.

УДК 615.849.19

А.А. Рыжевич¹, С.В. Солоневич¹, Т.А. Железнякова²

ПОДГОТОВКА УСЛОВИЙ ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАНИЯ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ЛАЗЕРОФОРЕЗА

¹ Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости, 68, 220072 Минск, Беларусь a.ryzhevich@dragon.bas-net.by

² Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск,

Беларусь

zhelez@bsu.by

Лазерофорез представляет собой способ введения лекарственных препаратов в организм через кожу или слизистую оболочку под действием низкоинтенсивного лазерного излучения (НИЛИ). По нашей оценке, только в Беларуси можно применять лазерофорез для эффективного и локализованного введения лекарственных средств точно в очаг(и) поражения или вблизи их примерно в полумиллионе случаев в год. Таким образом, лазерофорез может очень широко использоваться в медицине, даже без учета ветеринарии. Тем не менее, в настоящее время в нашей республике и ближнем зарубежье в клинических условиях он применяется бессистемно и эпизодически. Закономерности введения лекарственных препаратов под действием НИЛИ изучены мало. Чаще всего в литературе приводятся результаты проведения традиционного лечения совместно с лазерной терапией с указанием параметров излучения.

В течение последних лет в Белорусском государственном университете и Институте физики НАН Беларуси проведена системная методическая подготовка к исследованию процесса лазерофореза с целью его внедрения в повседневную медицинскую практику. Удобнее всего изучать закономерности процесса лазерофореза экспериментально, подвергая воздействию излучения лазерных диодов (ЛД) образцы различных биологических тканей, вводя в них посредством излучения медицинские препараты, для чего необходимо использовать специальную оптическую установку, позволяющую позиционировать в зоне облучения ЛД образцы биологической ткани, обеспечивая при этом определенные параметры НИЛИ.

Нами специально изучены эксплуатационные характеристики нескольких подходящих для целей лазерофореза по мощности и длине волны ЛД и свойства генерируемого ими излучения, в частности распределения интенсивности в световых пучках и их расходимости, а также мощностные характеристики ЛД в различных температурных условиях. Произведено обоснование выбора дозы облучения биоткани при проведении процедуры лазерофореза; разработана методика подбора соответствующих рабочих режимов для различных лазерных источников. Разработана и создана установка с вертикальной геометрией для экспериментального исследования процесса лазерофореза. Разработаны и испытаны в работе оптические схемы для формирования лазерных световых полей различных типов.

Отработана методика подготовки образцов мышечной и жировой ткани для исследования процесса лазерофореза. Изготовлены специальные устройства, инструментарий и отработан ряд методик для проведения исследований на

экспериментальных животных (размещение, иммобилизация, подготовка кожных покровов, нанесение препарата, облучение). В частности, предложена и реализована оригинальная и удобная в использовании конструкция боксов для долговременного размещения групп экспериментальных животных. Подопытных животных необходимо обездвиживать на время облучения без применения наркоза, т. к. наркоз существенно влияет на обменные процессы организма. Наиболее приемлемым способом решения данной проблемы явилось создание механического устройства для фиксации животных, не травмирующего их.

существует большое B настоящее время количество всевозможных лекарственных препаратов самых различных назначений, которые могут вводиться в организм несколькими способами. Для лазерофореза, конечно же, подходят далеко не препараты. Определены критерии все производящиеся выбора имеющихся лекарственных препаратов для лазерофореза с точки зрения активного вещества, вида основы и формы препарата, а также намечены пути создания новых форм лекарственных препаратов, пригодных для лазерофореза. Для непосредственного применения конкретных препаратов нужно точно знать закономерности изменения их агрегатного состояния при различных температурах и в течение времени, так как, например, излишняя текучесть или, наоборот, вязкость основы препарата могут воспрепятствовать его применению для лазерофореза. Определены зависимости агрегатного состояния и консистенции выбранных лекарственных препаратов от температуры и от времени их нахождения на открытом воздухе.

С медицинской точки зрения необходимо знать, какое количество активного вещества может быть введено в организм, поэтому была разработана методика дозировки конкретных лекарственных препаратов для лазерофореза с учетом их физических и оптических характеристик. Предложена и отработана методика дозированного нанесения на биологическую ткань лекарственных препаратов на гидрофильной и гидрофобной основах с использованием стеклянной подложки; разработаны и изготовлены шпатели-дозаторы для нанесения слоя препарата фиксированной и регулируемой толщины. Предложена и реализована конструкция термостатируемого шпателя-дозатора.

Исследованы наиболее важные применительно к лазерофорезу оптические характеристики образцов препаратов: коэффициент ослабления лазерного излучения препаратами на гидрофобной основе в зависимости от температуры; спектры пропускания, поглощения, люминесценции и возбуждения некоторых препаратов; проверены целесообразность и принципиальная возможность их использования для лазерофореза, начато изучение динамики проникновения лекарственных препаратов внутрь ткани с помощью новейших оптических технологий, в том числе с применением лазерного сканирующего микроскопа.

Определены направления дальнейших исследований, которые должны быть ориентированы на отработку наиболее эффективных параметров лазерного излучения и режимов лазерофореза для различных тканей и лекарственных препаратов, а также на разработку специализированных аппаратов и вспомогательных устройств для проведения процедуры лазерофореза.

УДК 533.9.082.5; 621.373.826; 621.793.79

Н.Х. Чинь¹, Фам Уиен Тхи¹, А.Л. Танин², А.В.Щемелев², Ж.И. Булойчик¹, Г.Т. Маслова¹, А.П. Зажогин¹

РАЗРАБОТКА МЕТОДИК КОЛИЧЕСТВЕННОГО АНАЛИЗА ЭЛЕМЕНТНОГО СОСТАВА БИОЛОГИЧЕСКИХ ЖИДКОСТЕЙ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ ИСКРОВОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ СО СДВОЕННЫМИ ЛАЗЕРНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ

¹ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь ² РНПЦ неврологии и нейрохирургии. ул. Ф. Скорины, 24, 220114, Минск, Беларусь <u>пgochoangch10@yahoo.com</u>, <u>zajogin an@mail.ru</u>

Современное состояние знаний о биологической роли элементов в онкопаталогии ЦНС пока можно характеризовать как поверхностное прикосновение к этой проблеме. Опухоли ЦНС занимают второе место среди злокачественных опухолей у детей, уступая только лимфомам и лейкозам, и составляют среди них 14-20%. В России ежегодно заболевают 1,4 на 100 тыс. детей в возрасте до 16 лет, что составляет приблизительно 450 случаев в году. В Республике Беларусь частота встречаемости различных опухолей головного мозга соответствует мировым тенденциям [1-3]. Чаще заболевают дети дошкольного возраста: пик заболеваемости приходится на 2-7 лет. Большинство опухолей ЦНС не связаны с какими-либо факторами риска и возникают по неизвестным причинам. При отсутствии точных причин возникновения опухолей головного мозга у детей предотвратить большинство из них в настоящее время невозможно. Поэтому экспрессный контроль, в частности биологических жидкостей, - важнейшая задача современной аналитической химии. Перспективным направлением в этом плане является использование лазерного многоканального атомно-эмиссионного спектрометра LSS-1.

Для разработки методик анализа содержания металлов в биологических жидкостях (кровь, спинномозговая жидкость и т.д.) изучено влияние физикохимических свойств фосфатов К на пространственное распределение катионов кальция, магния и алюминия при высыхании капли водного раствора хлоридов металлов на поверхности пористого тела (бумажного фильтра).

При проведении экспериментов кусочек фильтра диаметром 20 мм наклеивали на поверхность держателя образцов, затем на поверхность фильтра наносили 10 мкл 5% раствора ортофосфата калия. Образец высушивали. Затем поверх наносили водный раствор альбумина со смесью солей исследуемых элементов различной концентрации (0,005 - 0,10%). Динамику развития процессов абляции и пространственного распределения кальция, магния и алюминия (по диаметру) при высыхании капли исследовали методом атомно-эмиссионной многоканальной спектрометрии при воздействии сдвоенных лазерных импульсов на поверхность образцов при энергии импульсов излучения 58 и 42 мДж (первый и второй импульсы, соответственно) и временном интервале между сдвоенными импульсами 8 мкс.

На рис. 1а представлена зависимость интенсивности линии кальция от концентрации и положения точки на образце. По диаметру капли анализ проводили в 30 точках. На рис.1 б приведен градуировочный график для количественного определения кальция в растворах.



Рис 1. Зависимость интенсивности линии Са II (393,239 нм) в спектрах от концентрации (а); градуировочный график - (б).

Как видно из рис. 1а, предварительное нанесение на подложку ортофосфатов калия приводит к существенному уменьшению размера капли и соответствующему увеличению интенсивности линий почти на порядок. Наблюдается хорошая линейная зависимости между интенсивностью и концентрацией для кальция. Аналогичные графики построены для магния и алюминия. Коэффициенты корреляции г для этих элементов равны 0,99. Повышения чувствительности определения на 2 – 3 порядка можно добиться, увеличивая количество накоплений по площади образца.

Проведенные исследования показали, что предварительное нанесение ортофосфата калия позволяет значительно уменьшить размеры зоны распределения и тем самым повысить интенсивность линий макроэлементов при их последующем нанесении. Использование фосфатов калия для увеличения интенсивности линий в спектрах высохших капель является перспективным направлением для разработки методик количественного анализа растворов биологических образцов (кровь, плазма, спиномозговая жидкость, слезы и т.д.) методом лазерной атомно-эмиссионной спектрометрии со сдвоенными лазерными импульсами.

- [1] Залуцкий И. В. Эпидемиология злокачественных новообразований в Беларуси. Минск, 2006.
- [2] Петрович С. В. Алейникова О. В. Эпидемиология злокачественных новообразований у детей. Минск, 2004.
- [3] Смеянович А.Ф., Шанько Ю.Г., Танин А.Л., Смеянович В.А. Ближайшие и отдаленные результаты хирургического лечения субтенториальных околостволовых опухолей головного мозга». Мат. научн.-практ. конф. «Поленовские чтения» С.-Пб. 2009. С. 310.

УДК 533.9.082.5; 621.373.826; 621.793.79

М.П. Патапович¹, Чинь Нгок Хоанг¹, И.Д. Пашковская¹, Лэ Тхи Ким Ань¹, Н.И. Нечипуренко¹, А.П. Зажогин¹

РАЗРАБОТКА МЕТОДИК ПОВЫШЕНИЯ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭССЕНЦИАЛЬНЫХ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ В БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБРАЗЦАХ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ АТОМНО-ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ

¹ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь Masha_P@tut.by; zajogin_an@mail.ru

Нарушение баланса макро-микроэлементов в организме человека приводит к развитию различных заболеваний. Существуют самые разнообразные причины дисбаланса микро- и макроэлементов в организме. Как правило, дисбаланс химических элементов в организме взрослых и детей включает недостаточное содержание ряда эссенциальных (жизненно необходимых) микро- и макроэлементов (Zn, Cu, Fe, Ca, Mg, и др.) и одновременно избыточное накопление ряда токсичных металлов (Al, Cd, Be и др.) [1].

Концентрация большинства важных для жизнедеятельности организма тяжелых металлов в волосах мала (порядка 10^{-4} - 10^{-3} %), прямым методом определять их не удается [2, 3]. Для количественного анализа элементов проводят минерализацию волос методом мокрого озоления и определяют элементы в высушенных пробах методом атомно-эмиссионной спектрометрии с возбуждением спектров электрической дугой [3].

В настоящей работе с целью повышения чувствительности и расширения возможностей практического использования метода лазерной атомно-эмиссионной спектрометрии изучено влияние фосфатов К и Na на интенсивность линий ряда эссенциальных тяжелых металлов (меди, железа и цинка) в спектрах.

Для проведения исследований использовался лазерный многоканальный атомноэмиссионный спектрометр LSS-1

Динамику развития процессов абляции и возбуждения приповерхностной плазмы исследовали при воздействии сдвоенных лазерных импульсов на анализируемую поверхность образцов высушенных капель водного раствора хлоридов меди, цинка, железа и фосфатов калия или натрия. Энергия импульсов излучения - 58 и 42 мДж (первый и второй импульсы, соответственно), временной интервал между сдвоенными импульсами - 8 мкс. Диаметр пятна абляции 50-100 мкм.

Для разработки методики полуколичественного и количественного определения элементов нами использован метод осадочной бумажной хроматографии. Метод позволяет уменьшить размер зоны осаждения элементов, повысить интенсивность линий и в том числе оценить особенности поверхностного распределения макроэлементов.

В качестве осадителей для хлоридов меди, цинка, кальция и железа использовали моно-, ди- и ортофосфаты натрия, поскольку фосфаты тяжелых металлов обладают ограниченной растворимостью и вполне удовлетворяют требованиям осадочной хромато-графии [4]. Трехзамещенные фосфаты многовалентных элементов практически не растворяются. Так, произведение растворимости (ПР) для Cu₃(PO₄)₂ равно 1,26.10⁻³⁷,

 $Zn_3(PO_4)_2$ - 1.10⁻³¹ и FePO₄ - 1,13.10⁻²². Литературные данные по растворимости других фосфатов немногочисленны и весьма противоречивы [4].

Образцы готовились следующим образом. Раствор фосфата натрия (калия) концентрацией 5 % наносили микропипеткой (10 мкл) на поверхность бумажного фильтра диаметром 20 мм и высушивали. Процесс сушки проходил при температуре 50 ⁰C и относительной влажности воздуха 30-35 % в течение примерно 5 мин. Затем на поверхность высушенной капли наносили смесь хлоридов металлов с концентрацией 1 % каждого металла и высушивали. После высушивания образцы анализировали по диаметру как описано выше. Результаты проведенных исследований для ортофосфатов меди, цинка и железа приведены на рис. 1.



Рис. 1. Интенсивности линий: *a* - Zn I (λ =334,5 нм), Cu I (λ =324,754 нм), Fe I (λ =384,105 нм) в спектрах смеси солей по диаметру образца 20 мм для ортофосфатов Na и K

При введении фосфатов концентрация всех элементов в центральной части заметно начинает увеличиваться и наблюдается определенная закономерность пространственного распределения элементов. Особенно это заметно для образца, где в качестве осадителя использовали растворы фосфатов калия (рис. 1). Наблюдаемое отличие, повидимому, можно объяснить тем, что растворимость фосфатов калия больше, чем фосфатов натрия. Таким образом, исследования показали, что фосфаты калия и натрия позволяют значительно уменьшить размеры зоны распределения тяжелых металлов и тем самым повысить интенсивность линий в спектрах при высыхании капли раствора нанесенной на высохшую каплю фосфата щелочного металла.

- [1] Скальный А.В. // Микроэлементы в медицине. 2003. №4. С. 55-56.
- [2] Гладких Э.А., Полякова Е.В., Шуваева О.В., Бейзель Н.Ф. // Микроэлементы в медицине. 2003. №4. С. 20-24.
- [3] Лихачев С.А., Нечипуренко Н.И., Пашковская И.Д., Булойчик Ж.И. // Актуальные проблемы неврологии и нейрохирургии. /под. ред. С.А. Лихачева. 2009. Вып.12. С.233-239.
- [4] Алексеев, В.Н. Количественный анализ. М.: Химия. 1972. С.65-118.

УДК 535.37

Д.С. Тарасов¹, М.П. Самцов², К.Н. Каплевский¹, Е.С. Воропай¹, А.П. Луговский²

СПЕКРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ИНДОТРИКАРБОЦАНИНОВОГО КРАСИТЕЛЯ С ПОЛИГЛИКОЛЯМИ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ

¹ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

² НИИПФП им. А.Н. Севченко БГУ, ул. Курчатова, 7, 220108 Минск, Беларусь samtsov@bsu.by

Совпадение полос электронного поглощения полиметиновых красителей (ПК) с областью прозрачности биологических тканей (700 - 900 нм) удовлетворяют требованиям, которые предъявляются фотосенсибилизаторам следующего поколения для фотодинамической терапии и оптической диагностики локализации опухолей [1, 2]. Разработка фотосенсибилизаторов для ФДТ на основе полиметиновых красителей предполагает оптимизацию структуры молекул. Одной из актуальных задач является повышение их биосовместимости. В связи с этим в лаборатории спектроскопии разработан и синтезирован водорастворимый краситель содержащие гидрофильный и биосовместимый заместитель - полиэтиленгликоль. В результате такой модификации получен краситель с хорошей растворимостью в водных растворах (не менее 1,5×10⁻³ М).

В спектрах поглощения красителя в воде в области основной полосы поглощения наблюдается два выраженных максимума (рис. 1а). Разбавление раствора приводит к vменьшению поглощения В коротковолновом максимуме λ=658 НМ И соответствующему росту в длинноволновом λ=706 нм. При этом происходит относительно небольшое смещение длинноволнового максимума с λ=706 нм на λ=708 нм. В семействе спектров поглошения при изменении концентрации красителя в диапазоне 10⁻⁵÷10⁻⁷ М наблюдается пересечение кривых в одной точке. Наличие изобестической точки свидетельствует о том, что в растворе присутствует два типа поглощающих центров, коэффициенты поглощения которых на данной длине волны совпадают. При разбавлении раствора до концентраций ниже 0,5×10⁻⁶ М не происходит деформаций спектр поглощения, а коротковолновый максимум основной полосы поглощения теряет признаки экстремума. На основании этих данных сделано заключение, что при концентрации красителя менее C_{кр}=0,5×10⁻⁶ М в спектре поглощения проявляется преимущественно одна компонента. Из сопоставления с литературными данными [3, 4] в разбавленных растворах ПК находятся в виде мономеров, в форме свободных ионов или контактных ионных пар, образованных с противоионом красителя. На основании известного спектра поглощения одной из компонент можно рассчитать спектр поглощения второй, а из анализа данных по спектрам поглощения мономеров и ассоциатов можно найти степень ассоциации красителя (рис. 1в) [5]. При концентрациях выше 10⁻⁵ М пропадает выраженная изобестическая точка, т.е. раствор становится многокомпонентной системой (рис. 1а).



Рис. 1. а) Спектры поглощения ПК в водных растворах при различных концентрациях; б) Расчет агрегационного числа ассоциатов ПК, где $_{X = lg} \left(\frac{D}{\varepsilon_{M} l} \right)$ и $_{Y = lg} \left(\frac{C_{0} - D}{\varepsilon_{M} l} \right)$; в) Степень ассоциации ПК в водном растворе от концентрации

Для малоконцентрированных растворов спектр флуоресценции исследованного красителя не зависит от длины волны возбуждения и спектр приблизительно зеркально-симметричен поглощению длинноволновой компоненты. Нагревание водного раствора ПК сопровождается увеличением поглощения в длинноволновом максимуме уменьшением В коротковолновом, наблюдается разгорание И флуоресценции. Из этого следует, что в водном растворе исследуемый краситель присутствует в виде смеси мономеров и нелюминесцирующих ассоциатов Н-типа. Путем использования методики, описанной в работе [6], рассчитано агрегационное число, которое для диапазона концентраций $10^{-5} \div 10^{-7}$ М составило $n = (2,06 \pm 0,03)$. Это отнести коротковолновую полосу поглощения к поглощению, позволяет обусловленному димерами красителя.

Таким образом, проведено исследование спектрально-люминесцентных свойств индотрикарбоцианинового красителя с полиэтиленгликолями в водных растворах. Установлено, что краситель хорошо растворим в воде (не менее $1,5 \times 10^{-3}$ M); водный раствор красителя в диапазоне концентраций $10^{-5} \div 10^{-7}$ M представляет собой смесь мономеров и димеров, при этом степень ассоциации не превышает 60%.

- [1] Istomin Y. P. [et al.] // Experimental oncology. 2006. Vol. 28, №1. P. 80–82.
- [2] Rao J. [et.al.] // Curr. Opin. in Biotechnol. 2007. Vol. 18. P. 17-25.
- [3] Reichardt C. Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry, Third Edition. // Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2003.
- [4] Джеймс Т.Х. Теория фотографического процесса // Л.: Химия, 1980.
- [5] Левшин Л.В., Салецкий А.М. Люминесценция и ее измерения: Молекулярная люминесценция. М. Изд-во МГУ, 1989. 272 с.
- [6]Южаков В.И. // Успехи химии. 1979. Т. 48, № 11. С. 2007-2033.

УДК 535.373:577.32

Д.Г. Шербин², С. Ж. Лозникова², А. А. Суходола¹

СПЕКТРАЛЬНО-КИНЕТИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МИКРОСЕКУНДНОЙ ФОСФОРЕСЦЕНЦИИ ТРОМБОЦИТОВ ЧЕЛОВЕКА

¹Институт физики им. Б.И. Степанова НАН Беларуси, Минск, Беларусь <u>sukhodola@imaph.bas-net.by</u>

²Институт биофизики и клеточной инженерии НАН Беларуси, Минск, Беларусь

Мембранные белки клеток крови тромбоцитов играют ключевую роль в процессах формирования тромбов [1-2]. Биологические свойства мембранных белков тесно связаны с их конформацией и внутримолекулярной динамикой. Уникальные возможности для изучения медленной внутримолекулярной динамики белков предоставляет метод триптофановой фосфоресценции при комнатной температуре (ТФКТ) [3,4]. Ранее была обнаружена и изучена миллисекундная ТФКТ мембранных белков тромбоцитов человека [5]. В настоящей работе проведено исследование фосфоресценция при комнатной температуре тромбоцитов человека в микросекундном временном диапазоне.

Объектом исследования служили тромбоциты, выделенные из крови человека. Стабилизированная раствором антикоагулянта, содержащего в своем составе цитрат, (Sigma, CIIIA), донорская фосфат, декстрозу, аденин кровь получена В Республиканском научно-практическом центре гематологии и трансфузиологии МЗ РБ. Обогащенную тромбоцитами плазму получали центрифугированием 5 мл крови при 200 g в течение 7-10 минут при комнатной температуре. Отмытые тромбоциты получали по методике, описанной в работе [6]. Удаление кислорода из раствора белка осуществляли с помощью сульфита натрия (хч, Реахим, Россия) в конечной концентрации 50 мМ.

Измерения кинетики и спектров фосфоресценции в микросекундном диапазоне при комнатной температуре (20°С) проводились на автоматизированном лазерном спектрометре, созданном в Институте физики им. Степанова НАН Беларуси. В качестве возбуждающего излучения использовались импульсы четвертой гармоники лазера на неодиме YAG: Nd³⁺ длительностью 10 нс и длиной волны генерируемого излучения $\lambda_{\rm B}$ = 266 нм. Исследуемый образец находился в кварцевой кювете размером 1×1 см. Люминесценция образца под прямым углом к возбуждающему излучению фокусировалась на входную щель монохроматора МСД-1. Прошедшее через монохроматор излучение регистрировалось фотоэлектрическим методом.

Обнаружена фосфоресценция при комнатной температуре (ФКТ) тромбоцитов человека в микросекундном диапазоне. Спектр ФКТ тромбоцитов человека, измеренный через 500 мкс после возбуждающего импульса, имеет три максимума при 417, 454 и 490 нм и локализован в области характерной для триптофансодержащих белков, что свидетельствует о триптофановой (белковой) природе фосфоресценции суспензии клеток.
Микросекундная кинетика затухания ТФКТ тромбоцитов в суспензии представляет собой суперпозицию нескольких экспонент. Анализ кривой затухания позволил установить, что кривая затухания микросекундной фосфоресценции тромбоцитов хорошо аппроксимируется суммой трех экспонент с временами жизни: $\tau_1 = 30,5 \pm 5$ мкс, $\tau_2 = 107,7 \pm 5,7$ мкс, $\tau_3 = 427,6 \pm 121,9$ мкс. Конкретные значения параметров ТФКТ несколько варьировали у тромбоцитов, полученных из крови различных доноров.

Кинетические кривые затухания ТФКТ тромбоцитов триэкспоненциальны, что отражает существование в белке структур, дискретно различающихся по жесткости. Со временем жизни τ_2 , τ_3 фосфоресцируют триптофанилы, локализованные в тех местах, где ВМД белков заторможена в наибольшей степени. Обычно участки с такой жесткой структурой находятся в глубине гидрофобного ядра глобулы.

Многие процессы, протекающие в клетке на молекулярном и мембранном уровнях, реализуются в той же временной шкале, что и низкочастотные внутримолекулярные движения белков [4]. Микросекундная ВМД структуры белка отражает перескоки между фиксированными положениями (flipping) колец ароматических аминокислот, происходящие во временном диапазоне 10 мкс – 10 мс, и движения крупных фрагментов полипептидной цепи, смещения доменов и субъединиц, происходящие во временном диапазоне от 10 мкс до 10 с.

- Lancé MD, Sloep M, Henskens YM, Marcus MA. // Clin Appl Thromb Hemost. 2012 Vol. 18(6). P. 561–568.
- [2]. Van der Spuy WJ, Pretorius E. // Rev Neurosci. 2012. Vol. 23(3). P. 269–278.
- [3]. Мажуль В.М., Зайцева Е.М., Щербин Д.Г. // Биофизика. 2000. 45. №.6 С. 965–989.
- [4]. Mazhul V.M., Timoshenko A.V., Zaitseva E.M., Loznikova S.G., Halets I.V., Chernovets T.S. // in Book: Reviews in Fluorescence 2008 / Geddes C.D. (Ed.).. New York, Springer. 1st Edition. 2010. 5. P. 37–67.
- [5]. Mazhul V, Chernovets T, Zaitseva E, Shcharbin D. // Cell Biol Int. 2003. V.27. N 7. P. 571–578.
- [6]. Nathan I, Fleischer G, Livne A, Dvilansky A, Parola AH. // J. Biol. Chem. 1979. Vol. 254. № 19. P. 9822–9828.

УДК 535.37

М.П. Самцов¹, Д.С. Тарасов², К.Н. Каплевский², Е.С. Воропай²

СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА НАНОСОМАЛЬНОЙ ФОРМЫ ТРИКАРБОЦИАНИНОВОГО КРАСИТЕЛЯ

¹ НИИПФП им. А.Н. Севченко БГУ, ул. Курчатова, 7, 220108 Минск, Беларусь <u>samtsov@bsu.by</u> ²Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

dmitrij-tarasov@list.ru

В работе приведены результаты исследования спектрально-люминесцентных свойств нового полиметинового красителя (ПК), перспективного фотосенсибилизатора для фотодинамической терапии [1, 2]. и Проведено сопоставление фотофизических свойств наносомальной формы и исходного соединения в растворах разной полярности (этанол, хлороформ). Объектами исследования были выбраны новый водорастворимый симметричный индотрикарбоцианиновый краситель с полиэтиленгликолем (ПК3) и его аналоги - красители (ПК1 и ПК2), которые не содержат объемные заместители. Все соединения разработаны и синтезированы в лаборатории спектроскопии НИИПФП им. А.Н. Севченко БГУ.

Спектры поглощения и люминесценции исследованных соединений в полярном этаноле близки по структуре и имеют типичную форму для данного класса соединений (рис. 1). При этом форма, положение спектров поглощения и флуоресценции исследованных красителей в полярном этаноле слабо различаются. Спектры поглощения исследованных ПК в этаноле сохраняет форму при различных концентрациях, спектры флуоресценции не зависят от длины волны возбуждения. Последнее обстоятельство свидетельствует о наличии в растворе одного поглощающего и испускающего центра и согласуется с представлением о нахождении молекул ПК в форме свободных ионов в полярных растворителях

В малополярном хлороформе длинноволновая полоса спектров поглощения всех исследованных красителей смещается в длинноволновую область и претерпевает уширение (рис. 2). В ряду ПК1→ПК2→ПК3 наблюдается уменьшение деформации и уширения спектра поглощения красителей в слабополярном хлороформе. В спектрах поглощения ПКЗ остается неизменной форма и положение спектра при изменении его концентрации в широком диапазоне. В этих же условиях спектры поглощения красителей ПК1 и ПК2 деформируются при изменении концентрации. Разбавление уменьшению поглощения в области длинноволнового растворов приводит к максимума и росту интенсивности в коротковолновой части основной полосы поглощения. В спектрах поглощения ПК1 и ПК2 при различных концентрациях проявляется выраженная изобестическая точка. что свидетельствует 0 двухкомпонентности растворов ПК1 и ПК2 в хлороформе.

При этом, спектры флуоресценции ПК1 и ПК2 изменяются с изменением длины возбуждения – при некоторой длине возбуждения в спектре флуоресценции проявляются два максимума, что свидетельствует о способности к флуоресценции

обоих поглощающих центров. В связи с тем, что ассоциаты катионных полиметиновых красителей не обладают флуоресценцией (H-arperati) [3], то двухкомпонентность раствора свидетельствует о существовании в растворах ПК1 и ПК2 в хлороформе равновесной смеси различных ионных форм красителя. Спектр флуоресценции ПК3 в хлороформе сохраняет форму при изменении длины волны возбуждения. Из этого следует, что краситель не ассоциирован и существует в одной ионной форме. Повышение концентрации анионов путем добавления растворимой в органических растворителях соли тетрабутиламмоний бромида к разбавленным растворам ПК1 или ПК2 в хлороформе приводит к росту поглощения в коротковолновом максимуме и соответствующему падению в длинноволновом. Таким образом, коротковолновый максимум – свободным ионам. Следует отметить, что положение спектра поглощения ПК3 в хлороформе практически совпадает с расположением спектров поглощения контактных ионных пар ПК1 и ПК2.



Рис. 1. Спектры поглощения (1-3) и флуоресценции (1'-3') красителей ПК1 (1, 1'), ПК2 (2, 2') и ПК3 (3, 3') в этаноле



Рис. 1. Спектры поглощения $(1 - \Pi K1, 2 - \Pi K2, 3 - \Pi K3)$ и спектры флуоресценции ПК1 $(4 - \lambda_{B036} = 670 \text{ нм}, 5 - \lambda_{B036} = 700 \text{ нм})$ и ПК3 (6) в хлороформе.

Полученные данные свидетельствуют о том, что в ряду красителей ПК1→ПК2→ПК3, по мере увеличения размеров заместителей на концевых группах, в малополярных растворителях наблюдается смещение равновесия ионных форм красителя в сторону увеличения доли контактных ионных пар. Наличие у ПК3 полиэтиленгликолей с массой сопоставимой с массой красителя приводит к тому, что даже в разбавленных растворах молекулы ПК3 находятся в состоянии контактных ионных пар, т.е присутствие в молекулах объемных заместителей создают препятствие отдалению аниона от катиона красителя.

- [1] Y. P. [et al.] // Experimental oncology. 2006. Vol. 28, №1. P. 80–82.
- [2] D Wohrle [et al.] // Russian Chemical Bulletin. 1998. Vol. 47, №5. P.807–816.
- [3] А.А. Ищенко [и др.] // Докл. АН УССР. Сер. Б.- 1988.- Т. 44, №2.-С. 46-49

УДК 533.9:632.935.4

В.В. Ажаронок¹, С.В. Гончарик¹, И.И. Филатова¹, Г.И. Гаджиева², Н.С. Гудковская²,
 Е.И. Жук², А.Г. Жуковский², Н.Л. Свидунович², К. Spasić³, <u>S. Živković⁴</u>, N. Puač³,
 S. Lazović³, G. Malović³ and Z.Lj.Petrović³

СТИМУЛИРУЮЩИЙ И ФУНГИЦИДНЫЙ ЭФФЕКТ ПРЕДПОСЕВНОЙ ПЛАЗМЕННОЙ ОБРАБОТКИ СЕМЯН ЗЛАКОВЫХ И БОБОВЫХ КУЛЬТУР

¹ Институт физики НАН Беларуси, пр. Независимости 68, 220072, Минск, Беларусь, *filatova@imaph.bas-net.by*

²РУП «Институт защиты растений НАН Беларуси» ³ Institute of Physics, University of Belgrade, Serbia_ ⁴Institute for Biological Research "Siniša Stanković", University of Belgrade, Serbia

В работе исследована эффективность метода плазменной обработки семян зерновых и бобовых культур для улучшения их посевных характеристик и защиты от комплекса фитопатогенов. Тестировали семена яровой пшеницы (Triticum aestivum L.), люпина узколистного (Lupinus angustifolius) и кукурузы (Zea mays L.), предоставленные РУП «Институт защиты растений». Обработку семян проводили с использованием двух плазменных реакторов на основе емкостного высокочастотного (ВЧ) разряда, созданных в Институте физики НАН Беларуси и Институте физики (Белград, Сербия), и отличающихся геометрией электродной системы и частотой возбуждения плазмы. ВЧ разряд планарного типа возбуждался на частоте 5,28 МГц между двумя охлаждаемыми медными электродами диаметром 120 мм, расположенными на расстоянии 20 мм друг от друга [1]. Чашки Петри с образцами семян располагали на нижнем электроде. Другой плазменный реактор, работающий на частоте 13,56 МГц, представлял собой цилиндрическую камеру, стенки которой являлись заземленным электродом, а ВЧ напряжение подавалось на второй электрод – алюминиевый стержень [2]. В качестве плазмообразующего газа использовали атмосферный воздух при давлении 0,3 и 0,5 Торр. Подводимую электрическую мощность *W* и длительность обработки варьировали в диапазоне соответственно: W = 24 - 200 Br и t = 1 - 20 мин. Эффективность обработки определяли по результатам анализа лабораторной всхожести и оценки фитосанитарного состояния семян в соответствии с методиками [1, 2].

Плазменная обработка длительностью 2,5 - 5 мин стимулировала процесс прорастания семян, что было особенно заметно для образцов, имевших пониженную всхожесть (яровая пшеница и кукуруза) (рис. 1). Увеличение времени воздействия (более 7 мин) и мощности разряда ($W \ge 100$ Вт) приводило к снижению всхожести из-за повреждения семенной оболочки в результате бомбардировки образующимися в плазме активными частицами.

Воздействие ВЧ плазмы оказывало также фунгицидное действие, в частности, подавляло наиболее опасные для исследуемых культур фитопатогены – грибы *Fusarium* spp. и *Alternaria* spp. (рис. 2). Инфицированность семян люпина узколистного грибами рода *Alternaria* снизилась в 40 раз по сравнению с контролем, а яровой пшеницы грибами рода *Fusarium* – на 100%. При оптимальных для каждой из культур рабочих режимах наибольшее фунгицидное действие оказывала обработка в течение 5 – 7 мин.



Рис. 1. Всхожесть семян тестируемых культур в результате обработки ВЧ плазмой в планарном (а) и цилиндрическом (б) реакторах в зависимости от подводимой мощности



а, б – общая; в, г – грибами рода *Fusarium* и *Alternaria* (яровая пшеница), д – грибами рода *Aspergillus Niger* (кукуруза) Рис. 2. Инфицированность семян после обработки ВЧ плазмой в планарном (а, в, г) и цилиндрическом (б, д) реакторах

При более длительном (20 мин) воздействии сопротивляемость семян инфекции снижалась из-за повреждения семенной оболочки.

Работа выполнена при поддержке ГКНТ РБ (проект № Ф11СРБ-015) и MES, Сербия (проекты ON171037 и III41011).

- Filatova I.I. Plasma for Bio-Decontamination, Medicine and Food Security/I.I.Filatova, V.V. Azharonok, A. Shik et al.//NATO Science for Peace and Security. Series A: Chemistry and Biology. – 2012. – P. 469.
- [2] Puač N. Low temperature plasma treatment of dry Empress-tree seeds /N. Puač, Z.Lj. Petrović, S. Živković et al.// Plasma Processes and Polymers.– Whiley: 2005. P. 193.

УДК 577.357.464.23

Т.Е.Зорина, И.В.Янковский, И.Е.Кравченко, В.П.Зорин

ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ И ФОТОСЕНСИБИЛИЗИРУЮЩАЯ АКТИВНОСТЬ ЛИПОСОМАЛЬНЫХ ФОРМ ЭТЕРИФИЦИРОВАННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ХЛОРИНА Е₆

Белорусский государственный университет, пр-т Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь,

zorinate@mail.ru

Использование наноразмерных систем (липидные везикулы, наночастицы, полимеры и др.) – один из наиболее распространенных способов введения нерастворимых в воде порфириновых фотосенсибилизаторов (ФС) при проведении фотодинамической терапии. Процессы биораспределения при этом существенно зависят как от свойств самого фотоактивного соединения, так и от структурных характеристик частиц-носителей.

Целью данной работы являлось исследование фотофизических характеристик и фотосенсибилизирующей активности липосомальных форм (ЛФ) хлоринов – комплексов униламеллярных липидных везикул из синтетичекого липида димиристоилфосфатидилхолина (ДМФХ) и неполярных производных хлорина е₆ (ПХл е₆) – диметилового эфира Хл е₆ (ДМЭ) и триметилового эфира Хл е₆ (ТМЭ).

Хлорин е₆ и его этерифицированные производные в мономерном состоянии спектрально-флуоресцентными свойствами. обладают близкими Модификация боковых заместителей значительно изменяет полярные свойства молекул хлоринов, что приводит к изменению ряда характеристик ФС: значения квантовых выходов флуоресценции и времени жизни флуоресценции в органических растворителях для Хл е₆ и его этерифицированных производных близки, однако, при переводе хлоринов в буферный раствор величина их квантового выхода флуоресценции снижается. Этот эффект, вероятно, связан с агрегацией молекул ФС в водной среде и особенно сильно проявляется для ДМЭ и ТМЭ, поскольку эти соединения более гидрофобны по сравнению с Хл е₆. Включение ПХл е₆ в липосомы позволяет сохранить мономерное полученным состояние ΦC. Согласно данным спектрально-флуоресцентные характеристики ДМЭ и ТМЭ в составе ЛФ, приготовленных экструзионным способом, практически не изменяются при увеличении степени нагрузки в диапазоне 1:1000 -1:20. В липосомах, окрашенных хлоринами, квантовый выход флуоресценции и время жизни флуоресценции близки к максимальному значению, характерному для растворов пигментов в органических растворителях. Батохромный сдвиг максимума спектра флуоресценции связан с изменением полярности окружения молекул ФС (таблица 1).

Основным агентом, инициирующим фотохимические реакции, сенсибилизируемые порфиринами в биосистемах, является синглетный кислород ¹O₂. Установлено, что значения квантовых выходов генерации ¹O₂ для Хл е₆ и его этерифицированных производных в мономерной форме одинаковы и составляют (0,5±0,1). Измерения скоростей фотосенсибилизированного окисления дифенилизобензофурана (ДФБФ) в суспензиях липидных везикул с различной

степенью нагрузки производными хлорина e₆ показали, что относительный выход синглетного кислорода практически не зависит от концентрации ФС в липосомах.

Таблица 1. Спектрально-флуоресцентные и фотофизические характеристики липосомальных форм этерифицированных производных хлорина е₆

ЛФ хлоринов,				*Относител	іьный квантові	ый выход
соотношение		Квантовый	Время жизни	генерации си	нглетного кис.	порода ¹ O ₂
ДМФХ:хлорин	$^{F}\lambda_{max}$, HM	выход	флуоресценции,	Отноше	ение хлорины/л	ипид
- 40:1		флуоресценции,	нс	1:25	1:100	1:200
		%				
Хл е ₆	672	16,3±1,0	5,2±0,03	0,89±0,04	0,94±0,03	1,0±0,02
ДМЭ	680	16,9±1,0	5,1±0,06	0,97±0,03	1,08±0,02	1,15±0,02
ТМЭ	680	17,1±1,0	5,2±0,02	1,01±0,02	1,13±0,03	1,21±0,03

* Скорость окисления ДФБФ в липосомах, окрашенных Хл е₆ в отношении пигмент:липид 1:200 принята за 1.

Установлено, что ЛФ исследованных хлоринов имеют высокую фотосенсибилизирующую активность в биологических системах. При малых дозах облучения (1,1 Дж/см²) при концентрации 2·10⁻⁶ М число погибших клеток лимфоидной линии Raji составляло для ЛФ ДМЭ и ТМЭ 80 % и 38 %, соответственно. Анализ результатов исследования накопления ФС в клетках свидетельствует, что различия в фототоксичности хлоринов связаны с зависимостью эффективности включения пигментов в клетки от их гидрофобности (полярности).

Таким образом, полученные результаты показывают, что липосомальные формы этерифицированных производных хлорина е₆ проявляют высокую фотодинамическую активность и могут быть успешно использованы в качестве фотосенсибилизаторов для фотодинамической терапии.

UDC 577.3

D. Shcharbin¹, V. Dzmitruk¹, A. Shakhbazau^{2,3}, E. Pedziwiatr-Werbicka⁴, B. Klajnert⁴, M. Bryszewska⁴

DENDRIMERS AND THEIR BIOMEDICAL APPLICATIONS

 ¹ Institute of Biophysics and Cell Engineering of NASB, Minsk, Belarus <u>d.shcharbin@ibp.org.by</u>
 ² Department of Clinical Neurosciences, Faculty of Medicine, University of Calgary, & ³ Hotchkiss Brain Institute, University of Calgary, Calgary, Canada <u>shakhbazau@gmail.com</u>
 ⁴ Department of General Biophysics, Faculty of Biology and Environmental Protection, University of Lodz, Lodz, Poland marbrys@biol.uni.lodz.pl

The rapid development of nanotechnology led to the appearance of the new perspective engineered nanomaterials for cancer imaging and gene and drug therapy including fullerenes, carbon nanotubes (CNT), nanoparticles of metals (magnete, plasmon), quantum dots and dendrimers. Nanotechnology will enable earlier detection and treatment of diseases that are best treated in their initial stages, such as cancer. Advances in nanotechnology will also spur the discovery of new methods for delivery of therapeutic compounds, including genes and proteins, to diseased tissue. A myriad of nanostructured drugs with effective site-targeting can be developed by combining a diverse selection of targeting, diagnostic, and therapeutic components. However, the simple analysis of publications in the field of main nanomaterials according to the SCOPUS database at December 05, 2012 allowed to find an interesting feature. If fullerenes, CNT, nanoparticles, quantum dots have more publications to compare with dendrimers, then the publications on application of dendrimers in biology and medicine have the predominant character in comparison with other nanomaterials: dendrimers in biology and medicine -38% of papers, nanoparticles -27%, fullerenes -12%, quantum dots - 10%, CNT - 8% (analysis was made by SCOPUS instruments). This difference is connected with the significantly higher biocompatibility of dendrimers in comparison with other nanomaterials [1]. Dendrimers are branching polymers whose structure is formed by monomeric subunit branches diverging to all sides from a central nucleus. The type of nucleus, attached monomers, and functional groups can be chosen during synthesis, which produces dendrimers of definite size, shape, density, polarity, branch mobility, and solubility. Because of their special and peculiar features, dendrimers have found their place in biology and medicine. Dendrimers as new synthetic vectors for gene therapy: dendrimers with positively charged groups are able to bind nucleic acid, and by analogy with lipoplexes and polyplexes, they are called dendriplexes. This class of polymers has structural advantages for gene transport. Dendrimers are monodisperse and stable, characterized by relatively low viscosity at high molecular mass and numerous end groups that can be ionized, which allows them to bind efficiently a large amount of genetic material [2-3]. Dendrimers have shown their efficacy and efficiency in the field of drug delivery. Using non-covalent or covalent conjugation with dendrimers, on can significantly improve the direct delivery of drugs, notably in direct delivery of anti-cancer drugs (adriamycin, doxorubicin, methotrexate, fluorouracil, and cisplatin. Of importance and significance is the conjugation of dendrimers

with folate receptors, resulting in the increase of recognition of such conjugates by folic receptors of cancer cells. Using dendrimers as solubility enhancers, this significantly improves the delivery of hydrophobic drugs such as propranolol, naproxen, indomethacin, niclosamide, furosemide, ketoprofen, pilocarpine, tropicamide [2-3]. Dendrimers have their own potentially therapeutic activity against prion diseases. Cationic dendrimers seem to accumulate together with PrPSc molecules in lysosomes, where the acidic environment facilitates dendrimer-mediated PrP^{Sc} disaggregation. Superfect, PPI dendrimers, phosphorus dendrimers have all made it possible to remove Pr^{Sc} from cells [2-3]. Dendrimers may also be potential agents for the treatment of other neurodegenerative disorders including Alzheimer's disease since there is a similarity between these two pathologies. Alzheimer's disease is associated with the formation of amyloid aggregates. Klajnert et al. (2006a) compared the aggregation properties of the Alzheimer's peptide AB 1-28 with PrP 185-208, and how they were influenced by a third generation of PAMAM dendrimer. Later different generations of PAMAM dendrimers, PPI and phosphorus dendrimers were successfully used to disaggregate amyloid fibrils under different conditions [2-3]. Dendrimers have very good perspectives as antibacterial agents. The antibacterial activity of dendrimers is due to their ability to bind and disrupt anionic bacterial membranes, resulting in lysis of bacteria such as Staphylococcus aureus, Pseudomonas aeruginosa, and Escherichia coli [2-3]. Dendrimers as antiviral agents: polysulfonate) dendrimers inhibit polyanionic (i.e. the replication of human immunodeficiency virus (HIV) by interfering with both virus adsorption and some later steps (reverse transcriptase/integrase) in the replicative cycle. Based on dendrimers, Starfarma put forward the commercial product - VivaGel®, which protects against sexually transmitted diseases and also HIV [2-3]. Also, dendrimers can serve as effective detoxication agents. immunostimulating components (adjuvants), antioxidants, mimetics of enzymes, et cetera.

Thus, dendrimers are nanomaterials of the future. Despite a variety of potential applications, there is at present only one product based on dendrimers on the market. This product, VivaGel® (Starpharma, Australia), protects again sexually transmitted diseases and HIV. To speed up translational studies and improve the pace of developing new drugs based on dendrimers, systematic studies on dendrimers are needed.

This work was supported by the grant from the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research, by the project Iuventus Plus (nr IP2011 041071) and project DEC-2012/04/M/NZ1/00059 from the National Research Centre of Poland.

- [1] Kunzmann A. Toxicology of engineered nanomaterials: focus on biocompatibility, biodistribution and biodegradation. / Kunzmann A., Andersson B., Thurnherr T., Krug H., Scheynius A., Fadeel B. // BBA. – 2011. – Vol. 1810. – P. 361-373.
- [2] Shcharbin D. Practical Guide to Studying Dendrimers. / Shcharbin D., Klajnert B., Bryszewska M. – Shawbury, Shrewsbury, Shropshire (UK): iSmithers Rapra Publishing. – 2010. – 120 p.
- [3] Shcharbin D. Dendrimers in biology and medicine. / Shcharbin D., Dzmitruk V., Halets I., Pedziwiatr-Werbicka E., Bryszewska M. // Nanomedicine and Drug Delivery: book. – Ed. by M. Sebastian, N. Ninan, A.K. Haghi. – Toronto, New Jersey (USA): Apple Academic Press. – 2012. – Ch. 10. – P. 126-139.

Физика и общество: информатика, экология и образование

УДК 539.6

А. В. Сидоренко

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТЕПЕНИ ХАОТИЧНОСТИ ВЫХОДНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ АЛГОРИТМА ШИФРОВАНИЯ НА ОСНОВЕ ДИНАМИЧЕСКОГО ХАОСА

Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь SidorenkoA@yandex.ru

На современном уровне развития информационных технологий существенное значение приобретают вопросы защиты информации в телекоммуникационных системах различного назначения. Развивается направление, связанное с шифрованием информации в хаотических системах. Использование динамического хаоса для систем защиты информации обусловлено способностью хаотических отображений обеспечивать скрытость передачи зашифрованной информации в блочных или поточных шифрах. Детерминизм хаоса способствует шифрованию информации, а его случайность делают систему стойкой к вскрытию. Такие свойства как спутанность и распыление, характерные для традиционных криптоалгоритмов, в хаотических реализуются с помощью хаотических отображений и последующих итераций.

При рассмотрении основанных на динамическом хаосе алгоритмов шифрования существенным является обеспечение хаотического режима динамической системы. В данной работе предлагаются и рассматриваются два варианта определения хаотичности выходных последовательностей зашифрованной информации [1, 2]. Первый из них основан на подходе нелинейной динамики, позволяющем определять параметры динамической системы и их изменений в процессе шифрования. Второй вариант, обусловленный наличием в исследуемых последовательностях детерминированной составляющей, дает возможность использовать подход на базе сингулярного спектрального анализа с определением динамики интенсивности главных компонент.

первого подхода При реализации для определения хаотичности последовательностей в процессе функционирования алгоритма шифрования предлагается использовать построение фазовых диаграмм и метод задержанной координаты. Построение фазовых диаграмм дает возможность визуально определять заполнение фазового пространства. При использовании метода задержанной координаты определяются параметры: корреляционная размерность и энтропия Колмогорова. При реализации второго подхода, использующего метод сингулярного спектрального анализа, определяется уровень интенсивности главных компонент исследуемых последовательностей открытого и зашифрованного текстов. Для получения визуальной информации используется построение диаграмм, когда по осям координат откладываются различные пары собственных векторов или главных компонент анализируемой последовательности.

В процессе проведения исследований в качестве объекта использовались открытый текст и выходные последовательности алгоритма шифрования. Режимы работы алгоритма – алгоритмы на основе динамического хаоса по структуре СВС и

OFB, схема алгоритма – сеть Фейстеля, отображение – пилообразное, число итераций изменялось от 1 до 1024. Для сравнения приводятся результаты, полученные при использовании такого же открытого текста для алгоритмов шифрования DES (Data Encryption Standard) и AES (Advanced Encryption Standard).

Экспериментально полученные при использовании первого подхода для определения хаотичности параметры представлены в виде фазовых диаграмм и графиков. Из визуального анализа фазовых диаграмм выявлены отличия для открытого текста и зашифрованных выходных последовательностей. При анализе зашифрованных последовательностей, полученных в результате использования как стандартных алгоритмов щифрования AES и DES, так и алгоритма на основе динамического хаоса, отличия в фазовых диаграммах практически отсутствуют. Что касается параметров метода задержанной координаты, то в приведенных графиках зависимости корреляционной размерности и энтропии Колмогорова от числа итераций для зашифрованных последовательностей по структурам CBC и OFB наблюдаются значения, превышающие значения для открытого текста. Для алгоритма на основе хаоса по структуре CBC, в частности, значения корреляционной размерности составляют от 4,0 % до 4,6 %. Значения же энтропии Колмогорова для открытого текста превышают таковые для выходных последовательностей на 20,0 –21,8 %.

При использовании второго подхода для определения хаотичности при построении диаграмм показано также существенное отличие параметров открытого текста и зашифрованных последовательностей. Так, диаграммы, построенные по выходным последовательностям алгоритма шифрования на основе динамического хаоса по структуре СВС, отличает "зашумленность " фигур, характер которых похож на диаграммы, построенные для шифров DES и AES. Рассчитанные значения интенсивности главных компонент показывают различные значения для последовательностей открытого текста и выходных зашифрованных алгоритмом на основе динамического хаоса последовательностей, что, например, при использовании алгоритма по структуре СВС составляет: 0.3623 и 0.2147, соответственно.

Таким образом, в результате проведенных исследований установлено, что для определения хаотичности выходных последовательностей могут быть использованы методы задержанной координаты и сингулярного спектрального анализа. Эти методы позволяют по фазовым диаграммам, корреляционной размерности, энтропии Колмогорова, а также диаграммам второго из названных методов, установить критерии хаотичности выходных последовательностей для алгоритмов шифрования на основе динамического хаоса.

- [1] Сидоренко А. В., Мулярчик К. С. Шифрование данных на основе дискретных хаотических систем и отображений / А. В. Сидоренко, К. С. Мулярчик // Доклады БГУИР. 2013. № 1. С. 62-67.
- [2] Сидоренко А. В., Шакинко И. В., Мулярчик К. С. О преобразовании методом сингулярного спектрального анализа зашифрованных на основе динамического хаоса последовательностей / А. В. Сидоренко, И. В. Шакинко, К. С. Мулярчик // Вестник БГУ. Сер.1 Физика, математика, информатика. – 2012. – № 4. – С. 44-50.

УДК 535.45; 535.785

В.В.Митянок, Н.В.Коновалова

ФАЗОВЫЙ АНАЛИЗ НЕКОТОРЫХ ЗВУКОВ ЧЕЛОВЕЧЕСКОЙ РЕЧИ

Полесский государственный университет, ул. Днепровской флотилии, 23, 225710, Пинск, Беларусь mitsianok@mail.ru

В [1-2] предложен метод аппроксимации для разложения сигнала любого происходения, представляющего собой сумму почти гармонических слагаемых с медленно меняющимися параметрами (дрейфующими амплитудами, частотами, фазами) на исходные составляющие. Там же этот метод применен к анализу отдельных звуков человеческой речи.

При проведении разложения используется набор частот, так называемая "ловящая сеть", по которым производится разложение. Эти частоты, могут быть какими угодно, необязательно кратными базовой (низшей) частоте. Однако изучение формы кривых звукового давления многих звуков, например А, О У, Э, Ы и некоторых других, показывает, что реальный речевой сигнал во многих случаях является почти периоди-ческим, так что оправдан выбор такой ловящей сети, в которой частоты пропорцио-нальны низшей. Такую сеть естественно назвать пропорциональной. Вместе с тем, параметры *реальных* звуков – амплитуды, частоты, фазы испытывают некоторые дро-жания, отклонения от постоянных значений. Это, в свою очередь, означает, что само понятие периода уже не является строго определенным. Поэтому следует быть гото-вым к тому, что речевой сигнал и ловящая сеть имеют различные базовые частоты. К каким последствиям это может привести?

Рассмотрим идеальный гармонический сигнал, имеющий амплитуду *A*, фазу φ , и частоту ω , и пусть ловящая сеть состоит из единственной частоты, имеющей значение $\omega_1 \neq \omega$. Проведем очевидные преобразования

 $A\sin(\omega t + \varphi) = A\sin(\omega_1 t + \varphi + \Delta\omega t) = A\cos(\Delta\omega t)\sin(\omega_1 t + \varphi) + A\sin(\Delta\omega t)\cos(\omega_1 t + \varphi)$ (1)

где $\Delta \omega = \omega - \omega_1$. Как видно, метод аппроксимации должен дать для дрейфующих амплитуд периодические функции с частотами, равными разности частот изучаемого сигнала и ловящей сети.

Как показали численные эксперименты, проведенные авторами с модельными сигналами, представляющими собой сумму нескольких синусоидальных функций с различными постоянными параметрами, и в самом деле, в случае небольшого несовпадения базовых частот сигнала и пропорциональной ловящей сети, найденные дрейфующие синус- и косинус- амплитуды сигнала представляют собой периодические функции, имеющие определенный период и частоту. Всякий раз полученная методом аппроксимации частота дрейфующей амплитуды оказывалась равной разности частоты изучаемой моды и соответствующей ей по номеру частоты ловящей сети. Это означает, что можно, изучив поведение дрейфующих амплитуд, выйти на верное значение базовой частоты изучаемого сигнала, внести коррективы в используемую ловящую сеть, вновь провести процедуру аппроксимации и теперь уже найти также и верные амплитуды и фазы.

Это верно в том случае, когда модули разностей всех частот ловящей сети и соответствующих им по номеру частот мод изучаемого сигнала не превосходят половины каждой из базовых частот. В противном случае факт периодичности различных дрейфующих амплитуд сохраняется, но скачком может измениться их период (и частота).

Как хорошо известно, звуки речи человека представляют собой сумму мод с различными частотами, амплитудами, фазами. Среди специалистов, занимающихся проблемой автоматического распознавания речи, распространено мнение о том, что слуховой аппарат человека не воспринимает фазу звукового сигнала. Это, разумеется, не означает, что в произносимых звуках нет никаких закономерностей, связанных с фазами отдельных мод. В связи с этим выдвинем предположение, что такие закономерности могут существовать. В первую очередь это должно касаться комбинаций (критериев) вида

$$Z = \sum_{i} \varphi_{i} - \sum_{k} \varphi_{k}, \text{ если только } \sum_{i} \sum_{k} k.$$
(2)

Здесь і и k – номера мод звукового сигнала. Примерами критериев Z являются критерии $Z = 2\varphi_1 - \varphi_2$, $Z = \varphi_1 - 2\varphi_2 + \varphi_3$, $Z = \varphi_2 + \varphi_3 - \varphi_5$, $Z = \varphi_1 - \varphi_2 - \varphi_3 + \varphi_4$ и другие. Фазы, составляющие критерии, могут входить в них неоднократно. Выбор критериев в виде (2) обоснован тем, что они обладают двумя видами устойчивости. Во-первых, эти критерии не зависят от выбора начала отсчета времени, и, во- вторых, они не зависят от небольших погрешностей выбора базовой частоты ловящей сети (см. выше). Изучение образцов гласных звуков, полученных от 11 респондентов показало, что в большинстве случаев наблюдаемые значения критериев ложатся на диаграмме "базовый периодзначение критерия" "кучно", часто среднеквадратическое отклонение опускается ниже 0.3, а иногда достигает 0.15 (Для сравнения – случайная величина, равномерно распределенная на интервале $[0,2\pi]$ имеет среднеквадратическое отклонение ≈ 1.81). Причем группировки точек, соответствующих одному и тому же звуку, но полученного от различных респондентов, находятся на диаграмме "базовый периодзначение критерия" в разных местах.

Таким образом, открывается перспектива разработки компьютерной программы, позволяющей производить идентификацию человека по его голосу.

- [1] Митянок В В О числовых характеристиках некоторых низкочастотных звуков человеческой речи. / В.В.Митянок // Электронный журнал технической акустики www.ejta.org 2008. N.15
- [2] Митянок В В Определение числовых характеристик высокочастотных звуков речи на основе аппроксимации гармоническими функциями / В.В.Митянок // Известия НАН Беларуси, Сер.ф.-м.н. 2009. N2. С. 111.

УДК 002.6+004.4:0047

И.А. Малевич¹, А.В. Поляков¹, С.И. Чубаров²

АРХИТЕКТУРА ОПТОЭЛЕКТРОННОГО ВЫЧИСЛИТЕЛЯ С ПАРАЛЛЕЛЬНОЙ АНАЛОГОВОЙ И ЦИФРОВОЙ ОБРАБОТКОЙ ИНФОРМАЦИИ

¹ Белорусский государственный университет, пр. Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь

polyakov@bsu.by

² Белорусский государственный педагогический университет им.М. Танка, ул. Советская, 18, 220030 Минск, Беларусь chubarov@bsu.by

Оптические вычислительные комплексы привлекли широкое внимание исследователей в связи с необходимостью записи и обработки больших массивов оптической информации в целом ряде фундаментальных направлений современной науки, включая задачи освоения космоса и мирового океана. Обработка информации в оптическом вычислителе может осуществляться как в процессе переноса оптического информационного поля через оптическую вычислительную среду, так и путем осуществления преобразований в оптоэлектронных элементах. Проведенные до настоящего времени исследования и разработки заложили физические основы анализа быстропротекающих оптических процессов наносекундного и субнаносекундного диапазонов в реальном масштабе времени.

В данной работе рассматривается структура оптоэлектроенного процессора активного типа (ОЭП), основанная на методе регенеративного хранения и записи оптической информации в лазерном многостабильном элементе памяти с волоконнооптической линией запаздывания. В простейшем случае лазерный многостабильный элемент памяти с регенеративным принципом хранения информации представляет собой оптическую колебательную систему, восприимчивую к информационному потоку с различными типами носителей, которые в процессе управляемого оптического хранения могут подвергаться преобразованию по заданной программе вычислений. При обеспечении возвратного отношения больше 1, в данном оптическом элементе памяти устанавливается стационарный режим, позволяющий реализовать полный цикл записи, хранения и считывания информации. Достоинством ОЭП регенеративного типа является возможность записи и хранения информации как в цифровом, так и в аналоговом виде. При этом скорость записи информации зависит от времени срабатывания инжекционного лазера и может варьироваться от наносекундного до пикосекундного масштаба длительности. Если необходимо в память ОЭП записать цифровую информацию в виде линейного кода, или В виде случайной последовательности световых импульсов возможно, используя синтезатор оптических сформировать цифровую информацию в виде дискретно частот, заданной последовательности моментов срабатывания инжекционного лазера и, таким образом, осуществляется программирование оптоэлектронного процессора. При необходимости записи в ОЭП аналоговой информации, например, в виде временных интервалов между импульсами, в контуре памяти оптоэлектронного оптическими процессора формируются временные шкалы, размерность которых соответствует информационным признакам аналоговых сигналов.

Основным способом повышения пропускной способности оптоволоконных информационных каналов является технология плотного спектрального (частотного) мультиплексирования (уплотнения) каналов с разделением по длинам волн, получившей название DWDM-технологии (dense wavelength division multiplexing). Экономичность DWDM-систем с большой суммарной скоростью передачи данных в значительной степени зависит от эффективности использования рабочего спектра для передачи информации, от увеличения так называемой спектральной эффективности. Нами разработана архитектура волоконно-оптического динамического запоминающего устройства (ВОДЗУ) со спектральным уплотнением информационных каналов, которая может использоваться как быстродействующая буферная память. Данная структура обладает следующими отличительными особенностями. Комбинация стандартного одномодового волокна и волокна с отрицательной дисперсией позволила увеличить время хранения информации при заданной вероятности ошибки более чем на порядок. Использование в качестве линейного усилителя непосредственно в оптоволоконной петле рециркуляции и усилителя мощности двух волоконно-оптических эрбиевых усилителей исключает применение электронных усилителей на выходе каждого фотоприемника и обеспечивает регенерацию циркулирующих информационных сигналов непосредственно в оптическом диапазоне. что позволяет работать с гигагерцовыми скоростями записи информационного оптического потока.

Внедрение технологии спектрального уплотнения WDM/DWDM, которая ведет к значительному возрастанию вводимой в волоконный световод мощности излучения, а также повышение скорости передачи до 10 Гбит/с и выше требует учета нелинейных эффектов в ВС при исследовании волоконно-оптических информационных систем. Фазовая автомодуляция (ФА) возникает вследствие того, что показатель преломления волокна содержит нелинейно-зависимую от интенсивности компоненту, которая вызывает смещение фазы, пропорциональное интенсивности импульса. По этой причине различные составляющие импульса претерпевают различные фазовые смещения, обуславливая изменение линейной частотной модуляции (ЛЧМ) импульсов вне зависимости от их формы. Изменение ЛЧМ импульсов в свою очередь приводит к увеличению их длительности из-за дисперсии. Таким образом, ФА модифицирует влияние дисперсии на расширение импульса. Так как этот эффект изменения ЛЧМ пропорционален мощности передаваемого сигнала, ФА более ощутим в системах, использующих высокие мощности передачи. Поэтому вызванные ФА изменение ЛЧМ оказывает влияние на расширение импульса вследствие дисперсии и в связи с этим должно учитываться в системах с высокими битовыми скоростями, которые уже обладают значительными ограничениями из-за дисперсии. Показано, что под влиянием фазовой автомодуляции, связанной с зависимостью показателя преломления волокна от оптической мощности, в процессе рециркуляции длительность информационных импульсов сначала уменьшается, а затем увеличивается. Данный эффект усиливается с возрастанием передаваемой мощности (т.е. увеличением числа информационных каналов) и оказывает существенное влияние на информационные параметры оптоволоконной памяти.

УДК 551.510.534;543.422

В.И. Покаташкин, А.М. Людчик

ВЛИЯНИЕ АНТРОПОГЕННЫХ ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ ВОЗДУХА НА КОНЦЕНТРАЦИЮ ОЗОНА В Г. МИНСКЕ

Национальный научно-исследовательский центр мониторинга озоносферы Белгосуниверситета,(ННИЦ МО БГУ), 220045, Минск, Беларусь <u>nomrec@bsu.by</u>

Озон у поверхности Земли является загрязняющим веществом, поскольку отрицательно влияет на здоровье человека и животных, оказывает угнетающее воздействие на леса и сельскохозяйственные культуры. В результате человеческой деятельности происходит увеличение концентрации приземного озона. Особенно это заметно в Северном полушарии. Концентрация озона в крупных городах в условиях сильно загрязненной атмосферы может достигать уровня, в десятки раз превышающего естественный и достаточного для ощутимого воздействия на живые организмы.

Данные измерений на озонометрической станции ННИЦ МО за период 2004-2012 гг. убедительно показывают актуальность мониторинга приземного озона в Беларуси, так как в весенне-летний период довольно часто фиксируются концентрации озона, значительно превышающие допустимые. В настоящее время в г. Минске действуют еще 4 пункта наблюдений Департамента по гидрометеорологии, ведущие измерения концентраций озона, оксидов углерода и азота, диоксида серы, летучих органических соединений (бензола, толуола, ксилола) и аэрозольных частиц.

Являясь сильнейшим окислителем, озон вступает в реакции со многими загрязнителями атмосферы, теряясь в таких реакциях и приводя к образованию вторичных загрязнителей. С другой стороны, в сильно загрязненном воздухе при определенных условиях возможна генерация озона у поверхности Земли и возникновение фотохимического смога. Данные параллельных измерений озона и других антропогенных загрязнителей в различных районах г. Минска позволяют оценить характер их взаимодействия. Косвенно о результатах такого взаимодействия можно судить по коэффициентам корреляции наблюдаемых концентраций газов.

Результаты мониторинга озона и основных антропогенных загрязнителей показывают, что в подавляющем большинстве случаев повышение уровня загрязнения атмосферы в г. Минске приводит к уменьшению концентрации приземного озона. Рассчитанные коэффициенты корреляции концентрации озона с концентрациями оксидов азота, оксида углерода и летучих органических соединений отрицательны. При этом концентрации названных загрязнителей хорошо коррелируют друг с другом, что указывает на, возможно, общие источники их выбросов. Определяющее влияние на приземный озон оказывает загрязнение воздуха оксидами азота. Хотя другие загрязнители также снижают концентрацию озона, наблюдаемые их концентрации явно недостаточны, чтобы существенно повлиять на приземный озон в Беларуси.

Доводом в пользу определяющей роли оксидов азота в снижении концентрации приземного озона служат также результаты сравнения наблюдений в разных районах г.

Минска. Максимальные среднесуточные концентрации озона чаще всего наблюдаются на пункте Департамента по гидрометеорологии № 1 (Обсерватория), где также регистрируются и минимальные среднесуточные концентрации оксидов азота (рис. 1). Результаты измерений показывают, что эта ситуация характерна как для летних месяцев, так и для зимнего периода.

Многолетние наблюдения на станции ННИЦ МО демонстрируют устойчивый отрицательный тренд концентрации приземного озона, составляющий около -1 ppbv в год. С учетом постоянно растущего уровня загрязнения воздуха в городе такое поведение озона подтверждает вывод о подавляющем действии на озон оксидов азота. Условия для фотохимической генерации озона с участием его прекурсоров (оксидов азота и летучих органических соединений) не возникали, поскольку случаев фотохимического смога в городе зарегистрировано не было.



Рис. 1. Максимальные среднесуточные концентрации озона фиксируются в районе, где концентрация оксидов азота минимальна.

УДК 535.3; 543.423.1

А.А. Минько¹, М.П. Патапович¹, П.Н. Белый², М.В. Кудин², А.П. Зажогин¹

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ СЕЗОННОСТИ НА ЭКОЛОГИЮ ЦЕНТРА МИНСКА НА ПРИМЕРЕ ПОСЛОЙНОГО АНАЛИЗА ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА КОРЫ ЕЛИ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ ИСКРОВОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ

¹Белорусский государственный университет, пр-т Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь ²ГНУ «Центральный ботанический сад Национальной академии наук, ул. Сурганова, 2, 220012 Минск, Беларусь

Загрязнение окружающей среды играет все возрастающую роль среди других антропогенных воздействий в связи с увеличивающимися объемами загрязняющих веществ, поступающих в природную среду. В связи с этим возникает необходимость слежения за состоянием биоты, находяшейся под постоянным влиянием локального и трансграничного переноса поллютантов. Важно выяснить закономерности устойчивого развития экосистем с целью обеспечения научных основ сбережения природных комплексов и устойчивого их использования. За последние десятилетия в Беларуси проделана значительная работа по изучению уровня загрязнения и миграции в природной среде токсичных металлов и серосодержащих соединений методом фитоиндикации [1, 2]. Из всех видов негативного антропогенного воздействия на лесные экосистемы наибольшую опасность представляет атмосферное загрязнение. В этом плане особую важность приобретает изучение миграционных циклов химических веществ в структурных частях лесных фитоценозов, испытывающих антропогенные нагрузки [1-3]. В городах для биоиндикации чаще всего используются кора и эпифитные лишайники, растущие на коре деревьев. Кора – защитный покров ствола и веток деревьев, состоящий из внешнего пробкового и внутреннего лубкового слоев. Это своеобразная кожа дерева, предохраняющая его от воздействия внешней среды, а также участвующая в регуляции дыхания.

Целью исследования является изучение влияния сезонности на относительное содержание ряда металлов в поверхностных слоях коры еловых древостоев минского промышленного узла. В качестве объектов исследования были выбраны образцы ели обыкновенной (picea abies), растущие в центре Минска (МпН4), а для сравнения — из Березинского биосферного заповедника (ББЗ). Образцы коры отбирали в летний (июль 2012 г) и зимний (февраль 2013 г) период с приствольной верхней части нижних веток деревьев. Требованиям оперативного химико-аналитического контроля объектов растительного и животного происхождения на содержание различных металлов наилучшим образом удовлетворяет лазерный атомно-эмиссионный многоканальный спектральный анализ, отличающийся многоэлементностью, сравнительной простотой подготовки образцов и довольно низкими пределами обнаружения. Для проведения атомно-эмиссионный многоканальный исследований использовался лазерный спектрометр LSS-1. Предварительно были отобраны участки коры ели с преимущественно ровной поверхностью размером 10x10 мм², которые наклеивались с помощью двустороннего скотча на поверхность держателя образцов (пластинка из оргстекла), а затем на 15 минут помещались под груз, для наиболее равномерного распределения образца по поверхности пластинки. Анализировались послойные результаты, полученные при воздействии серий последовательных импульсов (энергия 60 мДж, межимпульсный интервал 10 мкс) на несколько точек образцов коры. Интенсивности линий Ті, Fe и Al в последовательных 10 слоях коры ели образцов МпН4 (1 – улица, 2 – внутренний дворик, зимний период) и ББЗ (3, летний период) приведены на рис. 1.



Рис. 1. Зависимость интенсивности линий Ті, Fe и Al в последовательных слоях образцов коры ели.

Из анализа экспериментальных результатов видно, что наблюдается явный дисбаланс в питании елей, растущих как в различных по экологической обстановке местностях, так и в различные временные сроки. Найдено, что для Минска наблюдается увеличение количества Fe, Ti, Al и Mg в верхних слоях коры в 3-4 раза по сравнению с образцами из ББЗ, начиная с сезона борьбы с гололедом. В нашем суровом и снежном климате на тротуары и трассы высыпают большое количество хлоридов натрия и кальция (вплоть до 10-15 кг на м²). Мчащиеся автомобили, создавая турбулентные потоки воздуха, разносят соли на ветки и кроны деревьев. Следует особо отметить, что процесс накопления макроэлементов Са, Na с наступлением лета увеличивается, что свидетельствует об усилении процессов поступления их с тротуаров. Одновременно с возрастанием указанных элементов в верхних слоях образца МпН4 появляются и другие металлы (Си и др.). Также отчетливо видно, что без непосредственного контакта с улицей (образец 2) уровень тяжелых металлов заметно ниже, но все же больше чем в чистом лесном массиве ББЗ (образец 3). Для оценки состава соли, используемой при посыпке тротуаров и улиц методом ЛАЭМС изучено относительное содержание Al, Fe, Mg, Ті в образцах соли. Для анализа были отобраны крупные кристаллы, различающиеся по цвету: 1-серый, 2 – темно-коричневый, 3-белый, 4-желтый, 5-светложелтый. Установлено, что основное загрязнение дают два вида кристаллов – серый и темно-коричневый. Использование метода ЛАЭМС и малые трудозатраты на пробоподготовку образцов позволяет анализировать большее количество проб, что дает возможность проводить слежения за состоянием биоты под влиянием локального и трансграничного переноса поллютантов, выяснить закономерности устойчивого развития экосистем с целью обеспечения научных основ сбережения природных комплексов и их устойчивого использования.

- [1] Бусько Е.Г., Сидорович Е.А., Рупасова Ж.А. Техногенное загрязнение лесных экосистем Беларуси. Мн. 1995. .
- [2] Сидорович Е.А., Рупасова Ж.А., Бусько Е.Г. Влияние промышленных эмиссий на химический состав древостоев хвойных фитоценозов // Доклады АН БССР. 1985. Т. XXIX. № 3. 271.
- [3] Бязров Л.Г. Лишайники в экологическом мониторинге. М. 2002

УДК 535.3; 543.423.1; 630.813/812 А.А. Минько¹, М.П. Патапович¹, П.Н. Белый², М.В. Кудин², А.П. Зажогин¹

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕСОВ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ПОВЕРХНОСТИ СВЕЖИХ ОВОЩЕЙ ПРИ ОБРАБОТКЕ ИХ СОЕДИНЕНИЯМИ МЕДИ МЕТОДОМ ЛАЗЕРНОЙ АТОМНО-ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ

¹Белорусский государственный университет, пр-т Независимости, 4, 220030 Минск, Беларусь ²ГНУ «Центральный ботанический сад Национальной академии наук», ул. Сурганова, 2, 220012 Минск, Беларусь <u>Masha_P@tut.by, zajogin_an@mail.ru</u>

Все возрастающее техногенное загрязнение окружающей среды требует разработки быстрых и надежных методов анализов, которые обеспечивали бы контроль элементного состава пищевых продуктов и вместе с тем могли бы ограничить проникновение элементов-токсикантов в организм человека. Для определения элементов-токсикантов в пищевых продуктах в настоящее время используют весь спектр физических и физико-химических методов анализа. Широко применяемым в настоящее время методам контроля - химическому и атомно-абсорбционному анализу свойственен ряд недостатков, таких как трудоемкость и недостаточно высокая оперативность. Поэтому трудоемкие классические методы химической деструкции и минерализации при подготовке проб к анализу целесообразно заменять более производительными прямыми инструментальными методами, одновременно совмещающими в себе, как процесс пробоподготовки, так и анализа минерального состава проб [1-4].

Большинство металлов обладает высокой биологической активностью, поэтому вопросы профилактики неблагоприятного воздействия их на здоровье людей требует знания как степени токсичности и характера вызываемых нарушений в здоровье, так и контроля гигиенических норм содержания металлов в объектах внешней среды.

Одним наиболее перспективных направлений развития ИЗ лазерной спектроскопии является использование в качестве источника возбуждения спектров сдвоенных лазерных импульсов. При использовании двухимпульсного лазера для анализа растительных образцов процессы пробоподготовки и анализа объединены в едином цикле. Поглощение сфокусированного излучения образцом дозированной энергии первого импульса сопровождается локальным нагревом поверхности до температуры деструкции и частичным разрушением органической основы. При приходе с задержкой второго импульса происходит продвижение фронта деструкции вглубь образца со скоростью, зависящей от плотности облучения и потерь энергии, расширения зоны поражения за счет релаксационных процессов внутрь образца, поглощения излучения газообразными продуктами деструкции в канале пробоя и возбуждения газообразных продуктов.

Целью настоящей работы является разработка методов экспресс-анализа содержания меди в растительных пищевых продуктах (свежих образцах огурцов и

томатов). Выбор указанных объектов основывался на том, что при их выращивании применяется довольно большое количество удобрений и средств борьбы с болезнями с использованием препаратов на основе соединений меди.

Для проведения исследований использовался лазерный многоканальный атомноэмиссионный спектрометр LSS-1. Образцы подготовлены следующим образом. На поверхность томата в области плодоножки (образец a) и рядом с плодоножкой (образец δ), где наблюдается наибольшее скопление препарата при опрыскивании, наносили каплю (2 мкл) раствора хлорокиси меди (концентрация меди 0,1%, близкая к используемой на практике). Затем капля высушивалась при естественном испарении. На рис. 1а приведены интенсивности линии меди в спектрах образцов томатов (образец a) при продвижении вглубь, а на рис. 16 – относительные изменения интенсивности для 7 последовательных слоев образцов a и δ . Следует отметить, что среднее содержание и ПДК для меди в овощных продуктах на несколько порядков меньше.



Рис. 1. Интенсивности линии меди Си I (324,754 нм) в послойных спектрах образцов томата.

Проведенные эксперименты показали, что определенное количество меди за время высыхая капли (примерно 1 час) после нанесения диффундирует через поверхность томата вглубь.

Выполненные спектроскопические исследования приповерхностной лазерной плазмы, образуемой вблизи поверхности пористого тела, при воздействии на нее двух последовательных импульсов показали возможность определения с хорошей чувствительностью содержания элементов, как на поверхности, так и в объеме свежих овощей и фруктов. Это может иметь значение для развития методов лазерной атомноэмиссионной спектрометрии биологических объектов и пищевых продуктов.

[1] Методы анализа пищевых, сельскохозяйственных продуктов и медицинских препаратов./Под ред. В. Гортвица. - М.: Пищевая промышленность. 1974, - 743 с.

- [2] Химический состав пищевых продуктов. Справочник. /Под ред. И.М. Скурихина и М.Н. Волгарёва. - М. Агропромиздат. 1982, - 359 с.
- [3] Методы анализа пищевых продуктов. М.: Наука, 1988. Т. 8. 270 с.
- [4] Зинченко В.А. Химическая защита растений: средства, технология и экологическая безопасность. М.: КолосС, 2005, 232 с

УДК 53:004

А. С. Лобко¹, С. Н. Сытова², С.В.Черепица³

УЧЕБНО-НАУЧНЫЙ ПОРТАЛ ЯДЕРНЫХ ЗНАНИЙ

Институт ядерных проблем Белгосуниверситета, ул. Бобруйская, 11, 220030, Минск, Беларусь ¹lobko@inp.bsu.by, ²sytova@inp.bsu.by, ³chere@inp.bsu.by

Формирование в Беларуси атомной отрасли требует подготовки специалистов в области ядерной и реакторной физики, использования ионизирующих излучений и т.д. В связи с этим актуальным является создание в стране портала управления ядерными знаниями. Основные задачи портала – целенаправленно управлять информационными ресурсами, знаниями и компетенциями ядерной отрасли страны, сохранять, поддерживать и развивать эти знания на уровне, который обеспечивает безопасное, устойчивое и эффективное развитие ядерной энергетики и промышленности страны. Создание полноценного портала управления ядерными знаниями – процесс многоступенчатый и многостадийный. Он должен разрабатываться на базе опыта и с методической поддержкой МАГАТЭ.

В качестве первого шага необходимо и возможно создание учебно-научного портала ядерных знаний и дистанционного обучения. Основными задачами такого портала будут ускорение поиска и доступа к необходимым данным и информации, создание новых знаний и содействие участию в научно-исследовательских, образовательных и учебных программах в области ядерной индустрии. Портал – это система, объединяющая все имеющиеся в стране и открыто доступные за рубежом информационные ресурсы (приложения, базы данных, аналитические системы и др.), которая позволит создателям и потребителям знаний взаимодействовать друг с другом; предоставит им единый защищенный доступ к информации и виртуальные каналы для коммуникаций – например, для совместной работы над документами из географически разнесенных мест; обеспечит доступ пользователей ко всем информационным ресурсам портала через единый web-интерфейс в режиме коллективной работы со строгой персонализацией (права доступа к тем или иным ресурсам: данным, сервисам, приложениям, документам). Важные подсистемы портала:

1) интерфейс, предоставляющий механизм взаимодействия между приложениями портала и пользователями, обеспечивает координацию действий между рабочими группами и отдельными лицами;

2) система электронного документооборота для обеспечения подготовки документа с необходимым уровнем качества с соблюдением правил и стандартов разработки и сопровождения документов, контролем качества, средствами интеллектуального поиска, категоризации информации;

3) система управления проектами, включая планирование проекта, установление задач проекта, контроль графика реализации проекта и использования ресурсов, планирование и распределение человеческих и финансовых ресурсов; 4) электронная библиотека, состоящая из различных электронных материалов, включая отчеты, техническую документацию, производственные, нормативные документы, учебные материалы;

5) система управления учебными материалами и курсами с системой дистанционного обучения студентов и возможностью создания и совершенствования курсов обучения;

6) форумы по основным направлениям деятельности;

7) каналы новостей и другие важные приложения, интегрированные в портал.

интерфейса, электронной библиотеки. системы B основе управления документацией, систем управления проектами и учебными материалами, т. е. всего учебно-научного портала ядерных знаний, предлагается использовать систему которой документооборота «E-Lab», электронного разработка была начата сотрудниками НИИ ЯП БГУ в рамках ГКПНИ "Инфотех" (2006-2008). В 2008 г. на компьютерную программу «Система управления лабораторной информацией E-Lab» получено свидетельство №051 Национального центра интеллектуальной собственности РБ. Данная программа представляет собой электронную систему клиент-серверной архитектуры, разработанную на основе свободного программного обеспечения: Debian GNU/Linux, Web-server Apache, сервер баз данных Firebird с использованием сервера приложений PHP. Система работает под управлением операционных систем Windows и Linux. Работа пользователей в системе осуществляется через Web-интерфейс в многопользовательском режиме с разделением прав доступа посредством широко распространённых браузеров: «Mozilla Firefox» версии не ниже 3.6, «Google Chrome» версии не ниже 10.0 и «Орега» версии не ниже 11.0. Система внедрена в нескольких организациях Республики Беларусь. Ее опытная эксплуатация продемонстрировала разработки. высокий технический уровень Система работает надежно, R круглосуточном без сбоев, обеспечивает режиме полностью защиту ОТ несанкционированного доступа и обладает высокой скоростью отклика на пользовательские запросы. Наглядность и доступность информации существенно упрощает работу пользователей, не допуская их к излишней информации. Архивное хранение материалов портала обеспечивается жесткой привязкой его к месту хранения с контролем за условиями хранения. В целом, система «E-Lab» обеспечивает единый интерфейс для целого ряда бесшовно интегрированных приложений.

Предполагаемые участники создания учебно-научного портала ядерных знаний – Министерство образования, БГУ, НИИ ЯП БГУ, вузы, готовящие специалистов для АЭС, Госатомнадзор, МАГАТЭ и др. заинтересованные стороны. Основные принципы создания портала: обсуждать требования к порталу со всеми заинтересованными организации, включая МАГАТЭ, и конечными пользователями до начала разработки; постоянно сравнивать и тестировать разрабатываемый портал на предмет соответствия техническим требованиям; обеспечить открытость разработки и публиковать описание портала; включить в группу разработчиков представителей всех заинтересованных организаций.

Самое главное – каждая развитая страна, формирующая собственную атомную отрасль, должна самостоятельно разработать, создать и поддерживать собственный портал ядерных знаний, интегрированный в мировую отрасль управления ядерными знаниями.

УДК 12.79.00

Н. А. Никоненко¹, А. Н. Королевич², М.И.Артюхин³

СОСТОЯНИЕ ПОДГОТОВКИ НАУЧНЫХ РАБОТНИКОВ ВЫСШЕЙ КВАЛИФИКАЦИИ ПО СПЕЦИАЛЬНОСТЯМ, НЕОБХОДИМЫМ ДЛЯ РАЗВИТИЯ ВЫСОКОТЕХНОЛОГИЧНЫХ ОТРАСЛЕЙ

¹ УО «Белорусский государственный медицинский университет», пр. Дзержинского, 83, 220116 Минск, Беларусь

na_nikonenko@yahoo.ca

² ГУ «Белорусский институт системного анализа и информационного обеспечения научно-технической сферы», пр. Победителей, 7, 220004 Минск, Беларусь <u>akorolevich@belisa.org.by</u>

³ ГНУ «Институт социологии» НАН Беларуси, ул. Сурганова, 1, 220072 Минск, Беларусь

В условиях инновационного развития страны одной из важнейших задач является подготовка высококвалифицированных научных кадров для высокотехнологичных отраслей экономики страны.

В этой связи представляется интересным проанализировать подготовку научных работников высшей квалификации по специальностям, необходимым для развития производств, относящихся к V и VI укладам экономики (приоритетным специальностям).

В работе проведен анализ прогнозных показателей подготовки научных работников высшей квалификации на 2013-2015 гг. по сравнению с плановыми показателями приема аспирантов и докторантов 2012 года.

По состоянию на начало 2012 года послевузовское образование по приоритетным специальностям получали 496 аспирантов, что составляет 11,4% от их общей численности. Анализ подготовки аспирантов в разрезе отраслей науки показал, что наибольший удельный вес составляют аспиранты в области технических (45,6%) и физико-математических (23,0%) наук. Доля аспирантов по приоритетным специальностям в области биологических и медицинских наук составляет, соответственно, 17,5% и 13,5% от их общей численности.

Следует отметить, что в настоящее время в республике не осуществляется подготовка аспирантов по таким важным для развития высокотехнологичных укладов экономики специальностям, как, например, «физика низких температур», «физика и технология наноструктур, атомная и молекулярная физика», «физика пучков заряженных частиц и ускорительная техника», «физика высоких энергий», «атомное реакторостроение, машины, агрегаты и технология материалов атомной промышленности», «квантовая электроника». Отметим, что в 2013-2015 годах по многим из перечисленных выше приоритетных направлений также не планируется осуществлять прием аспирантов.

В 2013 году численность приема аспирантов по данным специальностям в целом по республике прогнозируется на уровне плановых показателей 2012 года, а к 2015

году планируется увеличение на 12,9%. При этом в отраслевой структуре не прогнозируется существенных изменений: доля приема аспирантов в 2015 году в области физико-математических наук составит 25,0%.

Анализ состояния подготовки кадров высшей квалификации в области физики показывает, что из 15 приоритетных специальностей прием аспирантов в 2013-2015 гг., как и в предыдущие годы, планируется осуществлять преимущественно по трем специальностям: «физика конденсированного состояния», «оптика» и «теплофизика и теоретическая теплофизика».

В ближайшие три года не планируется подготовка аспирантов по специальностям: «физика низких температур», «физика и технология наноструктур, атомная и молекулярная физика», «физика пучков заряженных частиц и ускорительная техника», «физика высоких энергий».

Таким образом, создавшаяся диспропорция в подготовке работников высшей квалификации по важнейшим для экономики страны направлениям может сохраниться до 2015 года, если не будет разработан действенный механизм подготовки молодых ученых по всему спектру специальностей, необходимых для развития высокотехнологичных производств.

Belarusian-Swedish-Ukrainian Scientific Workshop on Optics and Laser Physics

УДК 539.1

<u>K. Kulyk</u>, M.H.Stockett, J.D. Alexander, U. Bērziņš, T. Chen, K. Farid, M. Gatchell, A. Johansson, M. Larsson, H.T. Schmidt, H. Zettergren, and H. Cederquist

POLYCYCLIC AROMATIC HYDROCARBON IONS IN COLLISIONS WITH NOBLE GASES

Department of Physics, AlbaNova, Stockholm University, Stockholm, SE-106 91, Sweden kostiantyn.kulyk@fysik.su.se

Polycyclic Aromatic Hydrocarbon (PAH) molecules are an abundant and ubiquitous component of the interstellar media of galaxies, and are likely responsible for the infrared (IR) emission features that are present in most galactic and extragalactic sources. The processes by which PAHs and other large carbon molecules (e.g. fullerenes) are formed and destroyed in the interstellar medium are not fully understood. For example, collisions between PAHs and ions in interstellar shocks are thought to be an important destruction mechanism, but fragmentation cross-sections and the related dissociation energy barriers are mostly not known. Experiments on collisions between PAH ions and atoms, particularly in the 100 eV energy regime, may elucidate the role of such collisions in the processing of interstellar carbon.

We will present the results of collision induced dissociation (CID) experiments between small (6 to 24 carbon atoms) PAH ions and rare gases conducted at center-of-mass energies (for helium) of around 100 eV. The results differ qualitatively from previous work, particularly in the single carbon atom loss channel, which is much more prominent than is typically observed in thermally driven processes. Here single carbon loss even becomes dominant for the larger PAHs. In thermally driven processes such as photo-induced dissociation, evaporation of H-atoms and C_2H_2 units are typically the lowest energy decay pathways. For the present collisions, fragmentation is frequently initiated by the prompt knock-outs of single carbon atoms, after which the excited fragment ion may decay further. Parallel theoretical work reveals that nuclear stopping is the main source of energy deposition in collisions with helium while electronic stopping becomes more significant for heavier target gases. Absolute destruction cross-sections and hydrogen loss ratios have been measured for several target gases.

Parallel theoretical and experimental study has demonstrated that prompt knock-out process drives the dissociation of PAH ions following low energy collisions with noble gas atoms. Following the prompt removal of a single atom, the remaining energy deposited in the molecule, including that from electronic stopping, can lead to further, thermally driven dissociation of the fragment ion. We find that the larger PAHs, and those with more compact structures, so called pericondensed PAHs, are less likely to decay further following single carbon knock-outs. This has important implications for astrochemistry by suggesting efficient routes to highly reactive fragments with unsaturated carbon atoms. In contrast, photoabsorption favors more stable and less reactive fragmentation products.

We have made in-depth studies of anthracene $(C_{14}H_{10})$ and two related nitrogencontaining species: acridine $(C_{13}H_9N)$ and phenazine $(C_{12}H_8N_2)$, Fig. 1.

424



Fig. 1. Anthracene (1), acridine (2), phenazine (3)

The carbon/nitrogen knock-out channel is measured to be weaker in the nitrogensubstituted molecules (Fig. 2), probably because these less stable species are more likely to decay further on the experimental timescale. The preference for 2H-loss over single H-loss which was taken as an indication of H_2 formation at much higher collision energies [2] is not observed in the present energy regime with He where, instead, uncorrelated single H knockout processes dominate.



Fig. 2. CID for three 5 keV PAH ions colliding with He. The labels indicate the number of carbon or nitrogen atoms remaining in the fragment

The electrospray ion source used in current work, or a copy of it, will be connected to DESIREE, a larger device with two electrostatic storage rings and a merging section [3]. This will enable collisions with a variety of ions at low (10 K) temperatures and with center-of-mass energies in the meV range.

[1] A. G. G. M. Tielens 2008 Anuu. Rev Astron. Atrophysics 46, 289

[2] H. A. B. Johannson et al 2011 J. Chem. Phys. 135, 084304

[3] R. D. Thomas et al 2011, Review Scientific Instruments 82, 065112

V.E. Kisel, A.S. Rudenkov, A.S. Yasukevich, N.V. Kuleshov

12W EFFICIENT AIR COOLED DIODE-PUMPED ACTIVELY Q-SWITCHED YB:KGD(WO₄)₂ LASER

Center for laser materials and technologies, Belarusian National Technical University, 65 Nezavisimosti Ave., Build.17, room 208b, Minsk, 220013 Belarus vekisel@bntu.by

Compact diode-pumped Q-switched lasers with pulse repetition rate of tens kHz are of practical importance for diverse materials processing applications. Currently the most popular active media for such commercial systems are Nd-doped crystals (YAG, YVO₄ or YLF). High quantum defect of Nd ions leads to significant thermo-optic aberrations that restrict the possibilities of power scaling, especially at high repetition rates. In order to obtain relatively high output powers, sophisticated cooling systems and powerful 808 nm AlGaAs diodes are used, which results in the drop of the cost efficiency. The utilization of Yb-doped material could improve the performance and cost of Q-switched laser system because of the substantial reduction of the thermal effects due to low quantum defect and high availability of InGaAs diodes. Here we present the results of experimental study of Yb:KGW diode-pumped actively Q-switched laser. Schematic of the laser is shown in Fig. 1.

A standard Z-shaped laser cavity was used for laser experiments that was formed by two concave folding mirrors (M2, M3), flat back mirror (M1) and flat output coupler (M4). 5mm-long N_{g} -cut Yb(1.6at.%):KGW crystal was used as a gain

medium.



Fig. 1. Schematic of the actively Q-witched diode-pumped Yb:KGW laser

Laser crystal was pumped through one of the folding mirrors by using 980nm fibercoupled (Ø105µm, NA=0.22) laser diode with maximum power of 25 W. The crystal was kept at 20°C by means of thermoelectrical cooling with air-cooled heatsink. BBO-based electro-optic Q-switch together with the thin-film polarizer was inserted between one of the folding mirrors and back mirror. The dependencies of average output power, pulse duration and pulse energy on pulse repetition frequency for Yb:KGW Q-switched laser are presented in Fig. 2.

The maximum average output power of 12.2W was obtained at a PRF higher than 20kHz. The corresponding incident pump power was 24.4W. The optical-to-optical laser efficiency was as high as 50%. Average output power at a lower PRF was limited by the optical damage of the dielectric coatings. With increasing of PRF from 5kHz to 50kHz the pulse duration was increased from 10 ns to 24 ns while pulse energy was reduced from 0.7mJ to 0.244mJ. The maximum pulse peak power of 70 kW was obtained. The laser output was linearly polarized parallel to Nm axis. The laser output beam profile was Gaussian up to

maximum pump powers with M^2 factor lower than 1.2 thus indicating negligible thermooptical aberrations.



Fig. 2. The dependencies of average output power and pulse duration (a) and pulse energy (b) on pulse repetition frequency of Yb:KGW Q-switched laser.

In conclusion, highly-efficient diode-pumped actively Q-switched Yb:KGW laser is demonstrated for the first time to our knowledge.

UDC 535+577.344

A. V. Mikulich, A .I. Tretyakova, L. G. Plavskaya, V. Yu. Plavskii, A. N. Rubinov

ANTIBACTERIAL DRUGS AS PHOTOSENSITIZERS FOR ANTIMICROBIAL PHOTODYNAMIC THERAPY

¹ B.I. Stepanov Institute of physics of the National academy of sciences of Belarus, 68, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Belarus <u>a.mikulich@dragon.bas-net.by</u>

The importance of development of antibacterial (antimicrobial) photodynamic therapy methods is caused by the development of resistance of pathogenic agents to medicinal drugs (primarily, to antibiotics and antiseptics) leading to drastic decrease of therapy efficacy of many diseases. The seriousness of this problem is fully aware of the international medical community and the World Health Organization who, in particular, accepted «Global strategy for containment of antibiotic resistance» in 2001.

There is a necessity for wide practical implementation of APDT method in available, clinically approved sensitizers with spectral region of absorption coinciding with emission spectra of certified phototherapeutic devices based on the laser and LED sources of light. At the same time, the development of manufacture for new photosensitizers and their certification is a long, costly and complex procedure.

It is proposed to use in the present work antimicrobial drugs as photosensitizers for antimicrobial photodynamic therapy: a) synthetic agents – nitrofuran derivatives: furacilin (nitrofurazone) and furasol (furazidin); b) chlorophyll-containing extracts of medicinal plants: chlorophyllipt; galenophyllipt; eucalyptus leaves extract; c) hypericin-containing extracts of medicinal plants: diahyperon and hypericum extract.

The measurements of the singlet oxygen quantum yield φ_{Δ} were carried out by luminescent method using the highly sensitive laser fluorometer developed under supervision Prof. B.M. Dzhagarov at B.I. Stepanov Institute of physics of the National academy of sciences of Belarus [1]. The excitation was realized by laser radiation with $\lambda_{ex} = 354$ or 531 nm, registration of luminescence - $\lambda_{em} = 1270$ nm. Aqueous solutions of 5,10,15,20 tetrakis(N-methyl-4-pyridyl)-21H,23H-porphine (TMPyP) with $\varphi_{\Delta} = 77\pm4$ % were used as a standard [2].

Studies have shown that mentioned antiseptics have in some extent photosensitizing properties upon excitation in ultraviolet and visible spectral region.

Multicomponent structure of antibacterial drugs under study is confirmed by the data of fluorescent analysis: the dependence of position of fluorescence spectrum and its lifetime on the excitation wavelength as well as dependence of position of excitation spectrum on the emission wavelength are observed. It is demonstrated on the example of tincture of eucalyptus. More complicated composition shows copper-containing eucalyptus-based drugs: galenophyllipt and chlorophyllipt. According to the data of thin-layer chromatography followed by the spectral fluorescence and absorption analysis the copper analogues of chlorophyll as well as pheophinates of copper are predominant among fluorophore molecules in mentioned drugs. The substitution of Mg^{2+} ions with Cu^{2+} ions in chlorophyll and formation of pheophinates of copper is explained by the technology for producing

galenophyllipt and chlorophyllipt involving at one of the intermediate stages the treatment of eucalyptus tincture with chloride or copper sulphate solutions, respectively. It should be noted that the change from eucalyptus tincture to copper-containing drugs of chlorophyll is accompanied by a significant decrease in the fluorescence quantum yield (from $\varphi \approx 0.15$ to $\varphi \approx 0.01$, $\lambda_{ex} = 607$ nm) and its lifetime (from $\tau = 4.9$ ns to $\tau < 1.0$ ns, $\lambda_{ex} = 460$ nm).

The quantum yields of singlet oxygen generation for aforementioned drugs were also investigated. Table 1 summarizes the data obtained.

Drug under study	Quantum yield of singlet oxygen generation		
Drug under study			
Tincture of Eucalyptus	0.23		
Diahyperon	0.17		
Furacilin, Furasol	0.10		
Galenophyllipt	0.02		
Chlorophyllipt in ethanol	0.014		

Table 1. Quantum yields of singlet oxygen generation for antimicrobial drugs

The possibility of photodynamic damage of biological structures using furacilin and furasol as photosensitizers was demonstrated for cell cultures of human amnion. Studies have shown that the incubation with aqueous solutions of mentioned antimicrobial drugs in final concentration 0,0002-0,0015 % has a negligible effect on the growth of cellular monolayer while exposure to radiation of LED light source (t = 10 min) with emission maximum at λ = 395 nm and fluence rate at the surface of cellular monolayer P = 8 mW/cm² causes cell death.

It should be noted that incubation of culture growth medium of cells with quenchers of singlet oxygen before irradiation leads to a decrease in photobiological action but does not block it. In our opinion, this points to the fact that the radical processes (Type I reactions) along with ${}^{1}O_{2}$ also contribute to the mechanism of photodynamic damage of cells.

- Galievsky V. A. Laser NIR lifetime spectrometer with nanosecond time resolution. / V. A. Galievsky, A. S. Stasheuski, V. V. Kiselyov, A. I. Shabusov, M. V. Belkov, B. M. Dzhagarov // Instruments and Experimental Techniques. - 2010. - V. 53(4). pp. 568 - 574.
- [2] Frederiksen P. K. Two-photon photosensitized production of singlet oxygen in water. / P. K. Frederiksen; S. P. McIlroy; C. B. Nielsen, L. Nikolajsen, E. Skovsen, M. Jørgensen, K. V. Mikkelsen, P. R. Ogilby // J. Am. Chem. Soc. 2005. V. 127. pp. 255 259.

M. M. Asimov¹, N. V. Barulin², A. S. Grabtchikov¹, I. A. Khodasevich¹, A. V. Mikulich¹, V. Yu. Plavskii¹, L. G. Plavskaya¹, A. I. Tretyakova¹, A. N. Rubinov¹

EFFECT OF VISIBLE AND NEAR INFRARED LASER RADIATION ON ACTIVITY OF BIOLOGICAL PROCESSES

¹ B.I. Stepanov Institute of physics of the National academy of Sciences of Belarus, 68, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Belarus <u>m.asimov@dragon.bas-net.by</u>

² Belarusian State Agricultural Academy, 5, Michurina Street 213407, Gorki, Mogilevsky Region, Belarus

The question of acceptors of low intensity laser radiation, which define its regulatory action on living organisms, is a key one in understanding the mechanism of therapeutic efficiency of this phenomenon. As a rule, at analyzing the mechanisms of photochemical processes that determine regulatory effect of laser radiation in the visible spectral range, the presence of therapeutic effect is explained by the fact that either optical radiation is absorbed by the protein macromolecules containing the prosthetic groups (hemoglobin, cytochrome, catalase and others) or endogenous photosensitizing molecules are activated with light (first of all porphyrin kind) [1]. It is believed that in the first case the excitation with radiation leads to changing oxygen-transport function of hemoglobin, local concentration of oxygen due to its photodissociation from oxyhemoglobin and activity of enzyme systems (cytochrome c oxidase, superoxide scavenger, catalase). In the case of crucial role of photosensitizing reactions in the mechanism of biological activity of laser radiation, the important factors are the processes of changing the permeability of the cell membranes due to the processes of peroxide oxidation of lipids and other photodynamic processes. The question about bioactivity of near IR low intensity laser radiation and about its possible acceptor molecules is open.

Investigations carried out in this work allowed for the first time to discover the ability of the red and near infrared laser radiation to produce the regulatory action on biochemical processes controlling the hatching of branchiopods crustacean *Artemia salina L*.

Influence on cysts was carried out by radiation at 632,8 nm (He-Ne laser); 808 and 976 nm (diode lasers); 1064 and 1342 nm (diode pumped Nd:YVO₄ laser); 1176 nm (diode pumped Nd:YVO₄ laser (1064 nm) with intracavity Raman self-frequency conversion) with fluence rate of 3 mW/cm². As a test of laser radiation effect to *Artemia salina L*. (Artemia) a percentage of hatching of Artemia naupliuses from cysts (protective cover) (γ , %) after ova activation in salt water under conditions of supporting the stable thermal regime was chosen.

The data obtained have shown that under optimal conditions exposure to radiation with $\lambda = 632.8 \text{ nm}$, $\lambda = 976 \text{ H} \lambda = 1064 \text{ nm}$ has an inhibitory effect on the hatching of the nauplii, while the radiation with $\lambda = 808 \text{ nm}$, $\lambda = 1176 \text{ nm}$ and $\lambda = 1342 \text{ nm} - \text{stimulating effect}$. This allows to make some conclusions about bioactivity of optical radiation of the near IR spectral range. Since the laser light with $\lambda = 808$, 976, 1064, 1176, 1342 nm is outside the absorption band of the porphyrins, the possible role of photosensitized reactions involving them should be excluded. Severe photobiological effect when exposed to radiation with $\lambda = 1176$, 1342 nm

can also questioned the role of the direct photochemical reactions of oxyhemoglobin (and other macromolecules containing the prosthetic groups), as the impact of a powerful pulsed laser radiation with a wavelength $\lambda = 1060$ nm for its solutions does not cause any reversible or irreversible spectral changes [2].

In our opinion, most likely that dissolved molecular oxygen and water can act as acceptors of laser radiation of near infrared spectral region, determining its biological effects. According to different estimations and experimental data obtained for compressed oxygen at high pressure, the absorption bands of oxygen and its dimers in liquid organic media are characterized by maxima at 1270, 1064, 920, 765, 630 nm. A molar extinction coefficient for oxygen at 1270 nm is 0.003 M⁻¹ cm⁻¹ and at 1060 nm it is in 10-70 times lower [3]. For the comparison we note that molar extinction coefficient in Sore band maximum of hemoglobin is 1.65 10⁵ M⁻¹ cm⁻¹. Despite of small molar extinction coefficient there are data confirming the possibility of direct triplet-singlet excitation of molecular oxygen being photobiological importance. Accounting low value of molar extinction coefficient of such transition and relatively low power density of exciting radiation (3 mW/cm²) the concentration of singlet oxygen in biological system is sufficiently small to generate noticeable destructive action. Most likely that its formation in biological system can play signal (trigger) function that influences running the bio-chemical and physiological processes in organism, for example, such as starting apoptosis [4]. Perhaps for this reason, under radiation $\lambda = 632.8$; 1064 nm, corresponding to the maxima of the absorption bands of oxygen, as a rule, there is inhibition of hatching nauplii. With comparable radiation dose ($E = 0.27 - 0.9 \text{ J/cm}^2$) the radiation with $\lambda = 808, 1176, 1342$ nm, located away from the known absorption band maxima of oxygen in solution, has a stimulating effect. However, the presence of biological effects when exposed to radiation cysts nauplii, out of the corresponding bands for direct excitation of singlet oxygen, which suggests that in addition to molecular oxygen a water - an universal biological environment, which plays a leading role in the maintenance and regulation of homeostasis in living systems can be an acceptor of laser radiation near-infrared region of the spectrum. It is considered [5] that water can act as a sensor of the weak impact of the physical and chemical nature due to changes to its physical and chemical properties and biological activity. At the heart of the high sensitivity to external influences water is clustered nature of its structure, which consists in the formation of short-lived cooperative associates by forming a network of hydrogen bonds between molecules ("flickering clusters"). For this reason, the water can be seen as a collective nonequilibrium dynamic system capable of self-organization, and sensitive to external influences, including a laser radiation.

- [1] Plavskii V.Yu., N.V. Barulin. In: Advances in Laser and Optics Research, Ed.: W.T.Arkin. Vol. 4. New York: Nova Science Publishers Inc., 2010. P. 1.
- [2] B.M. Dzhagarov, V.S. Chirvony, and G.P. Gurinovich. In: Laser Picosecond Spectroscopy and Photochemistry of Biomolecules, Ed.: V.S. Letokhov, Bristol; Philadelphia: A. Hilger, - 1987. - P. 181.
- [3] A.P. Losev, I.N. Nichiporovich, I.M. Byteva, N.N. Drozdov, and I.F. Al Jghgami, *Chem. Phys. Lett.* 1991. Vol. 181. P. 45.
- [4] S.D. Zakharov, A.V. Ivanov, Quant. Electron., 1999. Vol. 29. P. 1031.
- [5] V.I. Lobyshev, R.E. Shikhlinskaya, and B. D.Ryzhikov. J.Mol. Liquids., 1999. Vol. 82. - P. 73.

S.V. Voitikov, P.V. Shpak, A.A. Kananovich, V.I. Dashkevich, P.A. Apanasevich, and V.A. Orlovich

END-DIODE PUMPED COMPACT SOLID-STATE RAMAN LASERS

B.I. Stepanov Institute of Physics NAS of Belarus, Nezavisimosty Ave 68, 220072, Minsk, Belarus <u>s.voitikov@dragon.bas-net.by</u>

Continuously end-diode-pumped Q-switched and continuous-wave (CW) solid-state Raman lasers are very compact, robust, relatively cheap and easy to generate radiation attaining power of several Watts in CW regime and pulses with duration from tens of picoseconds to tens of nanoseconds and peak powers of several hundreds of kilowatt in the Qswitched regime.

In this work, we give the report on the experimental and theoretical investigation of compact solid-state Raman lasers. In investigation of Q-switched lasers we obtained the Stokes pulses (1196 nm) as sort as 180 ps down to 50 ps with energies about several microjoule and pulse repetition rate attaining several dozens of kilohertz in the Nd:LSB/Cr:YAG/Ba(NO₃)₂ microchip laser [1]. Very high intracavity peak power (\approx 50kW) of Stokes pulses enabled to assume the possibility of intracavity conversion of fundamental radiation into Stokes radiation of not only the 1st order but the 2nd and 3rd ones via both twophoton (cascade) and parametric transient stimulated Raman scattering (SRS). Going on with the investigation of SRS in compact Raman lasers we at first obtained the 2nd Stokes pulses in the Nd:LSB/Cr:YAG/BaWO₄ microchip laser (1324 nm) having a common cavity for fundamental and Stokes radiation [2] and in a coupled cavity Nd:YAG/Cr:YAG/Ba(NO₃)₂ laser (1368 nm) [3]. The minimal pulse durations at the 2^{nd} Stokes wavelength were ≈ 100 ps in the short-cavity laser at a pulse energy of 5 μ J, and the pulse repetition rate reached 20-24 Due to coupled cavity configuration of a laser the 3rd Stokes pulses were at first kHz. obtained in the Nd:YAG/Cr:YAG compact laser with Ba(NO₃)₂ and PbWO₄ crystals as Raman media [4]. The 3^{rd} Stokes oscillation within the 1.5-1.6 μ m eye-safe wavelength range was realized with the output pulses energy of 6 µJ at the duration of 4 ns. To explain and describe the experimental results the phenomenological [1] and semiclassical models [2-4], and full quantum theory [5] of transient intracavity SRS in compact (including microchip and mini) lasers were proposed. In the theoretical description, both cascade (two-photon) and parametric (multiwave mixing) processes have been taken into account, as well as the features of mini-design of the lasers under investigation. The theoretical results agree well with the experimental data [1-4].

Also, the performance of solid-state Raman laser has been investigated in CW regime. In an end-pumped quasi-CW YVO_4/Nd : YVO_4 mini self-Raman laser (fundamental operation at 1064 nm) quasi-CW 1st Stokes radiation at 1176 nm has been obtained [6]. The average Stokes power was as much as 1.8 W, which corresponded to a total optical-to-optical conversion efficiency of about 10%. In [7] we demonstrate the first quasi-CW (ms-long pulses, pump duty cycle of 10%) end-diode pumped solid state Nd: YVO_4 self-Raman laser (fundamental operation at 1342 µm) generating eye-safe radiation. The output power at the 1st
Stokes wavelength (1524 nm) was 250 mW. Theoretical models were proposed [6,7] to analyze these laser systems, and the numerical results described well the obtained experimental data.

Thus, end-diode-pumped CW and Q-switched compact solid-state Raman lasers are the unique laser systems providing frequency conversion in rather wide spectral regions. Such systems are attractive for various applications including material processing, micromashining, medicine, and remote sensing.

- A.A. Demidovich, S.V. Voitikov, L.E. Batay, A.S. Grabtchikov, M.B. Danailov, V.A. Lisinetskii, A.N.Kuzmin, V.A. Orlovich. "Modeling and Experimental Investigation of Short Pulse Raman Microchip Laser. Optics Communications". Vol. 263, 52-59 (2006)
- [2] S.V. Voitikov, A.A. Demidovich, P.V. Shpak, A.S. Grabtchikov, M.B. Danailov, and V.A. Orlovich. "Two-Stokes Generation and Effect of Multiwave Mixing on Output Pulse Parameters of Q-Switched Raman Microchip Laser" J. Opt. Soc. Am. B V. 27, 1232-1241 (2010)
- [3] P.V. Shpak, S.V. Voitikov, A.A. Demidovich, M.B. Danailov, and V.A. Orlovich. Coupled-cavity passively Q-switched two-Stokes microchip laser Applied Physics B: Vol. 108, 269-281 (2012)
- [4] P.V. Shpak, S.V. Voitikov, R.V. Chulkov, P.A. Apanasevich, V.A. Orlovich, A.S. Grabtchikov, A. Kushwaha, N. Satti, L. Agrawal, and A.K. Maini. "Passively Q-switched diode-pumped Raman laser with third-order Stokes eye-safe oscillation" Optics Commun. Vol. 285, 3659–3664 (2012)
- [5] S.V. Voitikov, A.S. Grabtchikov, A.A. Demidovich, M.B. Danailov, and V.A. Orlovich. "Quantum theory of microchip lasers with intracavity SRS-conversion". Opt. Commun., Vol. 281, 5202-5212 (2008)
- [6] A. A. Kananovich, S.V. Voitikov, A. A. Demidovich, M. B. Danailov, and V. A. Orlovich. "Output power and intracavity intensity profiles of a quasi-continuous endpumped Nd:YVO4 self-Raman mini laser" Applied Physics B Vol. 106, 9–17 (2012)
- [7] A.A. Kananovich, V.I. Dashkevich, P.A. Apanasevich, D.H. Zusin, V.A. Orlovich. "Eyesafe solid-state quasi-CW Raman laser with millisecond pulse duration." Opt. Commun. Vol. 285, 2719–2723 (2012)

S. N. Kurilkina, V. N. Belyi, N. S. Kazak

FORMATION AND INVESTIGATION OF EVANESCENT AND PLASMONIC QUASI-NONDIFFRACTION LIGHT BEAMS

B.I.Stepanov Institute of Physics of NAS Belarus, Nezavisimosti ave., 68, 220072 Minsk, Belarus <u>s.kurilkina@ifanbel.bas-net.by</u>

The theoretical bases of interaction of evanescent and plasmonic quasi-nondiffraction fields with one- and two-dimensional photonic crystals and metamaterials have been developed. The principles of new non-contact methods and devices for optical nondestructive testing and optical manipulation of micro- and nano-particles have been proposed.

A theory of propagation of vector Bessel light beams in a one-dimensional photonic crystal (1DPC) (with and without a defect impurity – a layer of a uniaxial crystal) is developed. Based on this, a method of a high-effective generation of Bessel vortices has been proposed. The conditions for the high-effective transformation of an incident (m-1) order Bessel beam into a transmitted through 1DPC Bessel beam of (m+1) order are derived. The influence of parameters of the structure (refractive indices and thicknesses of the component of 1DPC) and cone angle of the incident BLB on the process of this transformation is analyzed.

The peculiarities have been studied of the generation of evanescent BLBs in structures containing dielectric layer. It has been established that the superposition of evanescent zero – order Bessel light beams with equal phases is characterized by the enhancement of central peak and suppression of lateral maxima in the radial distribution of energy flow densities. A virtual Bessel tip has been proposed, which has the suppressed lateral maxima for creating dip optical traps with steep potential profile and large stiffness. Such Bessel tips are characterized by the constant size of a probing beam at increasing the probe-to-sample distance, which can vary from zero up to λ . A two-dimensional pattern of the longitudinal energy flow density for the superposition of two zero and high-order evanescent Bessel beams has been calculated. Here it has been established that a superposed evanescent Bessel beam possesses also a quasinondiffractive nature and therefore keeps the size of its sub-wavelength central lobe at any distances ranging from zero up to about the wavelength. The possibility has been shown for creating an evanescent Bessel optical multi- traps based on the interference of two oppositely charged Bessel vortex beams. The results obtained can be used for the development and optimization of techniques and devices for testing the quality of the surface of various substrates by evanescent Bessel beams; for creating Bessel beams-based optical tweezing systems; for the capturing and manipulating of micro- and nanoparticles; applications are expected to be found in near-field optical microscopy with sub-wave resolution.

It is shown that the superposition of two plasmons with topological charges, which are different on absolute value as well as sign, allows one to form near the surface of quasinondiffracting multi-plasmon with the maxima of submicron size. Its peculiarity is the existence of azimuthal and radial energy fluxes and also essential gradient fields in near-axial area. These features determine the perspectiveness of application of these Bessel type multiplasmons for manipulation of micro- and nanoparticles, probing biological cells and application in genetic engineering. The principle scheme has been proposed of the system of multichannel manipulation of nanoparticles on the basis of Bessel multi-plasmons. UDC 537.531

V.G. Baryshevsky, A.A. Gurinovich, P.V. Molchanov, A.S. Lobko

GENERATION OF MEDICAL X-RAY AND TERAHERTZ BEAMS OF RADIATION USING TABLE-TOP ACCELERATORS

Research Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University 11 Bobruiskaya Str., Minsk 220030, Belarus lobko@inp.bsu.by

At present, the reduction of patient dose in diagnostic radiology and computer tomography examinations is a hot research topic worldwide. The development of new sources of power (quasi)-monochromatic tunable x-rays and terahertz radiation is an important step in this direction. We have showed [1] that an x-ray source with needed properties can be developed using parametric x-rays (PXR) [2] and a table-top electron accelerator with beam energy of 70-100 MeV.

Medical quasi-monochromatic x-ray beams must have essential integral flux to provide quality high-contrast imaging. Also, actual sources of such beams must have laboratory sizes and affordable price to be used in clinics and hospitals. Current understanding shows that high quality *in vivo* monochromatic ($\sim 10^{-2}$) imaging requires approximately 10^{12} x-ray photons per second with energy tunable in the 10-70 keV spectral range. The x-ray background should be relatively low and a rather large irradiation field should be provided.

One of the main problems in the development of monochromatic x-ray sources for medical imaging is the gap between the achievable photon generation efficiency (photons per electron) and the existing electron beam current in the table-top accelerators. Another problem is strong electron scattering while the beam is passing a through single crystal target. This problem can be overcome by careful selection of crystal targets (i.e. light material), appropriate crystallographic planes (i.e. x-ray reflex), and target shapes (e.g. wedge-shaped). On the other hand, monochromatic radiation tuning can be performed very easily, just by rotating-a crystal target against the beam axis. Tunable mono-chromaticity of PXR allows high-contrast imaging at a relatively low patient dose.

Another way of producing intense x-ray beams is the use of diffracted channeling radiation (DCR) mechanism rather than parametric x-rays. This phenomena is still not investigated experimentally, but theoretical estimations show that the x-ray yield can be higher in comparison with that in the case of PXR and diffracted *Bremsstrahlung*.

Some table-top accelerators with almost required parameters, such as a compact storage ring (synchrotron) [3], a pulsed race-track microtron [4], and rhodotron [5] have been developed in recent years. A number of very interesting results could be obtained later, when laser accelerators [6] become more affordable. Particularly, one can observe collective effects leading to a drastic intensity increase up to $\sim N^2$, where N is the number of electrons in a beam.

The mechanisms of photon radiation by a relativistic charged particle passing with constant velocity through a crystal (PXR, DCR, some others) have a general nature, and similar effects exist for a particle moving either through an artificial/photonic crystal or even along its surface. Photonic crystals made of combination of several diffraction gratings with

various periods can be used to radiate photons of extended spectral range from microwave through terahertz or even visible and soft x-rays.

Accelerators of a kind can also be used for the development of the power terahertz source based on the concept of the volume free electron laser (volume or photonic FEL) [7, 8]. Terahertz radiation is extremely important for bio-medical applications and its wide use depends on the progress in the development of THz sources. The multi-modal medical imaging and therapy facility can be developed based on a dedicated electron accelerator of some tens of MeV beam energy with the targets providing the application of the mentioned mechanisms of radiation generation.

The major part of the electron beam in the photonic FEL interacts with the electromagnetic wave due to the spatially-distributed feedback coupling. Multi-wave Bragg dynamical diffraction is the mechanism that provides mode discrimination in photonic FELs. In this case, the transverse dimensions of the photonic FEL resonator can significantly exceed the radiation wavelength. Use of spatially-distributed feedback in a photonic crystal can provide such features of radiation generation as follows:

- frequency tuning at fixed energy of an electron beam that is much wider in comparison with conventional systems;
- significant reduction of the generation threshold beam current due to a more effective interaction between the electrons and the electromagnetic waves, thus enabling a more compact source design;
- simultaneous generation of photons with several frequencies;
- effective mode selection in oversized systems, where the radiation wavelength is significantly smaller than the resonator dimensions.

In the case under discussion, a THz source generating waves with a wavelength of 0.3 mm should have the period of the diffraction grating at a photonic crystal that provides Bragg coupling, equal to ~ 0.16 ·N mm, where N=1, 2, 3....

Summarizing, compact systems based on a table-top accelerator and combined monochromatic tunable x-rays and T-rays can find a lot of applications in medical routine, as well as in bio-medical research.

- Baryshevsky V., Gurinovich A., Gurnevich E., Lobko A. Generation of medical x-ray and THz beams of radiation using table-top accelerators // Il Nuovo Cimento, vol. 34C, #4 (2011) 199;
- [2] Baryshevsky V., Feranchuk I., Ulyanenkov A. Parametric X–ray Radiation in Crystals: Theory, Experiment and Applications, Springer 2006, 176 P.;
- [3] http://www.photon-production.co.jp/en/index_e.htm
- [4] Tsipenyuk Y.M. Microtron: development and applications, CRC Press, 2001, 368 P.;
- [5] http://www.iba-industrial.com/accelerators/rhodotron
- [6] Malka V., Faure J., Gauduel Y.A., Lefebvre E., Rousse A., Ta Phuoc K. Principles and applications of compact laser-plasma accelerators // Nature physics 4 (2008) 447;
- [7] Baryshevsky V.G. // Doklady Akad. Nauk SSSR, 299 (1988) 19 (in Russian);
- [8] Baryshevsky V.G. Volume free electron lasers // NIM A 445 (2000) 281.

V.Belyi, N.Kazak, N.Khilo, A.Ryzhevich

GENERATION OF NEW TYPES OF SINGULAR BEAMS IN CRYSTALS

B.I. Stepanov Institute of Physics of NAS Belarus, Nezavisimosti ave., 68, 220072 Minsk, Belarus v.belyi@dragon.bas-net.by

The use of singular properties of uniaxial and biaxial crystals in directions of optical axes has been proposed for formation of light beams with phase dislocations of wave front. Polarization singularities were studied of light beams formed by anisotropic crystals. New efficient method has been developed of generation of radially and azimuthally-polarized light beams with the application of biaxial crystals.

Linear and nonlinear processes of transferring optical singularities from anisotropic crystals onto the wavefront of Bessel light beams are investigated. The generation of highorder vortices at the propagation of BLBs along the optical axes of crystals was studied. It is shown theoretically and experimentally that when a circularly polarized zeroth-order BLB propagates along the optical axis of uniaxial crystals, about hundred percent of its energy are converted, under certain conditions, into the second order Bessel vortex beam. Due to transversal invariance of the proposed crystal-based scheme, it is possible to transform several Gaussian input beams into an array of vortex beams simultaneously. The high radiation damage threshold of crystals makes it possible to use them in generation of powerful optical vortex fields.

We have considered the frequency doubling of Bessel vortices in new conditions of the full- conical phase matching. This scheme allows putting into practice the nonlinear frequency transformation of Bessel beams having a cone angle of several tens of degrees. Peculiarities of frequency doubling of Bessel vortices in the conditions of the full- conical phase-matching have been investigated for uniaxial crystals of hexagonal and trigonal symmetry. This new type of frequency doubling of Bessel vortex beams has been experimentally realized in an uniaxial BBO- crystal where the incident zero-order Bessel light beam at fundamental frequency is directed along the optical axis of the crystal and its cone angle is equal to the phase-matching angle.

The second harmonic generation by Bessel beams in the conditions of full-conical synchronism allows one to generate Bessel vortex beams of various orders and their linear superpositions. The selection of the field structure of second harmonic is realized by means of the mechanism of the transverse synchronism, while the longitudinal synchronism in the scheme under study does not depend on the azimuthal angle.

It is shown that such a nonlinear interaction has several advantages over the traditional phase-matching: i) new more effective components of the nonlinear susceptibility tensor can be involved in nonlinear process; ii) submicron spatial structure of the second harmonic field can be realized. In addition, the advantage of the axial-symmetric scheme is the absence of walk-off effect and hence the distortion of the second harmonic intensity distribution. Consequently, such crystal-based transformers of the Bessel beam order, like linear analogues, would be characterized by a high quality of the output optical signal.

УДК 53

V.I. Dashkevich¹, V.A. Orlovich¹, S.N. Bagaev², S.M. Vatnik², A.A. Pavlyuk³

LASING ON THE ${}^{5}D_{0} \rightarrow {}^{7}F_{4}$ TRANSITION OF 25 % Eu : KGd(WO₄)₂ LASER CRYSTAL: FREE-RUNNING, PULSE AND QUASI-CW OPERATION

¹B.I.Stepanov Institute of Physics of National Academy of Sciences of Belarus 68 Nezalezhnasti Ave., 220072Minsk, Belarus <u>v.orlovich@dragon.bas-net.by</u>

²Institute of Laser Physics, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, 630090 Russia, Novosibirsk, 13/3 Lavrentyev Ave.,

bagaev@laser.nsc.ru

³A.V. Nikolaev Institute for Inorganic Chemistry, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, 630090 Russia, Novosibirsk, 3 Lavrentyev Ave.,

pavlyuk@niic.nsc.ru

A 25 %Eu: KGd(WO₄)₂ crystal is grown by a modified Czochralski method and its spectral and lasing properties are studied. Generation of stimulated emission in this crystal on the ${}^{5}D_{0} \rightarrow$ ${}^{7}F_{4}$ transition of the Eu $^{3+}$ ion is obtained, as far as we know, for the first time. The laser operates at room temperature at a wavelength of ~ 703 nm under pumping into the ${}^{7}F_{1} \rightarrow {}^{5}D_{1}$ absorption band of the europium ion by the second harmonic of a Q-switched Nd: KGW laser $(\lambda_p = 533.6 \text{ nm})$. With a 9.4-mm-long Eu-element, the output energy in the free-running mode reached 244 µJ, while the optical efficiency was 1.5 %. The Q-switching mode was implemented using a passive shutter on the dye #1044 (ruby laser, λ =693 nm). The output energy in the double-pulse mode was $10 - 11 \mu$ J. At single pulse mode, the energy was $6 - 9 \mu$ J. The generation of 30-ns pulses was achieved. In Q-switching mode, the possibility of self-frequency Raman conversion of radiation of the ${}^{5}D_{0} \rightarrow {}^{7}F_{4}$ laser channel in the first Stokes at 750 nm was demonstrated. The quasi-cw laser operation was obtained in 9.4 mm-long Eu-doped crystal with duty cycle 1:10. The pumping source was diode-pumped Nd:KGd(WO₄)₂ laser with intacavity SHG. Laser output was linearly polarized $(E||N_m)$. The output-input dependence for Eu:KGd(WO₄)₂ laser was linear, slope efficiency was ~1.7%. At 1.6 W of peak incident pump power, the largest peak output power obtained was ~25 mW. The duration of output pulses reached ~18 ms. The output mode was near-Gaussian.

Nils Elander¹ and Sergei Rakityansky²

RESONANCES AND THEIR RELATIONS TO SPECTRAL DENSITIES AND SCATTERING CROSS SECTIONS IN THE SCHRÖDINGER FORMULATION

¹ Chemical Physics Division, Department of Physics, AlbanNova university center Stockholm university, SE 106 91 Stockholm <u>elander@fysik.su.se</u>
² Department of Physics, University of Pretoria, 002 South Africa <u>rakitza@up.ac.za</u>

The concept of resonances for a two-body single and many channel Schrödinger problem is discussed with respect to the Tichmarsh-Weyl theory. It is argued that the contributions from the entire set of resonances together with the free particle spectral density build the entire spectrum. The implication of this statement on the influence of resonances on a two-body scattering cross section is discussed. It is described how the residues of the Smatrix at a complex resonance energy , i.e. two complex numbers, is used to define its to the cross section. The limitations of the Breit-Wigner approximation is discussed.

[1] Few-Body Systems, Published on line 27 April 2012.

V. Goryashko, V. Ziemann

SELF-AMPLIFIED COHERENT SPONTANEOUS EMISSION IN A FREE-ELECTRON LASER WITH REDUCED LEVEL OF SHOT NOISE

Uppsala University, Lägerhyddsvägen, 1, 75120 Uppsala, Sweden <u>vitaliy.goryashko@physics.uu.se</u> volker.ziemann@physics.uu.se

We present an analysis [1] of self-amplified coherent spontaneous emission (CSE) in a planar free-electron laser (FEL) driven by electron bunches with different levels of density fluctuations. These density fluctuations originating from shot noise compete with an intrinsic coherent seeding driven by the current gradient and are in the focus of our investigation. Simulations are mainly performed for electron bunches with a rectangular shape of the charge density since this makes the results more universal. We found that the temporal structure of electromagnetic pulses in the studied FEL is mainly determined by the self-amplified coherent spontaneous emission because the coherent part of spontaneous undulator radiation driven by the current gradient is dominant over the incoherent one originating from shot noise. However, the incoherent emission being small leads to essential distortions of radiation pulses during amplification. To study the effect of noise on the FEL performance, we have calculated the probability density distribution of the maximal power of the radiation pulses for different values of noise factor. It turns out that likewise to the SASE FEL the envelope of the probability density distribution of the self-amplified CSE pulses can be accurately approximated by the Gamma distribution. The rms width of the probability density distribution determines the temporal coherence of the FEL. We found that the coherence quickly increases as the noise level reduces and at the noise level, for example, three orders of magnitude below the normal shot noise level the FEL radiation is almost completely coherent.

It turns out that the FEL based on CSE produces pulses that are almost Fourier transform limited. We found that the time-bandwidth product depends weakly on the noise level and is close to unity in the nonlinear regime. The analysis indicates that the time-bandwidth product is mainly determined by the bunch length and interaction distance and it attaints its minimal value approximately at the beginning of the nonlinear stage of the bunch-wave interaction.

To estimate the effect of a finite electron current gradient we have also performed calculations of the FEL characteristics for different rise times of the current pulse. We found that a reduced level of the power fluctuations preserve as the current gradient reduced so that we expect the results obtained for the rectangular current pulse to be qualitatively correct for a bunch current pulse with a rise time up to several FEL wavelengths.

CSE is driven by the gradient of the bunch current and bunches with a steep rise of the electron density at the tail are preferable to drive the FEL. To create such bunches also having a reduced level of noise we proposes the scheme that uses effects of noise reduction and controlled microbunching instability, and consists of a laser heater, a bunch compressor as well as a shot noise suppression section.

First, the bunch passes through the laser heater and bunch compressor. In our scheme the tail of the bunch is sensitive to the microbunching instability whereas the main core of the

bunch is stable against the instability. This is realized by using a laser heater with a partial overlap between the electron and laser pulses such that the bunch tail remains unheated. Then, in the bunch compressor the bunch undergoes the longitudinal compression and the controlled microbunching of its tail occurs as well. We calculated the microbunching gain with and without laser heater and in the latter case the microbunching gain attains its maximal value at a compressed wavelength of 2.7 us. Therefore, if we modulate the bunch tail with a period of around 40 us (the compression factor is 16) by means of a photocathode laser (or laser modulator) and heat with the laser heater only the main core of the bunch leaving the tail unheated, then we can have the microbunched tail resulting in a steep variation of the electron density at the tail. There is enhancement of the microbunching in the vicinity of the resonant FEL wavelength so that the normal level of noise is preserved during magnetic compression. Therefore we use a shot noise suppression scheme downstream the bunch compressor in order to reduce the level of shot noise. We found that in the compact noise suppression section of around 3 m the shot noise reduction by two orders of magnitude can be achieved for electron bunches produced by the SwissFEL injector. Thus, one can form "quiet" bunches capable of effective driving CSE in the FEL.

We have also analysed a possible extension of the FEL based on CSE with finite current gradient and reduced shot noise to the VUV region using the linear analytical theory developed in [2]. In fact, the FEL coherence depends of the ratio of the coherent and incoherent spontaneous emission and if the latter is reduced, then the dominance of CSE can be extended to shorter wavelengths. We estimated that VUV FELs based on self-amplified CSE would require the reduction of shot noise by three or four orders of magnitude in order to have radiation pulses with a well-determined temporal structure. Simultaneously, the rise time of the current pulse should occur on a scale smaller than a few FEL resonant wavelengths. As the technological challenges on noise reduction are overcome, the proposed FEL may become an alternative to FELs using the regenerative amplifier concept or seeding schemes. Finally, CSE from "quiet" bunches is of interest not only for short-wavelength FELs but also infrared FELs may benefit from this approach. Moreover, an infrared FEL with moderately relativistic bunches can be a convenient test stand for studying properties of `quiet' bunches.

- [1] Goryashko V. Self-amplified coherent spontaneous emission in a free electron laser with "quiet" bunches / V. Goryashko, V. Ziemann // Phys. Rev. ST Accel. And Beams. – 2013. – Vol. 16. – P. 030702.
- [2] Gover A. Coherence limits of free electron lasers / A. Gover, E. Dyunin // IEEE J. Quantum Electron. 2010. Vol. 46. P. 1511.

УДК 53

Å. Larson, S. Nkambule, N. Elander

THEORETICAL STUDIES OF MUTUAL NEUTRALIZATION

Department of Physics, Stockholm University, SE-106 91 Stockholm, Sweden <u>aasal@fysik.su.se</u>

At Stockholm University a new double electrostatic storage ring DESIREE [1] has been constructed. The ring will be used to study mutual neutralization in collisions of positive and negative ions. The ring is cooled down to 10 K and pumped to ultra high vacuum. This enables for collisional studies of cool atomic or molecular ions (even biomolecules) and the collision energies ranges from meV to keV.

To perform *ab initio*, quantum studies of the mutual neutralization reaction is far from trivial. So far we have started by studying the mutual neutralization reaction for collisions of atomic ions such as $H^+ + H^-$, $He^+ + H^-$, $Be^+ + H^-$, and $H^+ + F^-$ [2,3,4]. The reactions are driven by non-adiabatic couplings occurring at large internuclear distances when the potential energy curves of the ionic and covalent states approach each other. These avoided crossings occur among very highly excited states and often at very large distances. To accurately describe these avoided crossing, advanced quantum chemistry methods, such as the configuration interaction method are required.

When the relevant potential energy curves and couplings are computed, the nuclear dynamics are studied by solving a coupled radial Schrödinger equation. From the asymptotic nuclear wave function, the total cross section, final state distributions as well as the differential cross section for the reaction are calculated.

At higher collision energies, the nuclear motion does not have to be described quantum mechanically. Rather a semi-classical approach using the Landau-Zener model can be used. This approach is tested on the $H^+ + H^-$ reaction and then applied on other reactions such as $Be^+ + H^-$.

A quantum *ab initio* study of the mutual neutralization reaction in collisions of atomic and molecular ions is a severe challenge. Here, the multi-dimensional coupled Schrödinger equation has to account for three-body break-up as well as the long-range Coulomb interaction. A first reaction we plan to study is mutual neutralization in collisions of H_2^+ and H^- .

[1] R. D. Thomas et al. Rev. Sci. Instr. 82, 065112 (2011).

- [2] M. Stenrup, Å. Larson and N. Elander, Phys. Rev. A 79, 012713 (2009).
- [3] J. Zs. Mezei, M. Stenrup, N. Elander and Å. Larson, Phys. Rev. A, 82, 014701 (2010).
- [4] J. Zs. Mezei, J. B. Roos, K. Shilyaeva, N. Elander, and Å. Larson, Phys. Rev. A, 84 012703 (2011).

UDC 53

Tony Hansson

ULTRAFAST PHOTOCHEMICAL DYNAMICS OF ATMOSPHERIC MOLECULES FROM A FEMTOSECOND ELECTRON-ENERGY RESOLVED ELECTRON-ION COINCIDENCE SPECTROSCOPY VIEWPOINT

Dept of Physics, Stockholm University, SE-106 91 Stockholm, Sweden tony.hansson@fysik.su.se

Femtosecond time-resolved photoelectron spectroscopy, FSPES, offers deep insight into the inherently ultrafast electronic state interactions governing atmospheric photochemistry. Under suitable circumstances, for instance those applying to molecular Rydberg states, a very detailed electronic state resolved view of the population dynamics in the multitude of states is attained. Moreover, the combination of FSPES with mass-resolved ion coincidence spectrocopy, FSEREICO, makes it possible to disentangle the molecular dynamics leading to the formation of different ionic species in the photoionization.

I will in this talk illustrate these points by recent results on the photodissociation dynamics of acetone, which is a major source of methyl radicals in the atmosphere. Valence-Rydberg state interaction in the excited states is thought to be crucial in this process, but, despite considerable efforts, the nature of the valence states and their positions are still by and large unknown. Partly this is because of the apparent extensive coupling between the valence states and numerous Rydberg states and between different valence states, which makes the spectroscopic identification of the states difficult, in particular as they seem to be very shortlived.

Employing pump-probe FSPES and FSEREICO we resolved the detailed ultrafast electronic state evolution ensuing excitation of acetone at 9.3 eV and its correlation with the two different phototionization products, acetone ion $CH_3COCH_3^+$ and acetyl ion CH_3CO^+ . Most of the for the probe energetically accessible Rydberg states are populated within a few tens of femtoseconds in a nontrivial sequence. Meanwhile, the ionic species exhibit a very shortlived pathway to acetone ion formation and a somewhat slower decaying acetyl ion signal on the scale of 100 fs. The correlated spectra show that the acetyl ions are formed primarily by dissociative photoionization of acetone and provide direct evidence of the valence state dynamics occurring.

УДК 22.2.6

V.G.Baryshevsky, A.A.Gurinovich, P.V. Molchanov

VOLUME FREE ELECTRON LASERS: RECENT EXPERIMENTAL STUDIES

Research Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University, 11 Bobruiskaya str., 220030, Minsk, Belarus bar@inp.bsu.by

A Volume Free Electron Laser (VFEL) is a specific kind of radiation generators, which use volume multi-wave distributed feedback [1-4]. A particular type of VFELs exploits a "grid" photonic crystal formed by periodically strained threads (either dielectric [5] or metallic ones [6-9]) as a volume resonator.



Fig. 1. VFEL with photonic crystal as a volume resonator

Wave propagation through photonic crystals is the subject of numerous studies, both theoretical and experimental (see, for example, [10-13]). The "grid" photonic crystal made of metal threads has been thoroughly examined theoretically [6,7] and tested experimentally [8,9]. It is shown to be almost transparent to electromagnetic waves within the frequency range from gigahertz to terahertz and stable to heating by the electron beam. Different designs of the photonic crystal made of tungsten threads are analyzed and applied for VFEL lasing: "grid" photonic crystals with a constant period [6-9] in a cylindrical waveguide, grid" photonic crystals with a spatially variable period [15-18].

Recent experimental studies of a Volume Free Electron Laser with photonic crystals of different types are discussed.

- [1] V.G.Baryshevsky, "Volume Free Electron Lasers" *NIM A*, 2000, vol.445, pp.281-282; LANL e-print archive physics / 9806039.
- [2] V.G.Baryshevsky, K.G.Batrakov, A.A.Gurinovich, I. Ilienko, A. Lobko, V. Moroz, P. Sofronov, and V. Stolyarsky, "First Lasing of Volume FEL (VFEL) at Wavelength Range $\lambda \sim 4-6$ mm" NIM A 483 (2002) 21.
- [3] V.G.Baryshevsky, K.G.Batrakov, A.A.Gurinovich, I. Ilienko, A. Lobko, V. Moroz, P. Sofronov, and V. Stolyarsky, "Progress of the Volume FEL (VFEL) experiments in millimeter range" NIM A, 507 (2003) 137-140.
- [4] Sher Alam, M. O. Rahman, C. Bentley and M. Ando "Basics of Surface and Volume

FEL's", APAC'01, Beijing, China, THP069, p.277, http://www.JACoW.org.

- [5] V.G.Baryshevsky, K.G.Batrakov, I.Ya.Dubovskaya, et al., NIM 393A (1997) 71.
- [6] V.G.Baryshevsky, A.A.Gurinovich, "Electrodynamical properties of a "grid" volume resonator" LANL e-print archive: physics/0409107.
- [7] V.G. Baryshevsky, A.A. Gurinovich, "Spontaneous and induced parametric and Smith– Purcell radiation from electrons moving in a photonic crystal built from the metallic threads" NIM B 252 (2006) 92.
- [8] V.G. Baryshevsky, K.G.Batrakov, N.A.Belous, A.A.Gurinovich, A.S.Lobko, P.V.Molchanov, P.F.Sofronov, V.I.Stolyarsky, "First observation of generation in the backward wave oscillator with a "grid" diffraction grating and lasing of the volume FEL with a "grid" volume resonator", LANL e-print archive: physics/0409125.
- [9] V.G. Baryshevsky, N.A. Belous, A.A. Gurinovich, A.S. Lobko, P.V. Molchanov, V.I. Stolyarsky, "Study of the generation intensity in the backward wave oscillator with a "grid" diffraction grating as a function of the grating length", FEL'06, Berlin, August 2006, TUPPH012, p.331, http://www.JACoW.org; LANL e-print arXiv: physics/0605122.
- [10] A. L. Pokrovsky and A. L. Efros, Phys. Rev. B 65, 045110 (2002).
- [11] A. L. Pokrovsky, Phys. Rev. B 69, 195108 (2004).
- [12] E. I. Smirnova, C. Chen, M. A. Shapiro et al., J. Appl. Phys. 91(3), 960 (2002).
- [13] E. I. Smirnova and C. Chen, M. A., J. Appl. Phys. 93(10), 5859 (2003).
- [14] V.G. Baryshevsky, A.A. Gurinovich "Generation of radiation in free electron lasers with diffraction gratings (photonic crystal) with the variable spacial period", LANL e-print arXiv: physics/0608068.
- [15] V.G. Baryshevsky, A.A. Gurinovich "Electrodynamical properties of a Volume Free Electron Laser with a "grid" volume resonator" FEL'06, Berlin, August 2006, TUPPH013, p.335, http://www.JACoW.org
- [16] V.G.Baryshevsky, N.A. Belous, A.A. Gurinovich, V.A. Evdokimov, P.V. Molchanov, A.V. Oskin, P.F. Safronov "Experimental Study of Volume Free Electron Laser using a "grid" photonic crystal with variable period" FEL 2007, Novosibirsk, Russia, August 2007, THAAU03, p.496, http://www.JACoW.org
- [17] V.G.Baryshevsky, P.V. Molchanov "Volume Free Electron Laser with a "Grid" Photonic Crystal in a Cylindrical Waveguide", Acta Physica Polonica A, 115 (2009) 971.
- [18] V. Baryshevsky, N. Belous, A. Gurinovich, E. Gurnevich, V. Evdokimov, P.Molchanov "Volume Free Electron Laser with a "Grid" Photonic Crystal with Variable Period: Theory and Experiment "FEL'09, Liverpool, August 2009, MOPC49, p.134, http://www.JACoW.org

S. Nkambule, N. Elander, Å. Larson

DIFFERENTIAL AND TOTAL CROSS SECTIONS FOR MUTUAL NEUTRALIZATION IN H⁺ AND H⁻ COLLISIONS.

¹ Department of Physics, Stockholm University, SE-106 91 Stockholm, Sweden <u>sifiso.nkambule@fysik.su.se</u>

An *ab initio* fully quantum study is applied to study the mutual neutralization reaction of hydrogen ions given by

 $H^+ + H^- \rightarrow H(n) + H.$

The reaction is studied for all possible hydrogen isotopes.

We numerically solving the coupled Schrödinger equation for the nuclear motion, using a Johnson's log-derivative method [1,2,3]. The seven lowest ${}^{1}\Sigma_{g}^{+}$ and six lowest ${}^{1}\Sigma_{u}^{+}$ electronic states are included. These are the states associated with the $n \leq 3$ asymptotic limits.

The total and differential cross sections are computed as well as the branching ratios. The computed results are compared with experimental data when available.

[1]. M. Stenrup, Å. Larson and N. Elander, Phys. Rev. A. 79, 012713 (2009).

[2] B. R. Johnson, J. Comput. Phys. 13, 445 (1973).

[3] D. E. Manolopous, M. J. Jamieson, and A. D. Pradhan, J. Comput. Phys, 105, 169 (1993).

УДК 621.373

R. Chulkov¹, V. Goryashko², R.T. Jongma³, W.J. van der Zande³, and V. Zhaunerchyk²

INTERPLAY BETWEEN CAVITY MODES IN A SHORT-PULSE THZ FEL

¹ B.I. Stepanov Institute of Physics, National Academy of Science of Belarus, Nesalezhnasti Ave. 68, 220072 Minsk, Belarus r.chulkov@dragon.bas-net.by

² Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, SE-751 20 Uppsala, Sweden vitali.zhaunerchyk@physics.uu.se

³ Radboud University Nijmegen, Institute for Molecules and Materials, Heyendaalseweg 135, NL-6525 AJ, Nijmegen, The Netherlands w.vanderzande@science.ru.nl

Free Electron Lasers (FELs) are powerful versatile light sources in which the coherent light is emitted by relativistic electrons that propagate through a periodic magnetic field created by an undulator. THz FELs are highly relevant for the bio-molecular research. Such FELs are often equipped with waveguides to diminish diffraction losses of the generated emission. Operation of short-pulse waveguided FELs is significantly affected by the waveguide dispersion. The interplay of the guided modes can lead to undesired effects, and one of those is spectral gaps. In this paper we numerically investigate such mode interplay in a short-pulse THz FEL. A FEL cavity in our study is considered to consist of two parallel plates located between cylindrical mirrors with outcoupling rectangular slit in one of them. The numerical data demonstrate that several hybrid guided modes with different Hermite indices can be generally excited in a FEL cavity. The FEL output power depends on the relative phase of these modes and can be down to zero at some phase values. However, excitation of the high-order modes can be suppressed by proper adjustment of the cavity length. The suppression is feasible due the waveguide dispersion and difference in the mode resonance frequencies that provides synchronizing the round-trip time of the optical pulses with the repetition rate of the electron bunches only for the fundamental mode.

УДК 53

Матс Ларшон

НОБЕЛЕВСКАЯ ПРЕМИЯ ПО ФИЗИКЕ 1962 ГОДА: ЛЕВ ЛАНДАУ

Научный центр «АлбаНова», Стокгольмский университет, 106 91 Стокгольм, Швеция <u>ml@fysik.su.se</u>

В 1962 г. Нобелевская премия по физике была присуждена Льву Ландау за «пионерские теории в физике конденсированных сред, в особенности жидкого гелия». Более пятидесяти лет прошло с тех пор, как Ландау получил Нобелевскую премию, и его выдвижения и работы, повлекшие к награде, уже не являются тайной. Трагическая автокатастрофа, случившаяся 7 января 1962 г., не позволила Ландау лично получить премию 10 декабря 1962 г. в Стокгольме.

Ландау получил два выдвижения на премию 1962 г: одно от Вернера Гейзенберга, написанное на немецком, и одно от Джона Пеллама из Калифорнийского технического института. Пеллам выделил работу Ландау по сверхтекучести гелия, в то время как Гейзенберг также включил его работу по квантовой теории диамагнетизма и его труды по квантовой теории поля. Гейзенберг выдвигал Ландау и ранее, в 1959 и 1960 гг.

Представление, написанное совместно Нильсом Бором, его сыном Оге Бором (Нобелевская премия по физике в 1975 г.), Бэном Моттельсеном (Нобелевская премия по физике в 1975 г.), Кристианом Мёллером и Леоном Розенфельдом и датированная 30 января 1962 г., прибыло в Стокгольм чересчур поздно и не могло быть выдвинуто на премию 1962 г. (представление прибыло в Стокгольм в конце февраля; причина задержки неизвестна). Письмо, написанное на датском языке, заканчивается сложной, но прекрасной оценкой заслуг Ландау, которая в свободном переводе на русский звучит следующим образом:

«Как следует из мотиваций, подчеркнутых в нашем представлении, мы не ставили своей целью выделить какой-либо из многих важных вкладов Ландау в физическую науку, но стремились сделать акцент на том, что он в работе за работой обогащал физику нашего времени путем, сравнение с которым трудно подобрать, и который напоминает то, как такие ученые, как Лорд Рэлей и Лорентц с их исключительными аналитическими способностями разъясняли проблемы, возникавшие в науке их времени».

Хотя это не ясно из текста представления, можно предположить, что письмо было написано Нильсом Бором лично.

СОДЕРЖАНИЕ

Научная биография Б.И.Степанова	4
Симпозиум, посвященный 100-летию Б.И. Степанова	
Н.А.Поклонский. Инверсные состояния и процессы в полупроводниках	7
А.Л.Толстик. <i>Сингулярная динамическая голография</i>	9
В.А.Савва. Борис Иванович Степанов у истоков лазерной физики в Беларуси	_ 11
Физика фундаментальных взаимодействий, теоретическая физика	
И.Д.Феранчук, А.И.Бенедиктович, А.В.Леонов, К.Ф.Кривулько. Импульсное параметрическое рентгеновское излучение от электронных сгустков в кристалле	14
В.В.Тихомиров, А.И.Сытов, А.А.Голованов. Новые возможности управления пучками заряженных частиц при помощи кристаллов	_15
В.В.Гавриловец, В.В.Тихомиров. Моделирование магнитокумулятивного генератора с предельными параметрами работы	_17
В.В.Андреев, Н.В.Максименко, О.М.Дерюжкова. Ковариантные уравнения движения в электромагнитном поле частиц спина ½ с учетом поляризуемостей	_19
И.А.Иващенко. Физические механизмы и модели электромагнитного взаимодействия низколетящего летательного аппарата с поверхностью Земли	21
В.В.Андреев. Область константы КХД ниже 1 ГэВ в пуанкаре-ковариантной модели	23
Г.Ю.Дробышев, М.В.Коржик, А.С.Лобко. Особенности детектирования гамма- излучения и лептонов в экспериментах по тестированию Стандартной модели	_25
С.М.Кучин, Н.В.Максименко. Электрическая поляризуемость заряженных пионов в кварковой модели с потенциалом, представляющим собой сумму кулоновского и осцилляторного потенциалов	27
И.С.Сацункевич, Д.В.Шёлковый. О полных сечениях рождения пары мюонов посредством двухфотонного механизма в протон-протонных столкновениях при энергии пучка 3,5 ТэВ	29
А.А.Хрущинский, С.А.Кутень, Л.Бабичев, К.Веренич. Об улучшении динамических характеристик детектора прямой зарядки	31
Т. Н. Корбут, Э. А. Рудак. Описание переходных процессов в реакторе в рамках модели рождения и гибели частиц с учётом мгновенных и запаздывающих нейтронов	<u>33</u>
В.В.Сорокин. Гидродинамика вращающегося плотного слоя микротвэльного ядерного топлива с водяным теплоносителем	<u>35</u>
В.В.Тихомиров, Ю.АЦелков. <i>Релятивистская аккреция ядерного вещества на</i> многомерную первичную черную дыру	<u> 37 </u>
Ю.П.Выблый, А.А.Леонович, А.Н.Тарасенко. Скалярно-тензорная теория гравитации в пространстве Минковского	_ 39
С.Л.Черкас, В.Л.Калашников. Может ли масштабный фактор осциллировать	_ 41
А.М.Крот. Объяснение форм планетарных орбит с учетом осциллирующей силы Альвена и оценка углового смещения перигелия Меркурия на основе статистической теории гравитирующих космогонических тел	43
Е.М.Овсиюк, О.В.Веко, К.В.Казмерчук, А.И.Шелест, В.М.Редьков. Квантовая механика частицы со спином 1 в потенциале магнитного монополя, нерелятивистское приближение	_ 45

А.В.Остапенко. Классификация решений релятивистского уравнения типа Бете- Солпитера для связанных состояний двух частиц47
Е.М.Овсиюк, О.В.Веко. О решении уравнения Шредингера для частицы в электрическом поле в сферическом пространстве Римана49
В.В.Тригук, И.Д.Феранчук, А.В.Леонов, А.Л.Толстик. Регулярная теория возмущений для учета обменных и корреляционных эффектов в многоэлектронных системах51
V.Kapshai, K.Shilyaeva, Y.Grishechkin. <i>Resonance states spectrum and quantum field theory</i> equations for the two-particle systems53
Ю.А.Гришечкин, В.Н.Капшай. <i>Релятивистский спектр ортопозитрония в</i> квантовополевой модели с потенциалом однобозонного обмена55
V.N.Kapshai, S.I.Fialka. Numerical solution of relativistic equations for bound p-states of two-particle systems57
О.В.Веко, Е.М.Овсиюк, В.В.Кисель, В.М.Редьков. Квантовая механика частицы со спином 1 в нерелятивистском приближении на фоне пространства Лобачевского59
В.В.Андреев, К.С.Бабич, Е.С.Чеботарева. Критическое значение кулоновского потенциала в релятивистской связанной системе61
В.В.Кудряшов, А.В.Баран. Решение радиального уравнения Шрёдингера для потенциала морса в модифицированном вариационно-квазиклассическом приближении63
Е.А.Ушаков. Движение вектора, ассоциированное с глобальным циклом65
А.М. Ильянок. Фемтотехнологии. Первый шаг - атом водорода 66
Ю.А.Курочкин, Д.В.Шёлковый, И.П.Боярина. О частном случае разделения переменных центра масс и относительного движения в задаче двух тел на сфере68
В.Ф.Миненко, К.А.Веренич, С.А.Кутень, А.А.Хрущинский, С.В.Корнеев, И.Г.Тарутин. Построение Монте-Карло модели линейного ускорителя электронов типа Clinac для оценки эффективности защиты от фотонейтронов70
Лазерная физика
И.А.Ходасевич, А.А.Корниенко, Е.Б. Дунина, А.С. Грабчиков. <i>Нелинейные явления в</i> кристалле KGW при возбуждении непрерывным излучением73
В.В.Кабанов, Г.И.Рябцев. Современные лазерные системы с диодной накачкой: физические основы и применения75
Н.В.Баковец, В.А.Длугунович, С.В.Никоненко, Д.В.Скумс, О.Б.Тарасова. Эталонная база республики беларусь в области фотометрии77
В.Н.Чижевский. Управление оптическими переключениями в бистабильном вертикально излучающем лазере токовой модуляцией79
А.Л.Уласевич, А.В.Горелик, А.А.Кузьмук, В.С.Старовойтов. Применение диодных лазеров, генерирующих излучение в ближней ИК-области спектра, и компактных резонансных оптико-акустических камер для спектроскопических измерений в газах81
А.М.Гончаренко, Г.В.Синицын, А.В.Ляхнович, В.Л.Малевич. Терагерцовый спектрометрический комплекс сиспользованием фотопроводящих антенн и Yb:KYW лазера82
В.М.Катаркевич, А.Н.Рубинов, Т.Ш.Эфендиев. Субнаносекундный лазер на красителях со светоиндуцированной распределенной обратной связью на основе пространственной решетки дихроизма усиления84
Г.Е.Малашкевич, Н.В.Голубев, Е.Х.Мамаджанова, В.Н.Сигаев, И.В.Прусова, И.И.Сергеев, А.А.Суходола. Оксидное стекло с большим минимальным расстоянием между редкоземельными активаторами86

С.С.Ануфрик, А. П.Володенков, К.Ф.Зноско. применение XECL-лазера для абляционной обработки зубной ткани	
С.В.Васильев, А.Ю.Иванов. Воздействие импульсного лазерного излучения на образец, находящийся в жидкости	90
П.А.Лойко, В.В.Филиппов, К.В.Юмашев, Н.В.Кулешов, А.А.Павлюк. Оптическая атермальность лазерных кристаллов двойных вольфраматов $KRE(WO_4)_2$ ($RE = Gd, Y, Lu$)	91
П.П.Трохимчук. Релаксационная оптика. необходимость синтеза и проблемы развития и применения	93
В.В.Паращук. Оптимизация методов позиционирования чипов в процессе сборки мощных диодных лазеров	95
А.Н.Чумаков, И.С.Никончук, Н.А.Поклонский, Н.И.Горбачук, В.Е.Обухов. Лазерная модификация алмазоподобных углеродных пленок с образованием электропроводящих структур	97
С.С.Ануфрик, В.Ч.Белаш, С.В.Васильев, А.Ю.Иванов, А.В.Копыцкий. Термодиффузия металлов при неразрушающем импульсном лазерном воздействии	99
С.В.Шалупаев, А.Н.Сердюков, Ю.В.Никитюк, А.А.Середа. Анализ двулучевого лазерного термораскалывания в рамках линейной механики разрушения.	_ 100
Е.Б.Шершнев, Ю.В.Никитюк, С.И.Соколов. Моделирование процесса двухлучевой лазерной сварки кварцевого стекла	102
А.И.Водчиц, В.А.Орлович, П.А.Апанасевич. Нелинейно-оптические свойства кристаллов ванадатов	103
В.Н.Белый, Н.А.Хило, С.Н.Курилкина, Н.С.Казак. Спин-орбитальное преобразование углового момента бесселевых световых пучков в кристаллах	105
Г.С.Митюрич, В.В.Свиридова, А.Н.Сердюков. Лазерная фотоакустическая спектроскопия гиротропных низкоразмерных структур	107
V.N.Kapshai, A.A.Shamyna, V.V.Kondratjuk. <i>Resonance structure of the scattering cross sections in the mie problem and the amplitudes in the complex plane</i>	108
С.Ф.Кукин, А.С.Малоштан, А.С.Кукин, В.В.Жарский, О.Г.Девойно, А.Н.Лебедев, И.В.Емельянович, Н.В.Спиридонов. Модернизация оптической системы лазерных технологических установок для повышения эффективности и качества процессов лазерного термоупрочнения	110
С.А.Назаров, Д.В.Горбач. Четырех- и шестиволновые взаимодействия гауссовых и сингулярных пучков в растворе красителя родамин 6Ж	112
Д.В.Горбач, О.Г.Романов, А.П.Сухоруков, А.Л.Толстик. Взаимодействие гауссовых и сингулярных световых пучков в средах с тепловой нелинейностью	114
А.А.Казак, А.Л.Толстик, Е.А.Мельникова. Управление поляризацией световых пучков с помощью ЖК-элементов	116
В.А.Ковтун–Кужель., А.Н.Понявина, Р.А.Дынич. Влияние диэлектрической проницаемости цилиндров на их ближнеполевые характеристики	_ 117
К.Н.Каплевский, М.П.Самцов, И.М.Гулис, Д.С.Тарасов, А.Е.Радько, К.А.Шевченко. Возможности цифровой фотокамеры для мультизональной съемки	<u> 119 </u>
А.В.Макаревич, М.В.Дубина, В.В.Шепелевич, С.Ф.Ничипорко, П.И.Ропот, С.М.Шандаров. Голографический интерферометр на основе фоторефрактивных кристаллов для контроля изменения толщины покрытий оптических элементов	_ 121

В.В.Шепелевич, М.В.Дубина, А.В.Макаревич, С.М.Шандаров. Исследование ориентационных зависимостей дифракционной эффективности смешанных голограмм в кристалле ВТО	123
В.А.Лойко, А.В.Конколович, А.А.Мискевич. Исследование рассеяния света пленками капсулированных полимером жидких кристаллов с помощью метода Вентцеля- Крамерса-Бриллюэна	125
Ж.В.Колядко, В.В.Шепелевич, С.Ф.Ничипорко. Влияние внешнего электрического поля на распространение темного нечетного пучка в фоторефрактивном кристалле Bi ₁₂ SiO ₂₀ .	126
С.В.Солоневич, А.А.Рыжевич, Н.С.Казак. <i>Метод формирования оптической биловушки</i> С.Н.Курилкина, В.Н.Белый, Н.И.Мухуров, А.А.Минько, <i>Направленная дифракиия в</i>	128
слоисто-периодических средах	<u>1</u> 30
Н.С.Казак, Н.А.Хило, С.В.Солоневич, А.А.Рыжевич. Преобразователь лазерного излучения на основе двуосного кристалла	132
Р.А.Власов, В.М.Волков, Д.Ю.Дедков. Особенности самофокусировки фемтосекундных вихревых оптических импульсов в воздухе	134
С.В.Солоневич, А.А.Рыжевич, В.Е.Лепарский, А.Г.Смирнов. Отражение лазерного излучения грубообработанной цилиндрической поверхностью.	136
В.А.Лойко, В.Я.Зырянов, А.В.Конколович, А.А.Мискевич. Пропускание и угловая структура света, рассеяного каплями капсулированных полимером жидких кристаллов с неоднородными граничными условиями.	138
Т.А.Корниенко, Ю.И.Миксюк, К.А.Саечников, А.Л.Толстик. Электрооптические эффекты и самовоздействие гауссовых и сингулярных световых пучков в кристаллах Bi ₁₂ TiO ₂₀ и Bi ₁₂ SiO ₂₀ .	139
В.А.Савва. Квантовые осцилляторы как модели лазерного возбуждения квазирезонансных сред	141
О.Федотова, О.Хасанов, Г.Русецкий, Ж.Дежерт, Э.Фрез. <i>Многогорбые терагерцовые симултоны в молекулярных средах</i>	143
А.Б.Михалычев, Д.С.Могилевцев, С.Я.Килин. Методы когерентной и некогерентной защиты неклассических состояний оптического поля, генерируемых нелинейными когерентными потерями.	145
Д.В.Новицкий. Влияние формы огибающей субпериодического импульса света на динамику двухуровневой среды	147
Р.А.Власов, А.М.Лемеза, М.Г.Гладуш. Резонансная флуоресценция оптически плотных ансамблей трёхуровневых резонансных центров в условиях автоколебаний населенности энергетических уровней.	149
О.Х.Хасанов, Г.А.Русецкий. Генерация лазеров на квантовых точках: влияние эффектов локального поля	151
С.Я.Килин, В.П.Степанов. Квантовые статистические свойства излучения одноатомного трехуровневого лазера	153
Л.П.Сирина. Киральная и акиральная симметрия в динамике анизотропных лазерных систем	<u>155</u>
Спектроскопия	
Б.М.Джагаров. Фотосенсибилизированное образование и излучательная релаксация возбуждённого электронного ${}^{I} \Delta_{g}$ состояния молекулярного кислорода	158

Возоужоенного электронного Д_в состояния молекулярного кислороои______138 Е.И.Сагун, Э.И.Зенькевич, В.Н.Кнюкшто, Н.В.Ивашин. Структура и механизмы межхромофорных взаимодействий в мультимолекулярных комплексах, основанных на тетрапиррольных макроциклах______160

А.С.Старухин. Тонкоструктурная низкотемпературная спектроскопия молеку использованием перестраиваемых лазеров на красителях	vл с 162
С.Н.Терехов. Спектроскопия резонансного и гигантского комбинационного рассе. света тетрапиррольных молекул	<i>яния</i> 164
С.Л.Бондарев, В.Н.Кнюкшто. Флуоресценция и фосфоресценция флавоноидов	165
Н.В.Ивашин, Е.Е.Щупак. Роль структурного фактора в формировании возбужден состояний и путей переноса электрона в фотосинтетических реакционных центрах	чных :167
С.В.Лепешкевич. Кинетика связывания молекулярного кислорода гемоглобином челов	зека 169
M.Kruk, V.Knyukshto, V.Savva, A.Starukhin, W.Maes, T.Ngo, W.Dehaen. <i>Optical prope</i> of the free base corroles	<i>erties</i> 171
A.Starukhin, A.Gorskii, S.Gawinkowski, L.Gladkov, N.Chizhova, N.Mamardashvilli, I.Scheblykin, J.Waluk. <i>Kesonance raman and IR spectra of Mg-porphyrazines</i>	
A.S.Starukhin, M.M.Kruk, O.L.Gladkova, I.Scheblykin. Spectral manifestation of diacid formation for octalkylporphyrins in fluorescence line narrowing spectra	
А.П.Блохин. Анизотропия люминесценции неравновесных ансамблей в газах	177
М.В.Корольков. Фотофрагментация ионов DCl+ в поле двух лазерных УКИ	179
В.С.Павлович. Флуктуации ориентационных взаимодействий, сольватохро безызлучательные переходы в растворах красителей. Достижения теорис перспективы	мия, и и 181
А.А.Шагинян, П.К.Акопян, Л.Г.Арсенян, А.Г.Погосян, В.СВихренко, Я.Г.Гр Конформационные и диффузионные свойства молекул поливинилспирта поливинилпирролидона в водном растворе	юда. и 182
В.В.Могильный, А.И.Станкевич, А.В.Трофимова, А.А.Муравский, А.А.Муравс Фоточувствительные полимеры для поляризационно-фазовой оптической запис ориентации жидких кристаллов	жий. <i>си и</i> 184
М.В.Бельков, С.Н.Райков. Разработка и применение мобильных лазерных спектрале анализаторов	ь <i>ных</i> 186
М.И.Маковийчук. Перспективы применения фликкер-шумовой спектроскопии экологического мониторинга окружающей среды	<i>для</i> 188
А.М.Людчик. Почему «ортогональная» спектроскопия лучше «дифференциальной»?	. <u> </u>
Г.А.Пицевич, О.В.Новиченок. 3D расчеты колебаний О-Н группы в комплексе трих	:лор-
уксусной кислоты и пиридиназотоксида в ацетонитриле	192
Г.А.Пицевич, Е.Ю.Слепцов. Ангармонический анализ горячих линий КР молекулы СН	₃ CN. 193
Г.А.Пицевич, И.Ю.Дорошенко, В.Е.Погорелов, О.Л.Рудая. Длинноволновые спектра ряда нормальных спиртов	<i>ы кр</i> 194
Г.А.Пицевич, И.Ю.Дорошенко, В.Е.Погорелов, О.Л.Рудая Исследование с помо матричной изоляции и DFT расчетов ИК спектров и структуры комплекса CH ₃ O CO ₂ .	щью Н И 195
С.В.Гапоненко, С.Г.Кожух. Компактный тестер на основе спектроско комбинационнного рассеяния	<i>onuu</i> 196
С.С.Ануфрик, В.Н.Комар, И.А.Лявшук, А.М.Ляликов Лазерные интерферометры производственного контроля качества оптических элементов	для 197
В.И.Журавлева. Лазерный эмиссионный спектральный метод диагностики матера при фазовом переходе	<i>иала</i> 198
В.И.Попечиц Неразрушающий контроль материалов и изделий с помо многокомпонентных растворов красителей	<u>щью</u> 200

Г.В.Синицын, М.А.Ходасевич. Определение октанового числа бензина с помощью хемометрической обработки спектров оптической плотности	_ 202
А.И.Комяк, Д.С.Умрейко, Е.В.Вилейшикова, А.П.Зажогин, С.Д.Умрейко Разработка лазерных ультра чувствительных методов определения урана в растворах методом лазерной искровой спектрометрии со сдвоенными лазерными импульсами	_ 204
Е.Б.Дунина, А.А.Корниенко, Л.А.Фомичева. Расчет спектроскопических характеристик иона Sm ³ + в кристалле LiNbO ₃ .	_ 206
А.И.Комяк, Д.С.Умрейко, Е.В.Вилейшикова, А.П.Зажогин, С.Д.Умрейко. Спектральные исследования фотохимического образования нанокомплексов урана переменной валентности в ацетоне с ДМСО	_ 208
Н.А.Борисевич, В.А.Поведайло, Д.Л.Яковлев. Спектры возбуждения флуоресценции струйно охлажденных оксалил галидов	_ 210
С.Н.Терехов, А.А.Квасюк, А.Ю.Панарин, И.А.Ходасевич, Г.К.Жавнерко, Я.В. Диченко, А.В.Янцевич, С.А.Усанов. Спектры гигантского комбинационного рассеяния цитохрома <i>P450 7B1 и его комплекса с дегидроэпиандростероном</i>	_ 212
А.П.Зажогин, А.И.Комяк, А.А.Сокольский, Д.С.Умрейко, М.Б.Шундалов. Строение молекулярных конформеров триоксида урана	_ 214
И.В.Станишевский, К.Н.Соловьев, С.М.Арабей, В.А.Чернявский. Фейдинг и антифейдинг флуоресценции фотостойких органических пигментов	_ 216
Т.Ф.Райченок, И.В.Скорняков, Г.Б.Толсторожев, О.И.Шадыро, О.К.Базыль, В.Я.Артюхов, Г.В.Майер. Электронная структура и спектроскопические свойства биологически активных производных бензойной кислоты.	218
Физика наноструктур	
Д.Коверко, Ф.Герлах, Д.Тойбер, Э.Зенькевич, К.фон Борцисковски. Временная динамика переноса энергии в режиме регистрации одиночных наноансамблей на основе квантовых точек CdSe/ZnS и органических хромофоров	221
А.П.Низовцев, С.Я.Килин, А.Л.Пушкарчук, В.А.Пушкарчук, С.А.Кутень, F.Jelezko. Сверхтонкие взаимодействия в системах $NV^{+13}C$ в алмазе: квантовохимическое моделирование и эксперимент	223
О.В.Буганов, А.Д.Замковец, А.Н.Понявина, А.Д.Широканов, С.А.Тихомиров. Плазмон- зависимая модификация спектрально-кинетических свойств тонких пленок фталоцианина меди в присутствии наночастии серебра	225
С.Н.Курилкина, В.Н.Белый, Н.С.Казак. Генерация бесселевых плазмон - поляритонов в тонкой металлической пленке	227
А.В.Агашков, В.В.Филиппов. Поляризационные эффекты при отражении света от субмикронных металлических структур	229
Н.В.Плешко, В.И.Крот, Г.В.Крылова, В.П.Егорова, А.С.Егоров. Микроскопия комплексов днк с углеродными нанотрубками	_ 231
А.П.Войтович, В.С.Калинов, М.В.Коржик, Л.П.Рунец, А.П.Ступак. Поверхностные дефекты в кристаллах фторида лития	_233
Г.С.Бокун, В.С.Вихренко, Р.Н.Ласовский. Получение наноструктурированных состояний в решеточных системах	_235
В.В.Ковгар, Г.Е.Малашкевич, И.А.Ходасевич, Е.В.Пестряков . Антистоксова люминесценция Yb-, Yb-Ho- и Yb-Eu-содержащих кремнезёмных композитов	_237
А.П.Войтович, В.С.Калинов, Е.Ф.Мартынович, Л.П.Рунец, А.П.Ступак. Изомерия точечных дефектов в кристаллах фторида лития	_239

А.П.Войтович, В.С.Калинов, А.Н.Новиков, Л.П.Рунец, А.П.Ступак. Люминесцентные свойства поверхностных радиационных дефектов во фториде лития	_241
С.В.Лотарев, А.С.Липатьев, Н.В.Голубев, Е.С.Игнатьева, Г.Е.Малашкевич, А.В.Мудрый, Ю.С.Присеко, Р.Лоренци, А.Палеари, В.Н.Сигаев. <i>Наноструктуры с широкополосной ик люминесценцией, сформированные лазерным излучением</i>	243
В.К.Пустовалов, Л.Г.Астафьева, В.Фритче. Оптимальный термо-оптический параметр наночастиц при воздействии оптического излучения	. 245
А.В.Науменко, Н.А.Лойко, В.В.Кабанов. Свойства поверхностных плазмон- поляритонных мод микродисковых резонаторов	_247
А.Д.Замковец, А.Н.Понявина, Е.Е.Целеш. Оптические свойства планарных плотноупакованных плазмонных нанокомпозитов	249
В.М.Катаркевич, Ю.В.Крученок, А.Н.Рубинов, Т.Ш.Эфендиев. Спектрально- люминесцентные свойства желатиновой матрицы, допированной красителем и наночастицами серебра	<u>251</u>
Л.Г.Астафьева, Г.П.Леднева, В.К.Пустовалов. Спектральные зависимости оптических свойств двухслойных сферических наночастиц	253
А.Ю.Панарин, Y.L.Balachandran, С.Н.Терехов, S.Girija. Структурные и оптические свойства наночастиц золота и серебра, синтезированных с помощью природного биополимера пектина	255
I.V.Halets, A.L.Krauchonak, D.Shcharbin, M.Bryszewska. Luminescent analysis of the interaction between PAMAM dendrimers of 3^{rd} and 4^{th} generation and plasma proteins or cytosolic enzymes	_257
Физика твердого тела и полупроводников	
П.Аргиракис, Ж.Бискерт, В.С.Вихренко, П.Гиазицидис. Моделирование разделения зарядов в солнечных элементах на основе органических полупроводников	_260
А.П.Войтович, В.С.Калинов, Е.Ф.Мартынович, А.Н.Новиков, А.П.Ступак. <i>Распределение</i> радиационных дефектов в кристаллах фторида лития по расстояниям между ними	_262
А.Н.Шимко, Г.Е.Малашкевич, Д.М.Фреик, Л.И.Никируй, И.А.Свито. Влияние условий получения тонких плёнок PbTe и PbTe:Вi на их спектральные и термоэлектрические свойства	_264
В.С.Кузьмин, В.М.Колесенко. Зависимость интенсивности одноимпульсного ядерного эха от частоты возбуждающего импульса в ферримагнетиках	266
М.В.Гольцев, Л.В.Кухаренко, М.В.Гольцева. Использование ACM при исследовании поверхностей многокомпонентных ионно-плазменных покрытий и ионно-легированных материалов	_268
О.С.Васьков, В.К.Кононенко, В.С.Нисс, А.Ф.Керенцев, И.И.Рубцевич, Я.А.Соловьев, А.С.Турцевич. Исследование качества посадки кристаллов мощных МОП- транзисторов	270
Я.Г.Грода. Коэффициенты диффузии решеточных флюидов при учете взаимодействия в седловой точке	272
В.Т.Ерофеенко, А.И.Урбанович. Пространственные эффекты при транспортировке ионных пучков через диэлектрические капилляры	<u>2</u> 74
Н.А.Аржанова, М.И.Маковийчук, А.В.Проказников. Формирование фрактальных пористых кластеров в кремнии	276
М.В.Артемьев, А.В.Прудников, М.В.Ермоленко, Л.И.Гуринович, С.В.Гапоненко. Электрооптический отклик квантоворазмерных нанопластин селенида кадмия	278

А.И.Клындюк, И.В.Мацукевич, Н.С.Красуцкая, Л.Е.Евсеева, С.А.Танаева, Е.А.Чижова. Эффективные термоэлектрики на базе слоистых кобальтитов	280
В.И.Лапаник, В.С.Безбородов, С.Н.Тимофеев, В.Хаазе. Быстродействующий эффект на основе хиральных структур	282
И.С.Ташлыков, А.И.Туровец. Морфология и смачиваемость поверхности системы Мо/стеклянная подложка, формируемой методом SIAD	284
Физика плазмы	
В.С.Бураков, А.В.Буцень, М.И.Неделько, А.А.Невар, Н.В.Тарасенко. Плазменно- лазерные методы для генерации наночастиц в жидкостях	287
В.В.Кабанов, А.Р.Мкртчян, В.П.Кривобоков, А.С.Абраамян, В.В.Ажаронок. Возможность создания интенсивных монохроматических источников света на основе акустоплазмы низкого давления	289
О.Федотова, О.Хасанов, Т.Смирнова. Фемтосекундные вихревые импульсные пучки высокой интенсивности в средах с фокусирующими и дефокусирующими нелинейностями	291
В.И.Архипенко, С.М.Згировский, А.А.Кириллов, Е.А.Сафронов, Л.В.Симончик. Диагностика продуктов конверсии водородосодержащих веществ	293
В.В.Ажаронок, И.И.Филатова, С.В.Гончарик, Н.И.Чубрик, А.В.Холенков, А.С.Абраамян, А.Р.Мкртчян. Изменения мощности излучения электроразрядного CO ₂ — лазера инициируемыми в активной среде акустическими полями	295
И.И.Филатова, Ф.М.Трухачев, В.В.Ажаронок, Н.И.Чубрик. Исследование динамики наночастиц в послесвечении пылевой плазмы ВЧ разряда	297
В.И.Архипенко, Е.З.Гусаков, Л.В.Симончик, М.С.Усачёнок. Исследование рассеяния СВЧ волны в верхнем гибридном резонансе	299
В.И.Архипенко, С.М.Згировский, А.А.Кириллов, Е.А.Сафронов, Л.В.Симончик. Источники плазмы атмосферного давления на постоянном токе в технологиях конверсии водородосодержащих веществ	301
А.Р.Мкртчян, А.С.Абраамян, В.В.Ажаронок. <i>К разработке акустоплазменного СО</i> ₂ - лазера	303
А.А.Кириллов, А.В.Павлова, Е.А.Сафронов, Л.В.Симончик, Н.В.Дудчик. Медицинские приложения неравновесной плазмы атмосферного давления	305
С.С.Ануфрик, А.П.Володенков, К.Ф.Зноско. Моделирование частотного режима работы XeCl-эксилампы барьерного разаряда	307
М.С.Усачёнок, Л.В.Симончик. Одномерная плазменная электромагнитная полосовая структура	309
Е.З.Гусаков, В.А.Михаленко, Л.В. Симончик, Ф.М.Трухачев. Численное моделирование распадной параметрической неустойчивости в неоднородной плазме	311
А.С.Абраамян, К.Г.Саакян. Вольт-кулонная характеристика в акустоплазме и модуляция диэлектрической проницаемости	313
В.С.Бураков, А.В.Буцень, М.И.Неделько, Н.В.Тарасенко. Лазерно-плазменный реактор для синтеза наноразмерных частиц	315
А.Г.Будай, Я.И.Дидковский, В.П.Кныш, М.Н.Коваленко, А.А.Минько, М.Р.Последович. Многоканальный спектрометр с индуктивно-связанной микроволновой плазмой	317
Н.Н.Науменко, А.М.Лыков. Применение низкотемпературной плазмы в некоторых технологических процессах	319

Е.С.Воропай, А.Р.Фадаиян, С.В.Проценко, А.П.Зажогин. Спектральные исследование процессов образования нитридов титана в плазме при воздействии на титан сериями сдвоенных лазерных импульсов	
А.Г.Мкртчян, А.С.Абраамян, В.П.Кривобоков, В.В.Ажаронок. Об акустоплазменном лазере	
Био-медицинская физика	
В.Ю.Плавский, Н.В.Барулин, А.И.Третьякова, А.В.Микулич, Л.Г.Плавская, А.С.Грабчиков, И.А.Ходасевич, В.А.Орлович. Фотобиологические реакции, индуцируемые прямым возбуждением молекулярного кислорода в ИК полосу поглощения	<u>326</u>
Г.Б.Толсторожев, И.В.Скорняков, М.В.Бельков, О.И.Шадыро. Оптико-физические технологии диагностики биологической активности кислородсодержащих ароматических соединений	<u>_</u> 328
A.S.Stasheuski, S.V.Lepeshkevich, M.V.Parkhats, V.A.Galievsky, B.M.Dzhagarov. <i>Does photodissociation of molecular oxygen from hemoglobin and myoglobin yield singlet oxygen?</i>	330
A.V. Pisliakov and Yuji Sugita Mechanism of proton transfer in cytochrome C oxidases and nitric oxide reductases	332
Е.С.Жарникова, А.С.Сташевский, М.В.Пархоц. Влияние диэлектрических свойств среды на излучательную и безызлучательную константы скорости дезактивации синглетного кислорода в жидких растворах.	<u>333</u>
А.П.Иванов, В.В.Барун. Аналитический учет проявления кооперативных эффектов в показателе поглощения цельной крови	<u>335</u>
Г.А.Залесская, Л.Г.Астафьева. Изменение показателей оксигенации крови при фотогемотерании	337
С.А.Лысенко, М.М.Кугейко. Экспересс-анализ компонентного состава цельной крови	<u>3</u> 39
Г.Б.Толсторожев, И.В.Скорняков, В.И.Пехньо, А.Н.Козачкова, Н.И.Царик, Н.И.Шарыкина. ИК спектроскопия в диагностике и контроле лечения злокачественных новообразований	<u>_</u> 340
В.А.Решетов, Ж.Гаррье, Л.Бездетная, В.П.Зорин. Применение оптических методов для анализа распределения липосомальных фотосенсибилизаторов в васкулярной системе в предклинических животных моделях	342
Г.И.Желтов, О.Г.Романов, Г.С.Романов. <i>Термооптическое возбуждение акустических</i> импульсов в биотканях под действием импульсного лазерного излучения	344
А.В.Аладов, С.Б.Бирючинский, М.В.Дубина, А.Л.Закгейм, М.Н.Мизеров. Полихромный светодиодный динамически управляемый светильник для хирургии	<u>346</u>
С.Б.Кашевский. Простая аналитическая модель объемной иммуномагнитной сепарации в поле постоянного цилиндрического магнита	<u>348</u>
Б.Э.Кашевский, С.Б.Кашевский, В.С.Кореньков, Т.И.Терпинская, В.С.Улащик. Разработка и апробация in-vivo оптимальной системы локальной магнитной гипертермии злокачественных опухолей	350
В.А.Кириллов. Реконструкция доз облучения методом ЭПР дозиметрии эмали зубов	352
В.В.Лукьяница. Первичный механизм воздействия КВЧ-излучения на биообъекты, обусловленный структурными перестройками воды	<u>354</u>
С.А.Лысенко, М.М.Кугейко. Количественная мультиспектральная эндоскопия слизистых оболочек	<u>356</u>
Л.В.Кухаренко, С.А.Чижик, Е.С.Дрозд, С.В.Сыроежкин, М.В.Гольцев, Л.Г.Гелис, Е.А.Медведева, И.В.Лазарева. <i>АСМ в диагностике функциональной активности тромбоцитов</i>	<u>357</u>

Г.Б.Толсторожев, М.В.Бельков, И.В.Скорняков, О.И.Шадыро, С.Д.Бринкевич, С.Н.Самович. Биологическая активность гидроксилсодержащих производных бензальдегида и ее проявления в ИК спектрах.	<u>359</u>
Ю.М.Гармаза, Н.М.Козлова, Е.И.Слобожанина. Биофизические характеристики, отражающие взаимодействие ионов цинка с поверхностью мембран эритроцитов человека.	<u> 361 </u>
М.П.Патапович, И.Д.Пашковская, Лэ Тхи Ким Ань, Н.И.Нечипуренко, Ж.И.Булойчик, А.П.Зажогин. Исследование динамики метаболизма макроэлементов в организме больных (ОНМК) методом лазерной атомно-эмиссионной спектрометрии волос по их длине	363
Г.И.Рубан, Д.В.Маринич, Н.В.Гончарова, В.А.Лойко. Исследование мононуклеаров для выявления инфицированных индивидуумов и больных с острой лейкемией	365
Я.В.Диченко, А.В.Янцевич, С.А.Усанов. Исследование термодинамической стабильности белковой глобулы мутантной формы СҮР7В1 Arg486Cys	<u> 3</u> 67
К.А.Веренич, В.Ф.Миненко, С.А.Кутень, А.А.Хрущинский. Конверсионные коэффициенты для оценки активности йода-131 в щитовидной железе с помощью дозиметров	369
Ю.Л.Денисова, Н.Б.Базылев, С.П.Рубникович, Н.А.Фомин. Лазерная диагностика мягких и твёрдых биотканей в ортопедической стоматологии	371
Н.А.Немкович, Ю.Г.Шанько, А.Н.Рубинов, А.Н.Собчук, Ю.В.Крученок, А.И.Чухонский. Лазерно-оптическая диагностика аденомы гипофиза	373
В.А.Мансуров, Ю.В.Сытый. Местное гидравлическое сопротивление при угловых аневризмах	<u> 3</u> 75
М.М.Кугейко, И.А.Кобак, А.М.Лисенкова, С.А.Лысенко, Т.А.Железнякова, Н.М.Орел, В.А.Щербатюк, В.М.Дюба. <i>Методы и аппаратные средства проведения лазерофореза</i>	<u> 376 </u>
И.И. Хлудеев, С.К.Дик, А.С.Терех, А.В.Смирнов, В.П.Зорин. Неинвазивный метод контроля отклика кожной микроциркуляции на внешнее воздействие	<u>378</u>
А.В.Микулич, S.Kavaliauskiene, А.И.Третьякова, Л.Г.Плавская, В.Ю.Плавский, P.Juzenas. О фотодинамической активности блеббистатина	<u>_</u> 380
Н.Х.Чинь, Фам Уиен Тхи, А.Л.Танин, А.В.Щемелев, Ж.И.Булойчик, Г.Т.Маслова, А.П.Зажогин. Оценка состояния человека по пространственному распределению Са и Mg в высушенных каплях плазмы крови методами лазерной атомно-эмиссионной спектрометрии	387
М.П.Патапович, Т.В.Докукина, С.А.Марчук, А.П.Зажогин. Оценка стресс-рекции матери и ребенка методами лазерной атомно-эмиссионной спектрометрии волос	384
А.А.Рыжевич, Т.А.Железнякова, С.В.Солоневич. Параметры спекл-структуры в биоткани	386
А.А.Рыжевич, С.В.Солоневич, Т.А.Железнякова. Подготовка условий для экспериментального исследования закономерностей лазерофореза	<u>_</u> 388
Н.Х Чинь, Фам Уиен Тхи, А.Л.Танин, А.В.Щемелев, Ж.И.Булойчик, Г.Т.Маслова, А.П.Зажогин. Разработка методик количественного анализа элементного состава биологических жидкостей методом лазерной искровой спектрометрии со сдвоенными лазерными импульсами	_ 390
М.П.Патапович, Чинь Нгок Хоанг, И.Д.Пашковская, Лэ Тхи Ким Ань, Н.И.Нечипуренко, А.П.Зажогин. Разработка методик повышения чувствительности определения эссенциальных тяжелых металлов в биологических образцах методом лазерной атомно- эмиссионной спектрометрии	392

Д.Г.Шербин, СЖ.Лозникова, А.А.Суходола. Спектрально-кинетические зарактеристики микросскулдной фосфоресценции тролбоцитов человека. 391 М.П.Самцов, Д.С.Тарасов, К.Н.Каплевский, Е.С.Воропай. Спектрально-ложинесцентные свойства напосомальной формы трикарбоцианинового краситехи	Д.С.Тарасов, М.П.Самцов, К.Н.Каплевский, Е.С.Воропай, А.П.Луговский. Спекрально- люминесцентные свойства индотрикарбоцанинового красителя с полигликолями в водных растворах	394
М.П.Самцов, Д.С.Тарасов, К.Н.Каплевский, Е.С.Воропай. Спектрально- люминесцентные сеойства напосомальной формы трикарбоцианинового красител	Д.Г.Шербин, С.Ж.Лозникова, А.А.Суходола. Спектрально-кинетические характеристики микросекундной фосфоресценции тромбоцитов человека	_ 396
B.B. Акаронок, С.B. Гончарик, И.И. Филатова, Г.И.Гаржисва, Н.С.Гулковская, Е.И.Хук, A.Г. Жуковский, Н.Л.Свидуирующий и фунгицийный эффект предпосевной плазменной обработки семян злаковых и бобовых культур	М.П.Самцов, Д.С.Тарасов, К.Н.Каплевский, Е.С.Воропай. Спектрально- люминесцентные свойства наносомальной формы трикарбоцианинового красителя	_ 398
Т.Е.Зорина, И.В.Янковский, И.Е.Кравченко, В.П.Зорин. Фотофизические характеристики и фотосенсиблизирующая активность липосомальных форм этерифицированных производных хлорина e6	В.В.Ажаронок, С.В.Гончарик, И.И.Филатова, Г.И.Гаджиева, Н.С.Гудковская, Е.И.Жук, А.Г.Жуковский, Н.Л.Свидунович, K.Spasić, S.Živković, N.Puač, S.Lazović, G.Malović, Z.Lj.Petrović. Стимулирующий и фунгицидный эффект предпосевной плазменной обработки семян злаковых и бобовых культур	_ 400
D.Shcharbin, V.Dzmitruk, A.Shakhbazau, E.Pedziwiatr-Werbicka, B.Klajnert, M.Bryszewska. 40. Dendrimers and their biomedical applications 40. ФИЗИКА И общество:информатика, экология И образование 40. A.B.Сидоренко. Определение степени хаотичности выходных последовательностей алгоритма инфрования на основе динамического хаоса 400 B.B.Митянок, H.B.Kohosanoba. Фазовый анализ некоторых звуков человеческой речи. 401 B.M.Marshov, H.B.Kohosanoba. Фазовый анализ некоторых звуков человеческой речи. 401 M.A.Manesuч, A.B.Поляков, C.И.Чубаров. Архитектура оптоэлектронного вычислителя с параллельной аналоговой и цифровой обработкой информации 411 B.И.Покаташкин, A.M.Людчик. Влияние антропогенных загрязнителей воздуха на концентрацию озона в г. Миске. 411 A.A.Минько, М.П.Патапович, П.Н.Белый, М.В.Кудин, А.П.Зажогин. Изучение влияния сезонности на экологию центра Минска на примере послойного анализа химического состава коры ели методом лазерной искровой спектрометрии. 411 A.А.Минько, М.П.Патапович, П.Н.Белый, М.В.Кудин, А.П.Зажогин. Исследование процесов загрязнения поверхиости сексих овощей при обработке их соединениями меди методом лазерной искровой спектрометрии. 411 A.C.Лобко, С.Н.Сытгова, С.В.Черепица. Учебно-научный портал ядерных знаний 412 A.C.Лобко, С.Н.Сытова, С.В.Черепица. Учебно-научный портал ядерных знаний 412 M.А.Никоненко, А.Н.Королевич, М.И.Артюхин. Состояние подготовки научных работников высшей квалиф	Т.Е.Зорина, И.В.Янковский, И.Е.Кравченко, В.П.Зорин. Фотофизические характеристики и фотосенсибилизирующая активность липосомальных форм этерифицированных производных хлорина еб	402
ФИЗИКА И Общество:ИНформатика, экология и образование A.B.Сидоренко. Определение степени хаотичности выходных последовательностей алгоритма ишфрования на основе динамического хаоса 40" B.B.Митянок, Н.B.Коновалова. Фазовый анализ некоторых зеуков человеческой речи 40" И.А.Малевич, А.B.Поляков, С.И.Чубаров. Архитектура оптоэлектронного вычислителя с параллельной аналоговой и ишфровой обработкой информации 41 В.И.Покаташкин, А.М.Людчик. Влияние антропогенных загрязнителей воздуха на концентрацию озона в г. Минске. 41 А.А.Минько, М.П.Патапович, П.Н.Белый, М.В.Кудин, А.П.Зажогин. Изучение влияния сезонности на экологию центра Минска на примере послойного анализа химического состава коры ели методом лазерной искровой спектрометрии 41 А.А.Минько, М.П.Патапович, П.Н.Белый, М.В.Кудин, А.П.Зажогин. Изучение влияния сезонности на экологию центра Минска на примере послойного анализа химического состава коры ели методом лазерной искровой спектрометрии 41 А.А.Минько, М.П.Патапович, П.Н.Белый, М.В.Кудин, А.П.Зажогин. Исследование процесев загрязнения поверхности сеежих овоцей при обработке их соединениями меди методом лазерной атомно-эмиссионной спектрометрии 41 А.С.Лобко, С.Н.Сытова, С.В.Черепица. Учебно-научный портал ядерных знаний 41 К.Циконенко, А.Н.Королевич, М.И.Артюхин. Состояние подготовки научных работников высшей квалификации по специальностям, необходимым для развития высокотехнологичных отраслей. 42 Венагизап-Swedish-Ukrainian Scientific Workshop on Optics and Laser Physics 42	D.Shcharbin, V.Dzmitruk, A.Shakhbazau, E.Pedziwiatr-Werbicka, B.Klajnert, M.Bryszewska. Dendrimers and their biomedical applications	_ 404
A.B.Сидоренко. Определение степени хаотичности выходных последовательностей алгоритма ишфрования на основе динамического хаоса 40° B.B.Митянок, Н.B.Коновалова. Фазовый анализ некоторых звуков человеческой речи 40° B.B.Митянок, Н.B.Коновалова. Фазовый анализ некоторых звуков человеческой речи 40° B.M.Итянок, Н.B.Коновалова. Фазовый анализ некоторых звуков человеческой речи 40° M.A.Maneвич, A.B.Поляков, С.И.Чубаров. Архитектура оптоэлектронного вычислителя с параллельной аналоговой и цифровой обработкой информации 41 B.И.Покаташкин, А.M.Людчик. Влияние антропогенных загрязнителей воздуха на концентрацию озона в г. Минске 411 A.A.Минько, М.П.Патапович, П.H.Белый, М.B.Кудин, А.П.Зажогин. Изучение влияния сезонности на экологию центра Минска на примере послойного анализа химического состава коры ели методом лазерной искровой спектрометрии 411 А.А.Минько, М.П.Патапович, П.Н.Белый, М.В.Кудин, А.П.Зажогин. Исследование процесов загрязнения поверхности свежих овощей при обработке их соединениями меди методом лазерной атомно-эмиссионной спектрометрии 411 А.С.Лобко, С.Н.Сытова, С.В.Черепица. Учебно-научный портал ядерных знаний 412 Н.Киконенко, А.Н.Королевич, М.И.Артюхин. Состояние подготовки научных работников высшей квалификации по специальностям, необходимым для развития высокотехнологичных отраслей 422 Веагизіанский калицикации по специальностям, необходимым для развития высокотехнологичных отраслей 42 Веагизіансков высией квалификации по специальностям, нео	Физика и общество:информатика, экология и образование	
B.B.Mитянок, Н.B.Koновалова. Фазовый анализ некоторых звуков человеческой речи	А.В.Сидоренко. Определение степени хаотичности выходных последовательностей алгоритма шифрования на основе динамического хаоса	_ 407
И.А.Малевич, А.В.Поляков, С.И.Чубаров. Архитектура оптоэлектронного вычислителя с параллельной аналоговой и цифровой обработкой информации 41 В.И.Покаташкин, А.М.Людчик. Влияние антропогенных загрязнителей воздуха на концентрацию озона в г. Минске 41 А.А.Минько, М.П.Патапович, П.Н.Белый, М.В.Кудин, А.П.Зажогин. Изучение влияния сезонности на экологию центра Минска на примере послойного анализа химического состава коры ели методом лазерной искровой спектрометрии 41 А.А.Минько, М.П.Патапович, П.Н.Белый, М.В.Кудин, А.П.Зажогин. Исследование процесов загрязнения поверхности свежих овощей при обработке их соединениями меди методом лазерной атомно-эмиссионной спектрометрии 41 А.С.Лобко, С.Н.Сытова, С.В.Черепица. Учебно-научный портал ядерных знаний 41 Н.А.Никоненко, А.Н.Королевич, М.И.Артюхин. Состояние подготовки научных работников высшей квалификации по специальностям, необходимым для развития высокотехнологичных отраслей 42 Belarusian-Swedish-Ukrainian Scientific Workshop on Optics and Laser Physics 42 K.Kulyk, М.H.Stockett, J.D.Alexander, U.Berziğ, T.Chen, K.Farid, M.Gatchell, A.Johansson, M.Larsson, H.T.Schmidt, H.Zettergren, H.Cederquist. Polycyclic aromatic hydrocarbon ions in collisions with noble gases. 42 V.E.Kisel, A.S.Rudenkov, A.S.Yasukevich, N.V.Kuleshov. 12W efficient air cooled diode- pumped actively Q-switched YB:KGD(WO ₄) laser 42 M.M.Asimov, N.V.Barulin, A.S.Grabtchikov, I.A.Khodasevich, A.V.Mikulich, V.Yu.Plavskii, L.G.Plavskaya, A.I.Tretyakova, A.N.Rubinov. Effect of visible and near infrared laser radiation on activity of biologic	В.В.Митянок, Н.В.Коновалова. Фазовый анализ некоторых звуков человеческой речи	409
В.И.Покаташкин, А.М.Людчик. Влияние антропогенных загрязнителей воздуха на концентрацию озона в г. Минске	И.А.Малевич, А.В.Поляков, С.И.Чубаров. Архитектура оптоэлектронного вычислителя с параллельной аналоговой и цифровой обработкой информации	411
А.А.Минько, М.П.Патапович, П.Н.Белый, М.В.Кудин, А.П.Зажогин. Изучение влияния сезонности на экологию центра Минска на примере послойного анализа химического состава коры ели методом лазерной искровой спектрометрии	В.И.Покаташкин, А.М.Людчик. Влияние антропогенных загрязнителей воздуха на концентрацию озона в г. Минске	_413
А.А.Минько, М.П.Патапович, П.Н.Белый, М.В.Кудин, А.П.Зажогин. Исследование процесов загрязнения поверхности свежих овощей при обработке их соединениями меди методом лазерной атомно-эмиссионной спектрометрии 417 А.С.Лобко, С.Н.Сытова, С.В.Черепица. Учебно-научный портал ядерных знаний 419 Н.А.Никоненко, А.Н.Королевич, М.И.Артюхин. Состояние подготовки научных работников высшей квалификации по специальностям, необходимым для развития высокотехнологичных отраслей 42 Belarusian-Swedish-Ukrainian Scientific Workshop on Optics and Laser Physics 42 K.Kulyk, M.H.Stockett, J.D.Alexander, U.Bērziņš, T.Chen, K.Farid, M.Gatchell, A.Johansson, M.Larsson, H.T.Schmidt, H.Zettergren, H.Cederquist. Polycyclic aromatic hydrocarbon ions in collisions with noble gases 42 V.E.Kisel, A.S.Rudenkov, A.S.Yasukevich, N.V.Kuleshov. 12W efficient air cooled diode- pumped actively Q-switched YB:KGD(WO ₄) ₂ laser 42 M.M.Asimov, N.V.Barulin, A.S.Grabtchikov, I.A.Khodasevich, A.V.Mikulich, V.Yu.Plavskii, L.G.Plavskaya, A.I.Tretyakova, A.N.Rubinov. Effect of visible and near infrared laser radiation on activity of biological processes 430 S.V.Voitikov, P.V.Shpak, A.A.Kananovich, V.I.Dashkevich, P.A.Apanasevich, V.A.Orlovich. End-diode pumped compact solid-state Raman lasers 431	А.А.Минько, М.П.Патапович, П.Н.Белый, М.В.Кудин, А.П.Зажогин. Изучение влияния сезонности на экологию центра Минска на примере послойного анализа химического состава коры ели методом лазерной искровой спектрометрии	_ 415
A.С.Лобко, С.Н.Сытова, С.В.Черепица. Учебно-научный портал ядерных знаний 419 Н.А.Никоненко, А.Н.Королевич, М.И.Артюхин. Состояние подготовки научных работников высшей квалификации по специальностям, необходимым для развития высокотехнологичных отраслей 42 Belarusian-Swedish-Ukrainian Scientific Workshop on Optics and Laser Physics 42 K.Kulyk, M.H.Stockett, J.D.Alexander, U.Bērziņš, T.Chen, K.Farid, M.Gatchell, A.Johansson, M.Larsson, H.T.Schmidt, H.Zettergren, H.Cederquist. Polycyclic aromatic hydrocarbon ions in collisions with noble gases 42 V.E.Kisel, A.S.Rudenkov, A.S.Yasukevich, N.V.Kuleshov. 12W efficient air cooled diode-pumped actively Q-switched YB:KGD(WO ₄)2 laser 42 M.M.Asimov, N.V.Barulin, A.S.Grabtchikov, I.A.Khodasevich, A.V.Mikulich, V.Yu.Plavskii, L.G.Plavskaya, A.I.Tretyakova, A.N.Rubinov. Effect of visible and near infrared laser radiation on activity of biological processes 43 S.V.Voitikov, P.V.Shpak, A.A.Kananovich, V.I.Dashkevich, P.A.Apanasevich, V.A.Orlovich. End-diode pumped compact solid-state Raman lasers 43	А.А.Минько, М.П.Патапович, П.Н.Белый, М.В.Кудин, А.П.Зажогин. Исследование процесов загрязнения поверхности свежих овощей при обработке их соединениями меди методом лазерной атомно-эмиссионной спектрометрии	417
H.A.Никоненко, А.Н.Королевич, М.И.Артюхин. Состояние подготовки научных работников высшей квалификации по специальностям, необходимым для развития высокотехнологичных отраслей 42 Belarusian-Swedish-Ukrainian Scientific Workshop on Optics and Laser Physics K.Kulyk, M.H.Stockett, J.D.Alexander, U.Bērziņš, T.Chen, K.Farid, M.Gatchell, A.Johansson, M.Larsson, H.T.Schmidt, H.Zettergren, H.Cederquist. Polycyclic aromatic hydrocarbon ions in collisions with noble gases 42 V.E.Kisel, A.S.Rudenkov, A.S.Yasukevich, N.V.Kuleshov. 12W efficient air cooled diode-pumped actively Q-switched YB:KGD(WO ₄) ₂ laser 42 A.V.Mikulich, A.I.Tretyakova, L.G.Plavskaya, V.Yu.Plavskii, A.N.Rubinov. Antibacterial drugs as photosensitizers for antimicrobial photodynamic therapy 42 M.M.Asimov, N.V.Barulin, A.S.Grabtchikov, I.A.Khodasevich, A.V.Mikulich, V.Yu.Plavskii, L.G.Plavskaya, A.I.Tretyakova, A.N.Rubinov. Effect of visible and near infrared laser radiation on activity of biological processes 430 S.V.Voitikov, P.V.Shpak, A.A.Kananovich, V.I.Dashkevich, P.A.Apanasevich, V.A.Orlovich. End-diode pumped compact solid-state Raman lasers 430	А.С.Лобко, С.Н.Сытова, С.В.Черепица. Учебно-научный портал ядерных знаний	419
Belarusian-Swedish-Ukrainian Scientific Workshop on Optics and Laser Physics K.Kulyk, M.H.Stockett, J.D.Alexander, U.Bērziņš, T.Chen, K.Farid, M.Gatchell, A.Johansson, M.Larsson, H.T.Schmidt, H.Zettergren, H.Cederquist. Polycyclic aromatic hydrocarbon ions in collisions with noble gases	Н.А.Никоненко, А.Н.Королевич, М.И.Артюхин. Состояние подготовки научных работников высшей квалификации по специальностям, необходимым для развития высокотехнологичных отраслей	421
 K.Kulyk, M.H.Stockett, J.D.Alexander, U.Bērziņš, T.Chen, K.Farid, M.Gatchell, A.Johansson, M.Larsson, H.T.Schmidt, H.Zettergren, H.Cederquist. <i>Polycyclic aromatic hydrocarbon ions in collisions with noble gases</i>	Belarusian-Swedish-Ukrainian Scientific Workshop on Optics and Laser Physics	
V.E.Kisel, A.S.Rudenkov, A.S.Yasukevich, N.V.Kuleshov. 12W efficient air cooled diode- pumped actively Q-switched YB:KGD(WO ₄) ₂ laser42" 42" A.V.Mikulich, A.I.Tretyakova, L.G.Plavskaya, V.Yu.Plavskii, A.N.Rubinov. Antibacterial drugs as photosensitizers for antimicrobial photodynamic therapy42" 42" M.M.Asimov, N.V.Barulin, A.S.Grabtchikov, I.A.Khodasevich, A.V.Mikulich, V.Yu.Plavskii, L.G.Plavskaya, A.I.Tretyakova, A.N.Rubinov. Effect of visible and near infrared laser radiation on activity of biological processes430" 430" S.V.Voitikov, P.V.Shpak, A.A.Kananovich, V.I.Dashkevich, P.A.Apanasevich, V.A.Orlovich. End-diode pumped compact solid-state Raman lasers430" 430"	K.Kulyk, M.H.Stockett, J.D.Alexander, U.Bērziņš, T.Chen, K.Farid, M.Gatchell, A.Johansson, M.Larsson, H.T.Schmidt, H.Zettergren, H.Cederquist. <i>Polycyclic aromatic hydrocarbon ions in collisions with noble gases</i>	_ 424
A.V.Mikulich, A.I.Tretyakova, L.G.Plavskaya, V.Yu.Plavskii, A.N.Rubinov. Antibacterial 428 drugs as photosensitizers for antimicrobial photodynamic therapy 429 M.M.Asimov, N.V.Barulin, A.S.Grabtchikov, I.A.Khodasevich, A.V.Mikulich, V.Yu.Plavskii, 429 M.G.Plavskaya, A.I.Tretyakova, A.N.Rubinov. Effect of visible and near infrared laser 430 S.V.Voitikov, P.V.Shpak, A.A.Kananovich, V.I.Dashkevich, P.A.Apanasevich, V.A.Orlovich. 430 End-diode pumped compact solid-state Raman lasers 430	V.E.Kisel, A.S.Rudenkov, A.S.Yasukevich, N.V.Kuleshov. 12W efficient air cooled diode- pumped actively Q-switched YB:KGD(WO ₄) ₂ laser	_ 427
M.M.Asimov, N.V.Barulin, A.S.Grabtchikov, I.A.Khodasevich, A.V.Mikulich, V.Yu.Plavskii, L.G.Plavskaya, A.I.Tretyakova, A.N.Rubinov. <i>Effect of visible and near infrared laser</i> <i>radiation on activity of biological processes</i>	A.V.Mikulich, A.I.Tretyakova, L.G.Plavskaya, V.Yu.Plavskii, A.N.Rubinov. Antibacterial drugs as photosensitizers for antimicrobial photodynamic therapy	_ 428
S.V.Voitikov, P.V.Shpak, A.A.Kananovich, V.I.Dashkevich, P.A.Apanasevich, V.A.Orlovich. <i>End-diode pumped compact solid-state Raman lasers</i> 432	M.M.Asimov, N.V.Barulin, A.S.Grabtchikov, I.A.Khodasevich, A.V.Mikulich, V.Yu.Plavskii, L.G.Plavskaya, A.I.Tretyakova, A.N.Rubinov. <i>Effect of visible and near infrared laser radiation on activity of biological processes</i>	_ 430
	S.V.Voitikov, P.V.Shpak, A.A.Kananovich, V.I.Dashkevich, P.A.Apanasevich, V.A.Orlovich. End-diode pumped compact solid-state Raman lasers	_ 432

S.N.Kurilkina, V.N.Belyi, N.S.Kazak. Formation and investigation of evanescent and plasmonic quasi-nondiffraction light beams	. 434
V.G.Baryshevsky, A.A.Gurinovich, P.V.Molchanov, A.S.Lobko. Generation of medical x-ray and terahertz beams of radiation using table-top accelerators	.435
V.Belyi, N.Kazak, N.Khilo, A.Ryzhevich. Generation of new types of singular beams in crystals	
V.I.Dashkevich, V.A.Orlovich, S.N.Bagaev, S.M.Vatnik, A.A.Pavlyuk. Lasing on the ${}^{5}D_{0} \rightarrow {}^{7}F_{4}$ TRANSITION OF 25 % Eu : KGd(WO ₄) ₂ laser crystal: free-running, pulse and quasi-cw operation	. 438
Nils Elander, Sergei Rakityansky. Resonances and their relations to spectral densities and scattering cross sections in the Schrödinger formulation	. 439
V.Goryashko, V.Ziemann. Self-amplified coherent spontaneous emission in afree-electron laser with reduced level of shot noise	. 440
Å.Larson, S.Nkambule, N.Elander. Theoretical studies of mutual neutralization	. 442
Tony Hansson. Ultrafast photochemical dynamics of atmospheric molecules from a femtosecond electron-energy resolved electron-ion coincidence spectroscopy viewpoint	. 443
V.G.Baryshevsky, A.A.Gurinovich, P.V.Molchanov. Volume free electron lasers: recent experimental studies	_444
S.Nkambule, N.Elander, Å.Larson. Differential and total cross sections for mutual neutralization in H^+ and H collisions	446
R.Chulkov, V.Goryashko, R.T.Jongma, W.J.van der Zande, V. Zhaunerchyk. <i>Interplay between cavity modes in a short-pulse Thz FEL</i>	_447
Матс Ларшон. Нобелевская премия по физике 1962 года: Лев Ландау	448

Научное издание

ІV КОНГРЕСС ФИЗИКОВ БЕЛАРУСИ

24-26 апреля 2013 г., Минск

Сборник научных трудов

Главный редактор С.Я. Килин

Подписано в печать 17.04.2013. Формат 60 х 84 1/16. Бумага офсетная. Гарнитура Таймс. Печать цифровая. Усл. печ. л. 16,4. Уч.-изд. л. 16,1. Тираж 220 экз. Заказ 25.

ООО «Ковчег» Лицензия ЛИ №02330/0548599 от 09.07.2009. пр. Независимости, 68-19, 220072, г. Минск Тел./факс: (017) 284 04 33



Твердотельные лазеры от уф до ИК: Импульсные удб лазеры фемтосекундные лазеры Перестраиваемые лазеры оро и DFG системы Спектральная техника: Раман спектрометры Монохроматоры спектрометры Спектрографы Лазерные системы для медицины: Александритовые лазеры уаб лазеры ктр лазеры Но лазеры WWW.SOLARLS.EU info@solarls.eu