



ФИЗИКА

УДК 537.874

ИСТОРИЯ ОДНОГО «АРТЕФАКТА»

Ю. Н. Зайко

Поволжский институт управления им. П. А. Столыпина –
филиал РАНХ и ГС при Президенте РФ, Саратов
E-mail: zyrnick@rambler.ru

Изложена история открытия быстрых осцилляций амплитуды и мгновенной частоты сигналов, распространяющихся в дисперсионной линии передачи (среде). Выделены три периода: первый – от их обнаружения в численных расчетах в 60-х гг. XX в., второй, связанный с критикой этого явления и забвением вплоть до последнего десятилетия XX в., и третий, начавшийся в конце XX в., продолжающийся по настоящее время и связанный с его открытым обсуждением. Изложена критика теории аналитического сигнала. Представлены некоторые результаты, не публиковавшиеся ранее.

Ключевые слова: сигнал, амплитуда, фаза, частота.

A History of One «Artefact»

Yu. N. Zayko

A history of the phenomenon of fast oscillations of amplitude and momentary frequency of a signal (pulse) propagating in dispersive media is presented. This history is divided on three periods: first, from its discovery in 60-th of XX Century, second, its oblivion up to the end of XX C., and third – its open discussion from the end of XX C. to present days. A theory of the analytical signal is critically discussed. Some unpublished results are presented.

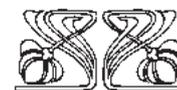
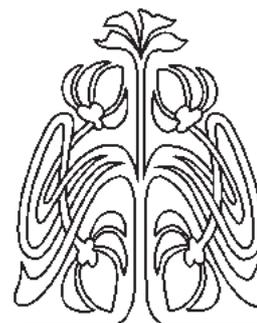
Key words: signal, amplitude, phase, frequency.

Введение

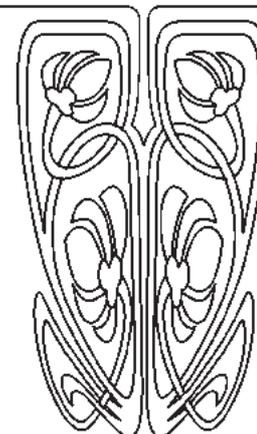
В середине XX века, как известно, была холодная война. Правительства и военные стран-победительниц во Второй мировой войне готовились к новой войне, которая должна была, по их мнению, окончательно решить вопрос о мировом господстве. Было создано оружие, способное стать козырем в предстоящих боевых действиях, однако наличие такого оружия у предполагаемого противника впервые за всю мировую историю явилось сдерживающим фактором, не позволяющим нанести первый удар.

В этих условиях ученые всех стран так или иначе причастные к оборонным разработкам были заняты изысканием дополнительных средств, способных повлиять на исход противостояния. К числу таких средств относилась дальняя радиолокация как средство раннего оповещения и предупреждения внезапного нападения противника. Кроме того, продолжались работы по совершенствованию систем радионавигации¹. Проводились подобные исследования и в СССР, ни в чем не желавшем уступить противнику.

¹ Работы [1–3] проводились в рамках проекта по созданию радионавигационных систем наземного базирования (станции типа LORAN-C, советский аналог – ЧАЙКА) – предшественниц современных GPS и ГЛОНАСС, широко использовавшихся США и Великобританией в годы Второй мировой войны.



НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ





В этих исследованиях особую роль отводили численному моделированию распространения радиолокационного сигнала на ЭВМ, появившихся недавно и оказывающих немалую помощь в достижении поставленной цели. Несмотря на то, что основополагающие работы в данной области относились к началу века [4, 5] и основные теоретические результаты были уже получены, до применения их на практике было далеко. На первых порах решение задачи раннего обнаружения связывалось с так называемым предвестником – частью электромагнитного импульса, опережающей основной сигнал. Однако затем, возможно, в связи с тем, что предвестник не оправдал возлагавшихся на него надежд, стали уделять больше внимания исследованию остальных частей сигнала. Эту ситуацию образно охарактеризовал Л. А. Вайнштейн, сравнив предвестник с москвой, отвлекающей внимание от слона – основного сигнала [6].

В исследовании распределения параметров сигнала (импульса) – частоты, волнового числа и амплитуды – большие надежды возлагались на точные аналитические методы и, в первую очередь, на точное решение задачи о распространении разрывного решения, описывающего фронт импульса для характерного волнового закона дисперсии², полученное П. И. Кузнецовым и Р. В. Хохловым в конце 1940-х гг. [7–9]. Были сделаны попытки использовать это решение [10], но они не дали новых результатов по сравнению с подходом, не использовавшим вышеупомянутый результат [11]. В частности, как те, так и другие предсказывали монотонное возрастание частоты и волнового числа на переднем фронте импульса, что связано с характером дисперсии.

В то время мало кто обратил внимание на некий, показавшийся побочным, результат численных исследований, которые предсказывали осцилляции отмеченных параметров [1, 2], в первую очередь, амплитуды импульса. Возможно даже, что в поисках предвестника, его просто не заметили³. Этот результат явно противоречил результатам, упомянутым выше. Ведь в силу наличия инварианта $a^2 d\varphi/dt$ (a – амплитуда, φ – фаза сигнала) [12] осцилляции амплитуды связаны с осцилляциями частоты⁴. Так или иначе, к этому

² Дело в том, что распространение волн во многих средах, например, плазме, в том числе атмосферной, описываются тем же (или близким к нему) законом дисперсии, что и в волноводе.

³ Вновь о нем упомянул Ю. П. Вербин спустя почти тридцать лет [3].

⁴ То, что в [12] речь идет о колебаниях, а не о волнах, сути дела не меняет.

результату никто серьезно не отнесся и, объяснив его тем, что «длительности и мощности переходных процессов внутри $Re[f(t)]$ и $Im[f(t)]$ »⁵ существенно различаются ... из-за существенно разного соотношения между низкочастотными и высокочастотными составляющими в их текущих спектрах» [3], о нем забыли⁶.

Поскольку дальнейшее изложение касается именно этого, на первый взгляд, незначительного результата, на нем стоит остановиться подробнее. Отметим его главные особенности. Первая особенность заключается в том, что он лежит на поверхности и мимо него пройти невозможно ни одному исследователю. Вторая особенность – в том, что он своевременно не получил ни должного объяснения, ни развития. Это можно объяснить по-разному. Далее предлагается версия автора, на протяжении ряда лет с конца 1970-х гг. занимавшегося этим вопросом.

На протяжении десятков лет с момента открытия этого явления в 60-х гг. XX в. и до недавнего времени никаких публикаций (за исключением работ автора) на эту тему не было, точнее, почти не было⁷. Указанные годы были отмечены необычайной активностью в развитии⁸ в СССР концепции так называемого аналитического сигнала, который Л. А. Вайнштейн и Д. Е. Вакман в своих работах [19–22]⁹ выдвигали на роль основного инструмента в исследованиях колебательных и волновых процессов. С точки зрения аналитического сигнала никаких высокочастотных осцилляций волновых параметров сигнала (импульса) нет в принципе. В результате многие факты, полученные в рамках примене-

⁵ $f(t)$ – комплексный сигнал.

⁶ Д. Е. Вакман упоминает в [19] ошибочные утверждения некоторых авторов о том, что осциллирующие квадратурные параметры использовал Ван дер Поль.

⁷ В последнее время на эту тему стал писать Г. М. Стрелков [13–15]. Кроме того, в 1989 г. появилась работа [16]. Стоит еще упомянуть работы А. Б. Шварцбурга [17, 18]. Большинство же авторов, публиковавшихся ранее, в 1970-е и 1980-е гг. упоминали о высокочастотных осцилляциях в колебательных (не волновых) задачах, и их результаты получили негативную оценку в [19, 20]. Особо следует отметить работу Д. Е. Вакмана [19]. Здесь, как и в статье [20], осцилляции амплитуды колебаний на удвоенной частоте несущей отмечались как нефизические, абсурдные с технической точки зрения. Однако автор показал лишь, что в амплитуду можно ввести дополнительные гармоники без изменения самого сигнала. Вопрос о том, как убрать их из амплитуды, в общем случае им не рассматривался (см. Приложение).

⁸ Точнее, популяризации.

⁹ Это и понятно, поскольку аналитический сигнал, введенный Д. Габором, представлял собой математический прием, позволяющий исключить (т. е. заменить) усреднение по времени для определения квадратичных характеристик сигнала [23].



ния методов комплексного анализа, называемых Л. А. Вайнштейном и Д. Е. Вакманом теорией «комплексного сигнала», объявлялись артефактами¹⁰ и приписывались «недостаткам» последнего.

2. Аналитический сигнал

Аналитический сигнал (АС) появился как средство практической радиотехники и оптики. Представляется сомнительным, чтобы его создатель или изобретатель Д. Габор видел в нем замену или конкурента так называемому комплексному сигналу¹¹ (КС), который есть инструмент обычного комплексного анализа применительно к задаче о распространении волн. Ввиду того, что авторы [19–22] противопоставляют АС и КС, стоит коротко остановиться на сравнительном анализе их свойств. Если следовать [20, 21], то он сводится к следующему.

1. КС неоднозначен, т. е. по его вещественной части нельзя однозначно определить мнимую, и наоборот. В то же время вещественная и мнимая части АС связаны с помощью преобразования Гильберта. Это способствует однозначному определению таких параметров сигнала (сигнала вообще и АС и КС), как амплитуда, фаза и частота (АФЧ) [20]. Все это так, и все было бы хорошо, если бы не два обстоятельства. Первое связано с тем, что АС тоже неоднозначен. Действительно, если добавить постоянную к вещественной (мнимой) части АС, то, поскольку результатом преобразования Гильберта постоянной является нуль, мы получим ту же мнимую (вещественную) часть, что и ранее, без добавления постоянной. Налицо неоднозначность¹².

Второе. Неоднозначность определения АФЧ без привлечения АС связана с неоднозначностью разделения заданной функции $f(t)$ на амплитудную и осциллирующую части $a(t)\cos(\varphi(t))$ [20]. Но в работах, посвященных распространению импульсов в диспергирующих средах, о которых речь идет ниже, функция $f(t)$ уже задана в виде $a(t)\cos(\varphi(t))$, и разделения не требуется.

2. «Во многих случаях необходима медленность, плавность функций $a(t)$ и $\varphi(t)$... Однако

¹⁰ Такой точки зрения придерживался, например, А. Ф. Голубенцев (1933–2003).

¹¹ Сам термин «комплексный сигнал», по-видимому, появился только в связи с аналитическим сигналом и использовался только в работах Л. А. Вайнштейна и Д. Е. Вакмана.

¹² Это рассуждение не проходит, точнее, из него следует равенство постоянной нулю, если учесть [24], что среднее значение АС по времени равно нулю. Этот результат доказан в [24] для случайных процессов, но легко переносится и на детерминированные процессы. Но это же и ограничивает область применимости АС.

АФЧ, определяемые при этом, осмыслены только в рамках метода усреднения и не имеют более широкого значения... Для *любого* узкополосного колебания функции $a(t)$ и $\varphi(t)$ ¹³ содержат быстрые компоненты частоты 2ω и потому не являются медленными (по сравнению с $\cos(\omega t)$ или $\sin(\omega t)$) [20]. Это утверждение явно тенденциозно и связано с допущением, что все проявления волновых и колебательных явлений связаны с процедурой усреднения. Между тем это не так. Например, интерференция двух плоских волн, распространяющихся навстречу друг другу, приводит к модуляции интенсивности с периодом, равным половине длины волны интерферирующих волн [25]. Усреднение просто уничтожит результат интерференции.

3. «...АФЧ ... имеют интегральный характер, т. е. характеризуют колебательный процесс в некотором временном интервале, более строго – на всей временной оси при $-\infty < t < \infty$ » [20]. Этому свойству удовлетворяет именно АС. «Интегральный характер АФЧ находит отражение в преобразовании Гильберта, где интегрирование выполняется по всей оси времени» [20]. Однако это же ведет и к нарушению причинности, что немедленно сказывается на свойствах АС в приложениях. Оно проявляется в наличии предвестника уже при $z = 0$ для импульсов с разрывной огибающей [22]. Предложение «...лучше не рассматривать чрезмерно идеализированных физических сигналов» [22] нельзя считать обоснованным¹⁴.

4. АС позволяет стандартным образом определить АФЧ для большинства колебательных (в меньшей степени, волновых) явлений в радиотехнических приборах и описать процессы в них как классические, так и квантовые. Успехи АС столь впечатляют, что в [21] сказано: «...радиотехнические устройства, составляющие сложную радиотехническую систему, de facto научились понимать друг друга, используя универсальные АФЧ, определенные с помощью преобразований Гильберта». Представляется малообоснованным в погоне за универсальностью жертвовать основными физическими принципами (причинностью) и если речь идет о расчетах – точностью.

3. Комплексный сигнал

Поскольку КС, как и комплексный анализ, не нуждается в подробном описании, мы остановимся на специфике задач, рассмотренных ниже,

¹³ Полученные без применения АС [20].

¹⁴ Это равносильно предложению не суммировать в ряду $\sin x + \sin 3x/3 + \sin 5x/5 + \dots$, который сходится к ступенчатой функции, слишком много членов.



решение которых основано на использовании КС. Речь пойдет о задачах, связанных с распространением волн в диспергирующих средах. Если в задачах, связанных с возбуждением, приемом, детектированием, модуляцией и другими чисто практическими вопросами КС, возможно, и уступает АС, то в вопросах распространения он обладает явным преимуществом перед ним, о чем уже было сказано выше. Дальнейшее изложение посвящено в основном исследованию упомянутого выше явления (не «артефакта»!) осцилляций волновых параметров: амплитуды и мгновенной частоты (МЧ) (мгновенного волнового числа (МВЧ)) с помощью теории КС. При этом основным (хотя и не единственным) инструментом исследования является интеграл Фурье в комплексной плоскости. С его помощью выводится выражение для функции Грина (вещественной), удовлетворяющей условию причинности [6]. В основном изложение будет следовать работам автора¹⁵. Кроме аппарата Фурье используются и другие методы. Это является, с одной стороны, следствием желания отказаться от использования якобы «плохого» инструмента¹⁶, а с другой – придает полученным результатам большую убедительность.

4. Основные результаты

Первой работой, в которой были обнаружены осцилляции МЧ (а, фактически, повторены результаты [1, 2]), была работа [26]¹⁷. В ней с помощью теории КС численно на основе программы [27] исследовалась граничная задача о прохождении прямоугольного радиоимпульса волны H_{10} в прямоугольном волноводе без затухания. Основное внимание было уделено анализу амплитуды и МЧ на фронтах и в основной области импульса. Уравнения, определяющие эти параметры, не отличались от тех, с помощью которых они определяются в теории АС и на практике [20]. Были обнаружены осцилляции этих параметров, не получившие к тому времени удовлетворительного объяснения ни в работах [9, 10], ни в работах автора того времени. «Объяснение» осцилляций, данное в работе [11], уже было приведено выше. Интересно, что в работе [17], посвященной аналитическому

исследованию распространения импульсов в диспергирующих средах, было сказано следующее: «...промежутки времени между точками пересечения нуля огибающими гармоник как электрического, так и магнитного поля неравны, т.е. составляющие переменного поля... непериодичны», что, по сути дела, является словесным описанием тех же осцилляций. На рис. 1 показаны результаты расчета параметров импульса по методу, изложенному в [26]. Явно прослеживаются осцилляции МЧ на частоте, близкой к удвоенной частоте несущей импульса, упомянутые в [19, 20].

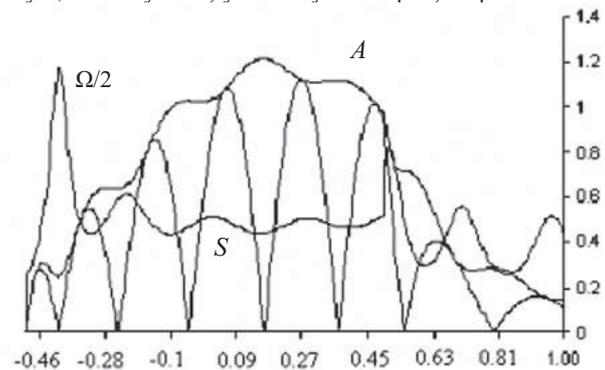


Рис 1. Результаты расчета искажения радиоимпульса с прямоугольной огибающей при $z = 0$; параметры импульса: $T_0\omega_0/2\pi = 2.5$, $\omega_0/\omega_c = 2$, $z/cT_0 = 1$; S – сигнал (показаны оба полупериода), A – амплитуда, Ω – мгновенная частота. T_0 – длительность импульса, ω_0 – несущая частота, ω_c – частота отсечки, z – расстояние, c – скорость света. По оси абсцисс отложено $(t - z/c)/T_0$, t – время

Выше в качестве примера волнового явления, для описания которого не требуется процедуры усреднения, приводилась интерференция двух встречных плоских волн. Можно предположить, что в основе описываемых осцилляций МЧ лежит интерференция спектрально узких составляющих импульса между собой. В дальнейшем точка зрения на искажение радиоимпульса как результат их взаимодействия получила развитие в других работах автора.

В работе [28] эти результаты применялись для оценки погрешности частотных измерений при распространении сигналов в волноведущих структурах с дисперсией. Интересным с точки зрения настоящего рассмотрения в этой работе была аналогия между рассматриваемой задачей исследования поведения заполнения прямоугольного радиоимпульса и задачей о распаде начального разрыва в граничных условиях решения некоторого нелинейного уравнения, которое описывает эволюцию МЧ (или МВЧ) и которым при некоторых допущениях является уравнение Кортевега – де Вриза [29, 30]. Были выполнены

¹⁵ Из всех работ других авторов, в которых так или иначе рассматривались осцилляции квадратурных компонент, упоминаются только работы, посвященные распространению импульсов. Быстрые осцилляции квадратурных компонент в колебательных задачах – отдельная история и у нее своя хронология (см., например, [19]).

¹⁶ Дань времени.

¹⁷ Впоследствии этот результат был получен также в работе [13] без привлечения КС.



численные расчеты поведения МЧ при малых и больших расстояниях и показано сходство обоих явлений.

В работе [31] численно изучалось распространение прямоугольного радиоимпульса (РИ) с линейной частотной модуляцией (ЛЧМ) заполнения в диспергирующей среде. Такая задача ранее рассматривалась только для РИ с гауссовой огибающей [3, 32]. С точки зрения распространения сигналов интересным является сжатие (компрессия) РИ с расстоянием до некоторой точки, называемой фокусом, с последующим расширением и изменением знака ЛЧМ. В настоящей работе дисперсия среды учитывалась в так называемом втором приближении теории дисперсии, т. е. волновое число $k(\omega)$ (ω – циклическая частота) разлагалось в ряд Тейлора вблизи несущей ω_0 до членов второго порядка. В этом случае выражение для КС с помощью интеграла Фурье приводится к хорошо известным интегралам Френеля [33]. Результаты подтвердили картину компрессии РИ и позволили выявить некоторые новые её черты по сравнению с гауссовым РИ. Кроме того, было подтверждено наличие осцилляций МЧ для прямоугольного РИ и в случае наличия ЛЧМ, в частности появление одиночных импульсов МЧ в областях фронтов РИ противоположной полярности¹⁸.

В работах [34, 35] для описания осцилляций МЧ сигналов, распространяющихся в диспергирующих средах, были применены методы, использующие понятие геометрической фазы, или фазы Берри [36]. Было предложено геометрическое описание модуляционных явлений в диспергирующих средах, на основе использования аналога вектора Джонса в поляризационной оптике:

$$\mu = \begin{pmatrix} a(z, t) \\ b(z, t) \end{pmatrix},$$

который описывает модуляцию сигнала: $f(z, t) = a(z, t)\cos(\omega t) + b(z, t)\sin(\omega t)$ в точке z среды в момент времени t . Было показано, что трансформация сигнала выглядит как вращение $\mu(t)$ в фазовом пространстве, натянутом на вектора

$$\begin{pmatrix} \cos(\alpha t) \\ 0 \end{pmatrix} \text{ и } \begin{pmatrix} 0 \\ \sin(\alpha t) \end{pmatrix}.$$

Эта геометрическая картина дополняется введением отображения фазового пространства на полусферу C_m с радиусом ρ_m :

$$a = \rho_m \sin \theta \cos \varphi, \quad b = \rho_m \sin \theta \sin \varphi, \quad \rho^2 = a^2 + b^2, \\ \rho_m = \max_{\{i\}} \rho(t), \quad 0 \leq \theta \leq \pi/2, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi.$$

¹⁸ Эти результаты были также получены в работах [14, 15] иным методом. Очевидно, их авторы не знали о работе [31].

Было показано, что геометрический вклад в фазу равен нулю и в силу этого отображение фазового пространства на полусферу допускает траектории на этой полусфере, описываемые концом вектора $\mu(t)$ в виде замкнутых контуров, не охватывающих полярную ось $\theta = 0$, что и влечет осциллирующее поведение фазы и МЧ.

В работе [37] было предложено объяснение осцилляций волновых параметров: МЧ и МВЧ на основе нового явления – осцилляций римановых инвариантов системы уравнений нелинейной геометрической оптики (НГО):

$$\frac{\partial k}{\partial t} + v_g \cdot \frac{\partial k}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial E_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (v_g \cdot E_k) = 0, \quad (1)$$

где k – волновое число, $v_g = \partial \omega / \partial k$ – групповая скорость, ω – частота, $E_k \sim a_k^2$ – спектральная плотность энергии, a_k – амплитуда спектрально-узкого волнового пакета; t, x – время и координата. В линейном случае $\omega = \omega_0(k)$ система (1) «почти» гиперболическая, так как обладает одной дважды вырожденной характеристикой $dx/dt = v_g$, вдоль которой сохраняется $k(x, t) = I_1$ – первый инвариант Римана [38]. При учёте в разложении $\omega = \omega(k, a)$ по амплитуде квадратичных членов характеристики расщепляются в соответствии с выражением [38]

$$\omega = \omega_0(k) + \sigma \cdot a^2 + \dots, \\ \frac{dx}{dt} = v_g(k) \pm [\sigma \cdot v_g'(k)]^{1/2} \cdot a, \quad (2)$$

и можно говорить о втором инварианте Римана $I_2 \sim a^2$ [38].

Уравнения (1) используются как хорошее приближение для описания многих систем, допускающих распространение волн [38]. Уравнения НГО интегрируются на плоскости x, t (координата – время) методом характеристик [38] вплоть до точки, соответствующей так называемому пересечению характеристик, соответствующих разным начальным значениям $k(x, t = 0)$, за которой метод характеристик неприменим.

Однако, как было показано в [37, 39], при учёте в разложении $\omega_{i,j} = \omega_0(k_{i,j}) + \sigma_{i,j} \cdot a_{i,j}^2 + \mu_{i,j} \cdot a_i^2 \cdot a_j^2 + \dots$ членов четвёртого порядка, отвечающих взаимодействию i -го и j -го спектрально-узких волновых пакетов, составляющих импульс, друг с другом, характеристики не пересекаются, и, следовательно, решение задачи Коши о распространении импульса можно строить обычными методами, учитывая сложный характер пове-



дения характеристик системы (1), отвечающих множеству спектрально-узких волновых пакетов, формирующих импульс.

Поведение характеристик системы (1) вблизи упомянутых точек (следуя традиции, будем называть их точками пересечения) зависит от того, «пересекаются» ли характеристики, соответствующие одинаковым или разным инвариантам Римана. Для случая одинаковых инвариантов воспользуемся понятием трубки тока, заимствованным из гидродинамики [40]. Рассмотрим две характеристики, соответствующие значениям k_1 и k_2 , между которыми сосредоточена основная энергия волнового пакета. Это достаточно просто сделать для импульса гауссовой формы. Как показано в [40], основная энергия импульса распространяется, оставаясь внутри указанных характеристик, что и даёт основание воспользоваться гидродинамической аналогией. Если начальный импульс был модулирован по частоте или волновому числу, то вышеупомянутые характеристики будут сближаться до точки максимального сближения (фокуса), после чего станут расходиться. Эта картина описывает хорошо известный процесс сжатия гауссова импульса с линейной модуляцией заполнения. Она же согласуется с характером поведения характеристик (1), обнаруженным в [37].

Оказывается, что гидродинамическая аналогия помогает объяснить характер искажения импульсов и более сложной, например прямоугольной, формы. Как отмечалось в [37], в этом случае характеристики, избегая пересечения друг с другом, ведут себя на плоскости x, t довольно сложным образом, что выглядит для внешнего наблюдателя, покоящегося или движущегося с постоянной относительно среды скоростью, как осцилляции инвариантов. Если воспользоваться понятием трубки тока, то, в отличие от гауссова импульса, соответствующего ламинарному характеру поведения характеристик, которые уместно считать аналогом линий тока, трубка тока прямоугольного импульса отвечает состоянию, напоминающему близкое к турбулентному состоянию жидкости: она имеет не один фокус, а несколько, в результате чего её сечение меняется немонотонно – сужение сменяется расширением, и наоборот. Это объясняется сложным поведением характеристик, вытекающим из результатов [37]. Такая качественная картина подтверждается рис. 2, где показано изменение длительности прямоугольного радиоимпульса с линейной частотной модуляцией (ЛЧМ) во втором приближении теории дисперсии.

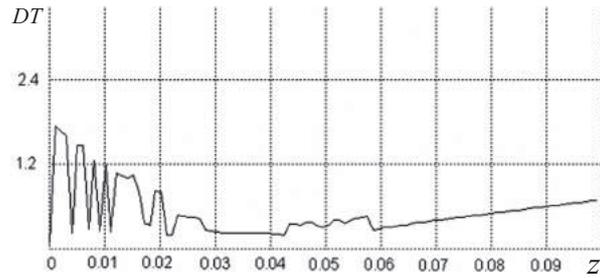


Рис. 2. Длительность импульса T в зависимости от расстояния, пройденного импульсом x , рассчитанная во втором приближении теории дисперсии. Форма импульса при $x = 0 : f(0, t) = A(t) \exp(i\omega_0 t)$, $A(t) = \exp(ib t^2)$ для $|t| < T_0/2$, $A(t) = 0$ для $|t| > T_0/2$; ω_0 – несущая частота, T_0 – начальная длительность импульса, b – параметр модуляции; $z = x|k'(\omega_0)| / T_0^2$, $DT = T/T_0$. Параметры импульса: $\omega_0 T_0 / 2\pi = 100$, $b T_0^2 = 10$

Длительность определялась по некоторому уровню r амплитуды импульса от её максимального значения (в расчётах $r = 0.5$). Как показали расчёты, величина r не влияет на качественную картину явления. На рис. 3 показана зависимость амплитуды импульса от времени в точке $z = 0.051$, где сечение трубки тока увеличилось.

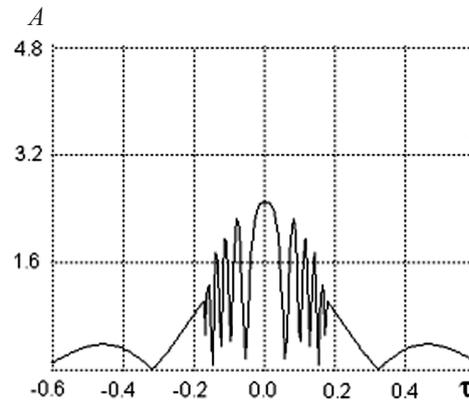


Рис. 3. Форма импульса в точке $z = 0.051$. Параметры импульса те же, что и на рис. 1; $\tau = (t - xk'(\omega_0)) / T_0$

Видно, что эффективная длительность импульса возросла за счёт роста побочных частей импульса, амплитуда которых обычно мала, до уровня, сравнимого с уровнем амплитуды основной части импульса. Осцилляции длительности в области меньших z связаны с тем, что импульс периодически разделяется на две симметричные половины, которые затем вновь сливаются. Результаты, представленные на рис. 2, 3, достаточно устойчивы по отношению к изменению временного шага и точности, с которой определялась длительность.

Если же речь идёт о «пересечении» характеристик, соответствующих разным инвариантам



(1), то здесь картина иная. Напомним, что в линейной теории волн пересечение таких характеристик лежит в основе доказательства существования и единственности решения задачи Коши для (1) и связано с возможностью из каждой точки плоскости x, t провести n различных характеристик; в нашем случае $n = 2$. Поэтому результат [37] не должен нарушать теоремы о существовании и единственности, а также должен отражать симметрию исходной системы относительно отражения времени.

Две изначально «пересекавшихся» характеристики, соответствующие максимальной и минимальной групповым скоростям спектрально-узких волновых пакетов, вблизи точки «пересечения» (x_0, t_0) распадаются на две ветви – нижнюю и верхнюю (ось x горизонтальна). Нижняя ветвь определяет на оси x область влияния, т. е. те значения x' , возмущения от которых могут достигать данной точки x_0 в соответствии с волновым характером решений (1). Верхняя ветвь отделена от нижней интервалом δt , величина которого пропорциональна интенсивности взаимодействия спектрально-узких волновых пакетов, формирующих импульс. Интервал δt представляет минимальный интервал времени, который может быть измерен с помощью сигналов конкретной природы. В частности, нельзя получить импульсы с длительностью меньше, чем δt . Величину δt можно оценить как $\sim \sigma^{1/2}/c$, где σ – сечение фотон-фотонного рассеяния, c – скорость света (в среде).

В конце работы [39] было высказано предположение о том, что данные результаты могут иметь отношение к глобальной структуре пространства-времени. Хотя эти вопросы не имеют непосредственного отношения к основной теме статьи – осцилляциям волновых параметров, отметим некоторые особенности задачи, тем более что ее решение [41] имеет много общего с решением основной проблемы. В [41] исследовались решения совместной системы уравнений Максвелла и Эйнштейна, обладающие сферической симметрией. Было показано, что, как и в [39], не вся информация из прошлого, собираемая сходящейся волной, может быть передана в будущее. Передача всей информации требует бесконечного времени. Иными словами, гравитационное взаимодействие лучей, на которые разбивается сферическая волна и искривление пространства-времени, вызванное этим взаимодействием, имеют такое же действие на передачу информации, как и взаимодействие спектрально-узких составляющих импульса в нашей задаче [39].

5. Что еще можно сделать

Из нерешенных задач, которые непосредственно связаны с явлением осцилляции волновых параметров, можно назвать задачу о расплывании волнового пакета, построенного из решений уравнения Шредингера. Решение задачи Коши с начальными условиями при $t = 0$ может быть получено в виде интеграла Фурье:

$$\Psi(z, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(k) e^{-i\omega(k)t + ikz} dk,$$

$$\Psi(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(z, 0) e^{-ikz} dz.$$

Здесь закон дисперсии $\omega(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$, где k – волновое число, \hbar – постоянная Планка, m – масса частицы, $\omega = E/\hbar$, E – полная энергия состояния, Ψ – волновая функция частицы. Такой интеграл может быть выражен с помощью известных интегралов Френеля, упоминавшихся выше. Это соответствует решению задачи во втором приближении теории дисперсии. Решение в произвольный момент времени должно содержать осцилляции амплитуды волновой функции и волнового числа k вблизи значения $k_0 = (2mE)^{1/2}/\hbar$.

Другим явлением, возможно, имеющим отношение к рассматриваемому кругу вопросов, – процесс, точнее – процессы этногенеза, для описания которых Л. Н. Гумилев предложил использовать кривую пассионарности. Сам автор часто прибегал к физическим аналогиям для объяснения явлений этногенеза. В работе [42] он провел аналогию между процессами в этносоциальной системе и в такой сложной и нелинейной физической системе, какой является лазер. Любому, кто знаком с многочисленными работами Л. Н. Гумилева, бросается в глаза сходство его кривой пассионарности и кривыми, описывающими зависимость амплитуды импульса, расплывающегося под действием дисперсии в среде распространения. В частности, эти особенности можно объяснить, вводя представление о составляющих импульса¹⁹ (выше они были названы узкополосными). Л. Н. Гумилев с соавт. пишет о том, что «...возникает несколько центров, борющихся между собой за преобладание...»[43]. Конечно, полной аналогии нет, но сходство явлений и их описаний налицо.

Заключение

В целом по итогам работ, появившихся к настоящему времени, как автора статьи, так и

¹⁹ Пассионарности.



других, можно заключить, что явление осцилляций волновых параметров является неотъемлемой характеристикой реальных сигналов, т. е. таких, которые описываются кусочно-аналитическими функциями и способны переносить информацию. Наличие осцилляций подтверждено разными методами. Как уже было сказано выше, это явление представляется временным аналогом пространственной интерференции встречных (в общем случае распространяющихся в одном направлении с разной скоростью) волн, при котором интерферируют спектрально-узкие составляющие импульса. Как уже говорилось выше, между обнаружением и исследованием этого явления прошло довольно большое время. Данный факт можно объяснять по-разному. К сожалению, формат настоящего издания не позволяет обсудить эту сторону вопроса²⁰.

Приложение

Покажем, что соображения Д. Е. Вакмана [19] если и помогают при некоторых условиях устранить быстрые осцилляции квадратурных компонент, то рожают новые проблемы. Напомним, что сигнал

$$u(t) = x(t)\cos t - y(t)\sin t, \quad (\text{П.1})$$

спектр которого заключен в полосе $1 - \varepsilon < \omega < 1 + \varepsilon$, $\varepsilon \ll 1$, может быть записан также в виде

$$u = (x + f_1 - f_1 \cos 2t + g_1 \sin 2t)\cos t - (y + g_2 + f_2 \sin 2t + g_2 \cos 2t)\sin t, \quad (\text{П.2})$$

причем $f_1 = f_2$, $g_1 = g_2$. Здесь $x(t)$, $y(t)$, $f_{1,2}(t)$ и $g_{1,2}(t)$ предполагаются медленными функциями по сравнению с осциллирующими множителями [19]. Это показывает, что если сигнал дан в виде (П.1), то в его квадратурные компоненты (и амплитуду, через которые она выражается) легко ввести гармоники на удвоенной частоте несущей и дополнительные медленные составляющие и, как следствие, подтверждает неоднозначность их определения. Однако, если сигнал уже имеет осциллирующие квадратурные компоненты, т. е. представлен в виде (П.2), то удалить их непросто. Действительно, если мы усредним их, то вместо (П.1) получим из (П.2)

$$ul(t) = (x + f_1)\cos t - (y + g_2)\sin t \quad (\text{П.3})$$

(f_1 и g_2 – произвольные функции), что отличается от (П.1).

Какое отношение ко всему этому имеет аналитический сигнал? Ведь автор надеется с его

помощью устранить все противоречия, связанные с быстрыми осцилляциями. Он показывает, что, применяя АС к (П.1), можно получить те же выражения, что и на основе практического подхода, т. е. амплитуда $a(t)$ и фаза $\Phi(t)$ сигнала будут иметь вид

$$a(t) = \sqrt{x^2 + y^2}, \Phi(t) = t + \arctg \frac{y}{x}. \quad (\text{П.4})$$

Но здесь важно то, что $x(t)$ и $y(t)$ в (П.1) не содержат быстрых осцилляций и поэтому выносятся за знак преобразования Гильберта. В то же время применение АС к (П.2) даст аналогичный результат только при условии $f_1 = f_2$, $g_1 = g_2$. То, что вычисления, выполненные на основе теории комплексного сигнала, обеспечивают его выполнение не очевидно.

Обычно, в результате вычислений сигнал получается именно в форме (П.2). Применение преобразования Гильберта к нему при невыполнении условий $f_1 = f_2$, $g_1 = g_2$ не позволит устранить высокочастотных осцилляций из квадратурных компонент, а при его выполнении устранил вместе с ними вполне допустимые с физической точки зрения составляющие $f = f_{1,2}$ и $g = g_{1,2}$, которые невозможно отделить от x и y исходя из каких-либо практических соображений.

Список литературы

1. Johler J. T. The propagation Time of a Radio Pulse // IEEE Trans. 1963. Vol. AP-11, № 6. P. 661–668.
2. Вербин Ю. П. Проблемы дифракции и распространения радиоволн. Л., 1969. Вып. 9. С. 118.
3. Вербин Ю. П. Об оценке скорости распространения радиосигнала // РЭ. 1995. Т. 40, № 8, С. 1169–1176.
4. Sommerfeld A. Uber die Fortpflanzung des Lichtes in Dispergierenden Medien // Ann. Phys. 1914. Vol. 44, № 10. P. 177–202.
5. Brillouine L. Uber die Fortpflanzung des Lichtes in Dispergierenden Medien // Ibid. P. 203–240.
6. Вайнштейн Л. А. Распространение импульсов // УФН. 1976. Т. 118, № 2. С. 339–367.
7. Кузнецов П. И. О представлении одного контурного интеграла // ПММ. 1947. Т. 11, № 2. С. 267–270.
8. Хохлов Р. В. О нестационарных процессах в волноводе // ДАН СССР. 1948. Т. 61, № 4. С. 637–640.
9. Хохлов Р. В. О нестационарных процессах в волноводе // Вестник МГУ. 1948. Т. 8. С. 49–62.
10. Вайслейб Ю. В., Ганн С. П. Распространение радиоимпульсов в регулярном одномодовом волноводе // Радиотехника. 1977. Т. 32, № 7. С. 42–50.
11. Карбовяк А. Е. Переходные процессы в волноводах // Волноводные линии передачи с малыми потерями / пер. с англ. под ред. В. Б. Штейншлейгера. М., 1960. 460 с.

²⁰ Полная версия статьи содержится в книге автора «Распространение и обработка информации». Изд-во: LAP Lambert Academic Publishing GmbH & Co KG, Saarbrücken, Germany, 2012. 98 с. (<https://www.ljubluknigi.ru/store/gb/book/Распространение-и-обработка-информации/isbn/978-3-8465-8488-0>).



12. Лихтенберг А., Либерман М. Регулярная и стохастическая динамика / пер. с англ. под ред. Б. В. Чирикова. М., 1984. 529 с.
13. Стрелков Г. М. Распространение радиоимпульса в изотропной плазме // РЭ. 2006. Т. 51. С. 672–682.
14. Стрелков Г. М. Сложный радиосигнал в ионосферной плазме // РЭ. 2008. Т. 53, № 1. С. 1094–1103.
15. Стрелков Г. М., Нарышкин В. И. Распространение радиоимпульса с линейной частотной модуляцией в изотропной плазме // РЭ. 2008. Т. 53, № 1. С. 49–57.
16. Cizec V. V. Kinematische Theorie der Momentanfrequenz und Einholenden // AEU. 1989. Vol. 43, № 5. P. 288–291.
17. Шварцбург А. Б. Импульсная электродинамика негармонических сигналов // УФН. 1994. Т. 164, № 3. С. 333–335.
18. Шварцбург А. Б. Видеоимпульсы и непериодические волны в диспергирующих средах (точно решаемые модели) // УФН. 1998. Т. 168, № 1. С. 85–103.
19. Вакман Д. Е. О быстрых осцилляциях параметров колебаний // РЭ. 1986. Т. 31, № 7. С. 1459–1462.
20. Вайнштейн Л. А., Вакман Д. Е. Амплитуда, фаза, частота – основные понятия теории колебаний // УФН. 1977. Т. 123, вып. 4. С. 657–682.
21. Вайнштейн Л. А., Вакман Д. Е. Разделение частот в теории колебаний и волн. М., 1983. 287 с.
22. Вайнштейн Л. А. Математические вопросы теории распространения волн // Препринт ИРЭ АН СССР. М., 1979. С. 6–87.
23. Клаудер Дж., Сударшан Э. Основы квантовой оптики / пер. с англ. под ред. С. А. Ахманова. М., 1970. 430 с.
24. Рытов С. М., Кравцов Ю. А., Татарский В. И. Введение в статистическую радиофизику. М., 1978. 494 с.
25. Степанов Н. С. Интерференция волн // Физическая энциклопедия : в 5 т. Т. 2. М., 1990. 704 с.
26. Зайко Ю. Н. Частотная модуляция заполнения радиоимпульса, распространяющегося в диспергирующей среде // Изв. вузов: Радиофизика. 1989. Т. 32, № 12. С. 1558–1560.
27. Зайко Ю. Н. Программа расчета искажений прямоугольного импульса, распространяющегося в волноводе // ЭТ. 1989. Сер. 1. Электроника СВЧ, № 8. С. 75–76.
28. Зайко Ю. Н. Оценка погрешности измерений спектральной частоты радиоимпульса в волноведущей структуре с дисперсией // ЭТ. 1990. Сер. 8, № 1(138). С. 66–67.
29. Карпман В. И. Нелинейные волны в диспергирующих средах. М., 1973. 176 с.
30. Захаров В. Е., Манаков С. В., Новиков С. П., Питаевский Л. П. Теория солитонов. Метод обратной задачи. М., 1980. 320 с.
31. Зайко Ю. Н., Межуев Д. И. Распространение прямоугольного радиоимпульса с ЛЧМ в диспергирующей среде // Письма в ЖТФ, 1991. Т. 17, № 17. С. 50–53.
32. Ахманов С. А., Выслоух В. А., Чиркин А. С. Оптика фемтосекундных лазерных импульсов. М., 1988. 310 с.
33. Гинзбург В. Л. Распространение электромагнитных волн в плазме. М., 1967. 683 с.
34. Zayko Yu. N. The Geometrical Phase of Modulated Waves, Propagating in Dispersive Media // Applied Math. Letters. 1997. Vol. 10, № 5. P. 75–78.
35. Zayko Yu. N. The Features of Geometrical Phase of Modulated Wave Propagated in Plane Waveguide / Abstracts of «Nonlinear Dynamics and Chaos. Application in Physics, Biology and Medicine» (ICDN-96). Russia, July 8–14. Saratov, 1996. P. 188.
36. Винницкий С. И., Дербов В. Л., Дубовик В. М., Марковски Б. Л., Степановский Ю. П. Топологическая фаза в квантовой механике и поляризационной оптике // УФН. 1990. Т. 160, № 6. С. 1–49.
37. Зайко Ю. Н. «Осцилляции» римановых инвариантов систем дифференциальных гиперболических уравнений // Письма в ЖТФ. 2000. Т. 26, № 19. С. 84–87.
38. Уизем Дж. Линейные и нелинейные волны / пер. с англ. под ред. А. Б. Шабата. М., 1977. 622 с.
39. Zayko Yu. N. Interaction of Narrow-Band Signal Components and Complex Behavior of PDE Characteristics in x, t – Plane // Proc. SPIE. 2006. Vol. 6165. P. i06.
40. Бхатнагар Б. Нелинейные волны в одномерных дисперсных системах / пер. с англ. П. Е. Краснушкина, Н. Р. Сибгатуллина. М., 1983. 136 с.
41. Зайко Ю. Н. Точные решения уравнений Максвелла-Эйнштейна // Изв. Сарат. ун-та. Новая серия. 2010. Т. 10. Сер. Физика, вып. 1. С. 50–58.
42. Гумилев Л., Ермолаев В. Ю. Проблемы предсказуемости в изучении процессов этногенеза // Пределы предсказуемости. М., 1997. 248 с.
43. Гумилев Л. Н. Конец и вновь начало. СПб., 2008. 352 с.



УДК 535.4; 681.787

ЦИФРОВАЯ ГОЛОГРАФИЧЕСКАЯ ИНТЕРФЕРОМЕТРИЯ МИКРОДЕФОРМАЦИЙ РАССЕИВАЮЩИХ ОБЪЕКТОВ

О. В. Диков*, С. А. Савонин, В. И. Качула,
О. А. Перепелицына*, В. П. Рябухо

Саратовский государственный университет
E-mail: rvp@sgu.ru

*Институт проблем точной механики и управления РАН, Саратов
E-mail: rvp-optics@yandex.ru



Рассматриваются основы метода голографической интерферометрии с записью цифровой голограммы и численной процедурой восстановления комплексной амплитуды объектного поля для расчета поля микросмещений поверхности объекта. Обсуждаются схемные решения и экспериментальные результаты.

Ключевые слова: цифровая голография, голографическая интерферометрия, численная обработка интерферограмм, микродеформации.

Digital Holographic Interferometry of Microdeformations of the Scattering Objects

O. V. Dikov, S. A. Savonin, V. I. Kachula,
O. A. Perepelitsyna, V. P. Ryabukho

The principles of holographic interferometry with recording digital holograms and numerical reconstruction procedure of the complex amplitude of the object wave for the calculation of the field displacement surface of the object being discussed. The scheme design and experimental results of the study are presented.

Key words: digital holography, holographic interferometry, numerical interferogram processing, microdeformation.

Введение

В голографической интерферометрии в отличие от классической осуществляется интерференция волн, проходящих по одному пути, в разные моменты времени. Характер картины интерференции обусловлен лишь изменениями объекта за время между экспозициями. Голографическим интерференционным методом можно исследовать объекты неправильной формы и шероховатые, диффузно отражающие свет. Голографическая интерферометрия нечувствительна к дефектам оптических деталей установки, что позволяет исследовать интерферометрическим методом объекты достаточно больших размеров.

При помощи цифровых регистрирующих устройств существует возможность производить запись голограммы в цифровом виде. Тогда восстановление с голограммы объектного волнового поля и последующее формирование изображения объекта реализуется через последовательность процедур численного преобразования цифровой

голограммы [1]. Подобный метод записи голограммы и восстановления с нее информации о записанном объектном волновом поле называется цифровой голографией.

Компьютерная обработка цифровых голограмм позволяет восстанавливать поля комплексных амплитуд изображения поверхности исследуемого объекта и, соответственно, определять фазовые изменения этого поля, возникающие вследствие микроперемещений поверхности объекта. В силу своей природы интерференционные измерения, использующие в качестве меры длины световую волну, выполняются с точностью до долей длины волны лазерного излучения, что и обеспечивает высокую точность измерений. Наиболее эффективные результаты при контроле поля микроперемещений могут быть получены при использовании цифровой голографической интерферометрии с многоэкспозиционной записью голограмм последовательных состояний исследуемого объекта (с записью потока кадров цифровых голограмм) [2].

1. Принципы цифровой голографической интерферометрии

В цифровой голографии и, соответственно, в методе цифровой голографической интерферометрии записываются цифровые голограммы объектного поля. Пространственное распределение интенсивности $I(\vec{r})$ в картине интерференции объектной и опорной волн записывается с помощью матричного цифрового фотоэлектрического детектора – ПЗС-матрицы или КМОП-матрицы. Полученная таким образом цифровая голограмма $I(\vec{r}_{jk}) = I(x_j, y_k)$ представляет собой матрицу чисел размером $M \times N$, совпадающим с размером цифровой фотоэлектрической матрицы.

Если запись голограммы производится в дифракционном поле, то восстановление изображения происходит в результате процесса дифракционного распространения восстановленного поля от голограммы до области локализации изображения



[3]. Математически дифракционный процесс распространения волнового поля с достаточной точностью можно описать с помощью интегральных преобразований Френеля–Кирхгофа комплексной амплитуды волнового поля, восстановленного в плоскости голограммы. Современные цифровые технологии позволяют численно реализовать подобные интегральные преобразования.

Численное интегральное дифракционное преобразование цифровой голограммы, в частности преобразование Френеля, позволяет получать дискретное представление комплексной амплитуды объектного поля в прямом $U_S(\vec{p}_{0jk}) = U_S(x_{0j}, y_{0k})$ или комплексно сопряженном $U_S^*(x_{0j}, y_{0k})$ виде, реконструировать в численной форме изображение объекта $I_S(x_{0j}, y_{0k}) = |U_S|^2 = |U_S^*|^2$ и с использованием графических компьютерных средств визуализировать это цифровое изображение.

Возможность восстановления комплексной амплитуды объектного поля $U_S(\vec{p}_0)$ или $U_S^*(\vec{p}_0)$, в свою очередь, предопределяет возможность реализации в численном виде метода голографической интерферометрии [4,5]. Для этого необходимо выполнить процедуру сложения или вычитания комплексных амплитуд объектных полей U_{S1} и U_{S2} , восстановленных с цифровых голограмм, записанных при различных деформированных состояниях исследуемого объекта, и визуализировать распределение суммарного или разностного изображения. На разностном или суммарном изображении образуются интерференционные полосы, параметры которых позволяют определить поле микроперемещений поверхности $\vec{g}(\vec{p}_0)$ объекта.

2. Схемные решения для цифровой голографической интерферометрии

Схемы записи цифровых голограмм принципиально не отличаются от схем записи аналоговых голограмм. Отличия имеют количественный характер и определяются сравнительно низкой разрешающей способностью матричных фотоприемников по сравнению с фотопластинками для записи голограмм. Расстояние между центрами пикселей Δx матричных фотоприемников составляет ≈ 3 мкм, что соответствует разрешающей способности $R = 1/\Delta x \approx 330$ лин/мм. Фотопластинки для голографии имеют разрешение $R = 5000$ лин/мм.

В голографии необходимо записать пространственно высокочастотное распределение интенсивности $I(\vec{p})$ в виде системы интерференцион-

ных полос, модулированных спеклами объектного поля. В соответствии с критерием Найквиста [6] пространственная частота этих полос f_s должна быть ниже пространственной частоты расположения пикселей матрицы $f_d = 1/\Delta x : f_s \leq f_d/2$ или $\Lambda \geq 2\Delta x$, где Λ – период полос голограммы. Поскольку Λ определяется длиной волны λ_0 и углом схождения опорной и объектной волн θ на матрицу, то при заданной λ_0 имеем ограничения на угол падения опорного пучка, $\sin \theta \leq \lambda_0/2\Delta x$. Для $\Delta x \approx 3$ мкм и $\lambda_0 \approx 0,63$ мкм имеем $\theta \leq 6^\circ$.

Другая особенность цифровой голографии связана с ограничениями, накладываемыми на численное преобразование цифровой голограммы. В принципе возможна реализация алгоритма любого дискретного дифракционного преобразования: Френеля–Кирхгофа, Френеля или Фурье. Однако наиболее быстрым и легко реализуемым является алгоритм быстрого преобразования Фурье, который проще использовать в практике цифровой голографии. Поэтому схемы записи цифровых голограмм должны быть построены таким образом, чтобы для восстановления комплексной амплитуды изображения объекта использовалось Фурье-преобразование [7]. К таким схемам относится схема записи безлинзовой Фурье-голограммы (рис. 1), в которой источник S_R опорной волны располагается в той же плоскости \vec{p}_0 , что и поверхность объекта.

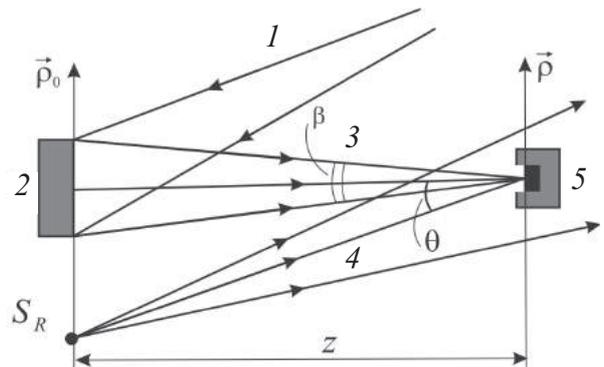


Рис. 1. Схема записи безлинзовой цифровой Фурье-голограммы: 1 – освещающий лазерный пучок; 2 – объект; 3 – объектное поле; 4 – опорная волна; 5 – матричный фотоприемник

Замечательное свойство такой схемы записи заключается в возможности использования для восстановления поля изображения объекта $U_S(\vec{p}_0)$ Фурье-преобразования численной голограммы $I(\vec{p})$:

$$U_S(\vec{p}_0) = F\{I(\vec{p})H(\vec{p})\} = F\{I(\vec{p})\} \otimes F\{H(\vec{p})\}, \quad (1)$$



где $F\{\dots\}$ – символ Фурье-преобразования, \otimes – знак операции свертки, $H(\vec{\rho})$ – апертурная функция матрицы.

3. Цифровые голограммы сфокусированного изображения

При записи безлинзовой Фурье-голограммы имеются ограничения на поперечные размеры объекта, обусловленные необходимостью разрешения матрицей фотоприемников спекл-структуры дифракционного поля и превышения размерами спеклов $\varepsilon_{\perp} \approx \lambda/\beta$ периода Λ интерференционных полос, $\varepsilon_{\perp} > 2\Lambda > \Delta x$.

Ограничение на поперечные размеры объекта в определенной степени может быть снято в цифровой голографии сфокусированного изображения объекта (рис. 2), когда в плоскость матрицы с помощью линзового объектива фокусируется изображение объекта с уменьшением или увеличением в зависимости от размеров объекта и направляется опорный пучок света. Подбором коэффициента увеличения (уменьшения) можно сфокусировать на матрицу изображение всего объекта или его фрагмента в зависимости от решаемой прикладной задачи.

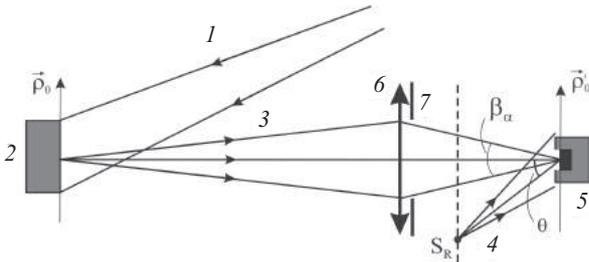


Рис. 2. Схема записи цифровой голограммы сфокусированного изображения с уменьшением размеров изображения по отношению к размеру объекта: 1 – освещающий пучок; 2 – объект; 3 – объектный пучок света; 4 – опорный пучок; 5 – матричный фотоприемник; 6 – линзовый объектив; 7 – апертурная диафрагма

При записи голограммы сфокусированного изображения на матрице фотоприемника формируется изображение объекта. Поэтому цифровая голограмма объекта $I(\vec{\rho}_0')$ уже содержит информацию об изображении объекта $U_S(\vec{\rho}_0')$ и $I_S(\vec{\rho}_0')$:

$$I(\vec{\rho}_0') = I_S(\vec{\rho}_0') + I_R + U_S(\vec{\rho}_0')U_R^* + U_S^*(\vec{\rho}_0')U_R = I_S(\vec{\rho}_0') + I_R + 2A_S(\vec{\rho}_0')A_R \cos[\varphi_S(\vec{\rho}_0') - \varphi_S(\vec{\rho}_0')]. \quad (2)$$

В данном уравнении содержится информация об амплитуде $A_S(\vec{\rho}_0')$ и фазе $\varphi_S(\vec{\rho}_0')$ объектной волны. Для восстановления комплексной амплитуды объектного поля $U_S(\vec{\rho}_0') = A_S(\vec{\rho}_0') \exp[i\varphi(\vec{\rho}_0')]$ необходимо выполнить численное преобразова-

ние голограммы $I(\vec{\rho}_0')$, полосовую фильтрацию в пространственно-частотном спектре голограммы, а затем обратное (или еще раз прямое) Фурье-преобразование отфильтрованного пространственного спектра [8]. В соответствии с уравнением (2) имеем:

$$F\{I\} = F\{I_S\} + F\{I_R\} + F\{U_S\} \otimes F\{U_R^*\} + F\{U_S^*\} \otimes F\{U_R\}, \quad (3)$$

где первое слагаемое $F\{I_S\}$ определяет спектр интенсивности изображения объекта; второе слагаемое $F\{I_R\}$ – спектр интенсивности опорной волны, который в силу постоянства I_R сосредоточен в области нулевых частот; третье и четвертое слагаемые определяют спектры сопряженных комплексных амплитуд изображения объекта, смещенных в область высоких положительных и отрицательных частот, определяемых пространственной частотой опорной волны $f_R = \pm \lambda_0^{-1} \sin \theta$ в силу наклонного падения опорной волны под углом θ на матрицу.

На рис. 3 представлено изображение пространственного спектра $F\{U_S\}$ цифровой голограммы сфокусированного изображения $I(\rho)$, полученного путем Фурье-преобразования голограммы. При записи этой голограммы $I(\vec{\rho}_0')$ квазиточечный опорный источник S_R (см. рис. 2) располагался в плоскости выходного зрачка объектива. Следовательно, выполнялось условие записи безлинзовой голограммы Фурье выходного зрачка. Поэтому в спектре на рис. 3 боковые изображения $|F\{U_S^*U_R\}|^2$ и $|F\{U_SU_R^*\}|^2$ представляют собой распределения интенсивности объектного поля (и поля комплексно ему сопряженного) выходного зрачка объектива.

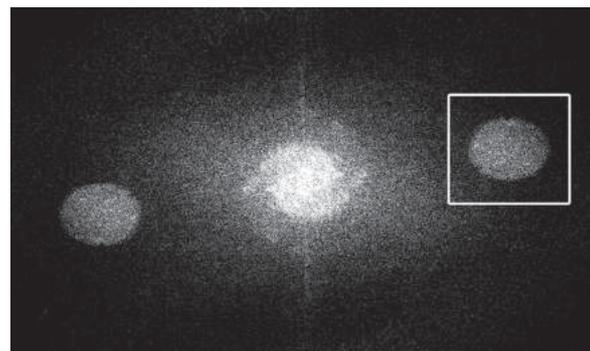


Рис. 3. Фильтрация объектных компонент пространственного спектра цифровой голограммы сфокусированного изображения

Фильтрация пространственного спектра комплексной амплитуды изображения $F\{U_SU_R^*\}$ или $F\{U_S^*U_R\}$, как это показано на рис. 3, и обратное Фурье-преобразование отфильтрованного участка



спектра позволяют восстанавливать комплексную амплитуду поля изображения объекта:

$$F^{-1}\{BF\{U_S^*U_R\}\}=F^{-1}\{B\}\otimes(U_S^*U_R), \quad (4)$$

где B – апертурная функция окна фильтрации спектра.

Таким образом, пространственно частотная фильтрация цифровой голограммы сфокусированного изображения объекта позволяет восстанавливать с определенной точностью комплексную амплитуду поля изображения объекта и реализовать в численном виде метод голографической интерферометрии микроперемещений рассеивающих объектов или путем формирования интерференционных полос на изображении объекта, или путем непосредственного вычисления

полей фазовых сдвигов объектного поля $\Delta\Psi(\vec{\rho}_0)$, вызванных микросмещениями.

4. Определение поля микроперемещений поверхности объекта

На рис. 4 представлены голографические изображения-интерферограммы, полученные методом цифровой голографической интерферометрии. Объектом контроля служила упругая пластина-мембрана, жестко закрепленная по контуру, подвергаемая деформации под действием сосредоточенной силы, приложенной по нормали в центре с обратной стороны пластины. В результате действия приложенной силы точки поверхности объекта претерпевают микросмещения, поле которых и являются предметом исследования.

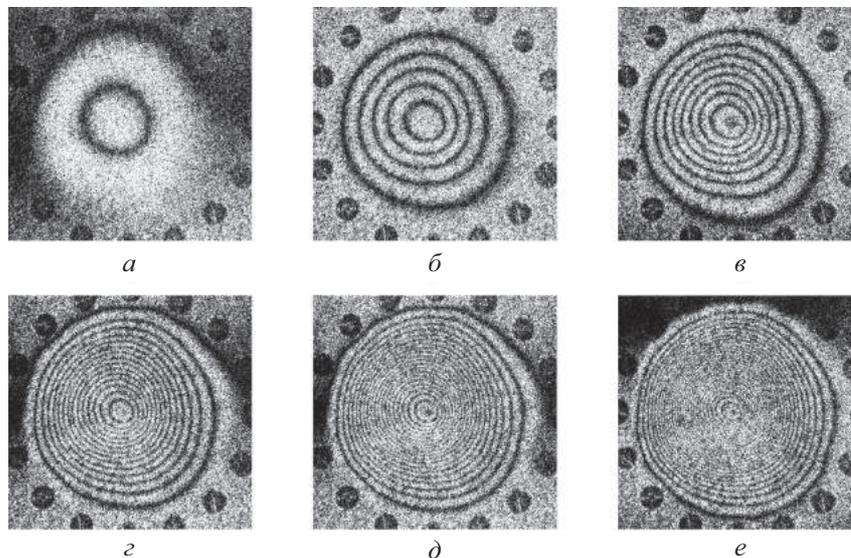


Рис. 4. Цифровые интерферограммы деформации мембраны под действием сосредоточенной силы для различных величин нагрузки, Н : $a - 0,031$ Н; $b - 0,154$ Н; $в - 0,308$ Н; $г - 0,462$ Н; $д - 0,615$ Н; $e - 0,769$ Н

В эксперименте записываются цифровые голограммы изображений объекта, соответствующие его различным деформационным состояниям. Метод цифровой голографии предоставляет возможность записи достаточно большого числа голограмм, соответствующих различным последовательным состояниям объекта. Такая многоэкспозиционная запись голограмм позволяет существенно расширить сверху диапазон измеряемых смещений и деформаций контролируемого объекта.

Восстановленные комплексные амплитуды объектных полей, соответствующие различным состояниям объекта, имеют различные фазовые распределения, вызванные изменением пространственного положения точек поверхности

исследуемого объекта. Если амплитуды полей не изменяются, а меняются только фазы полей, то распределение интенсивности в суммарном изображении имеет вид

$$I(\vec{\rho}_0) = 2I_{ik}(\vec{\rho}_0)[1 + \cos(\Delta\Psi_{ik}(\vec{\rho}_0))], \quad (5)$$

где индексы i и k определяют различные состояния объекта.

Получаемое действительное цифровое изображение $I(\vec{\rho}_0)$ согласно (5) оказывается промодулированной косинусоидальной функцией, зависящей от разности фаз. В методе цифровой голографической интерферометрии эта модуляция проявляется в виде системы интерференционных полос, образующихся на восстановленном голографическом изображении.



Система интерференционных полос на изображении пластины качественно и количественно отражает поле микроперемещений $\vec{g}(\vec{\rho}_0)$ точек поверхности пластины. Пространственное фазовое распределение $\Delta\Psi(\vec{\rho}_0)$ определяется выражением

$$\Delta\Psi(\vec{\rho}_0) = \frac{2\pi}{\lambda_0} \vec{g}(\vec{\rho}_0) (\vec{N}_0 - \vec{N}_S), \quad (6)$$

где λ_0 – длина волны, \vec{N}_0 и \vec{N}_S – единичные вектора направлений освещения и регистрации голограммы.

На рис. 5 представлены графики распределения смещений, рассчитанные с использованием (6), для различных величин сосредоточенной нагрузки в зависимости от координат в плоскости объекта.

Анализ полученных интерферограмм проводился следующим образом: для каждой интерференционной картины (см. рис. 4) определялась пространственная фазовая модуляция $\Delta\Psi(x)$ в на-

правлении оси x , обусловленная смещением точек поверхности исследуемого отражающего объекта. Определялись дискретные значения $\Delta\Psi_m(x_i) = m\pi$ по точкам пересечения оси x с центрами светлых и темных полос. Далее с использованием выражения (6) рассчитывались значения вектора смещения.

Методом цифровой голографической интерферометрии были исследованы деформационные смещения ряда узлов и конструкций различного технического назначения и различной формы: резервуары с плоскими (рис. 6, рис. 7) и цилиндрическими поверхностями, претерпевающие деформации под действием распределенных сил статического и динамически изменяющегося давления; упругие детали под действием точечной деформирующей нагрузки, а также промышленные сварные конструкции и узлы запорных соединений и элементов газораспределительных пунктов.

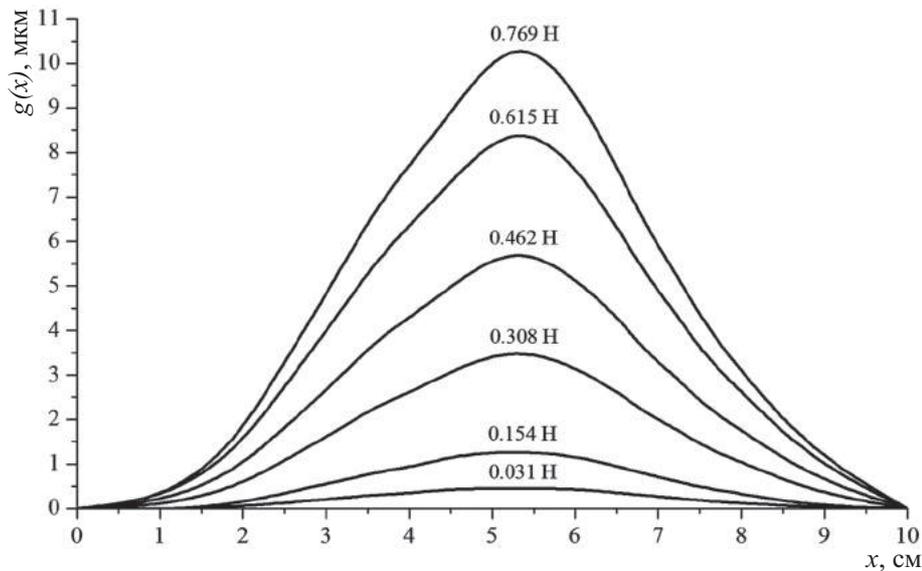


Рис. 5. Рассчитанный профиль деформации мембраны под действием сосредоточенной силы для различных величин нагрузки

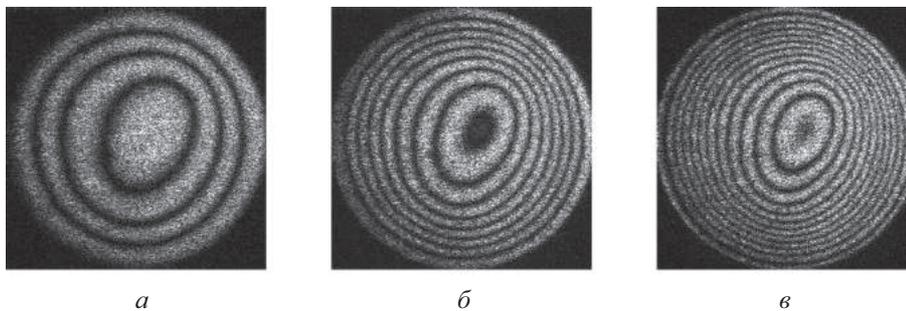


Рис. 6. Цифровые интерферограммы деформации мембраны под действием распределённой силы для различных величин избыточного давления МПа: а – 0.78 МПа; б – 1.86 МПа; в – 2.35 МПа

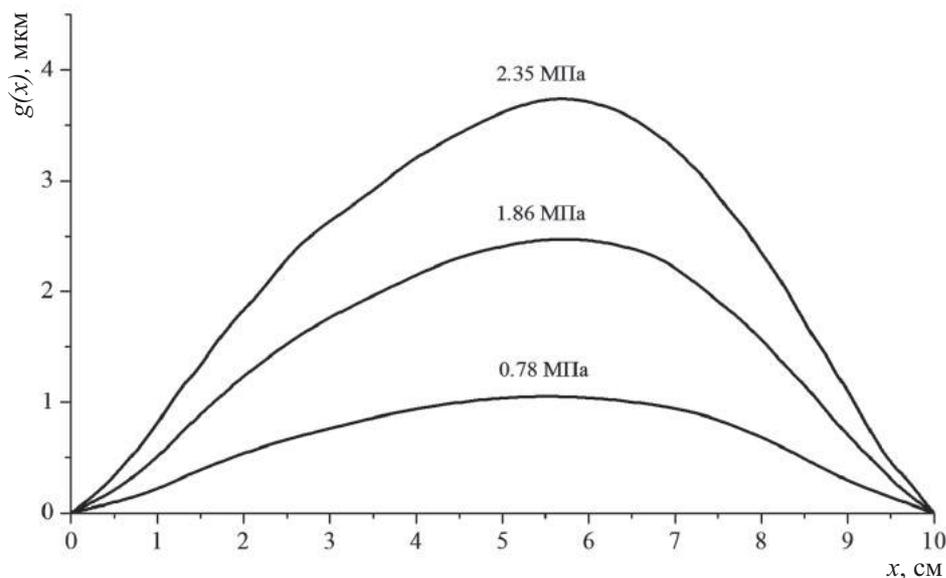


Рис. 7. Рассчитанный профиль деформации мембраны под действием распределённой силы для различных величин избыточного давления

Заключение

Цифровые голографические интерференционные измерения позволяют определять поля микросмещений и соответственно микродеформаций объектов – реальных деталей и конструкций с рассеивающей оптически негладкой поверхностью. Применение апостериорной компьютерной обработки серии цифровых голограмм предоставляет новые практические возможности для определения поля микродеформаций с субмикронной точностью в широком диапазоне перемещений – от долей до сотен микрометра. Относительно высокие частотные параметры современных цифровых матричных фотоэлектрических приборов предопределяют возможность исследования динамически изменяющихся деформационных процессов. Эти измерительные возможности метода многоэкспозиционной цифровой голографической интерферометрии могут найти эффективное применение в прикладных задачах механики деформируемого тела, в задачах исследования напряженно деформируемых состояний конструкций при их прочностных испытаниях, включая вибрационные и ударные испытания. Совершенствование метода цифровой голографической интерферометрии – повышение разрешающей способности и функциональных возможностей – во многом связано с прогрессом развития цифровых устройств фото-

электрической записи оптических изображений и развитием программных средств обработки этих изображений.

Список литературы

1. Schnars U., Jueptner W. Direct recording of holograms by a CCD-target and numerical reconstruction // *Appl. Opt.* 1994. Vol. 33, № 2. P. 179–181.
2. Pedrini G., Osten W., Gusev M. E. High-speed digital holographic interferometry for vibration measurement // *Appl. Opt.* 2006. Vol. 45, № 15. P. 3456–3462.
3. Балтийский С. А., Гуров И. П., Де Никола С., Коннола Д., Ферраро П. Современные методы цифровой голографии // *Проблемы когерентной и нелинейной оптики* / под ред. И. П. Гурова и С. А. Козлова. СПб., 2004. С. 91–117.
4. Schnars U., Jueptner W. *Digital Holography*. Berlin, 2004. 164 p.
5. Kreis T. *Handbook of holographic interferometry: optical and digital methods*. Wiley: VCH, 2005. 542 p.
6. Onural L. Sampling of the Diffraction Field // *Appl. Opt.* 2000. Vol. 39, № 32. P. 5929–5935.
7. Краснопевцев Е. А. Преобразование Фурье–Френеля в голографической интерферометрии // *Оптический журн.* 2006. Т. 73, № 2. С. 31–36.
8. Абрамов А. Ю., Савонин С. А., Диков О. В., Перепелицына О. А., Рябухо В. П. Цифровая голографическая интерферометрия сфокусированных изображений фазовых микрообъектов // *Фундаментальные проблемы оптики-2010: сб. тр. конф.* / под ред. проф. В. Г. Беспалова, проф. С. А. Козлова. СПб., 2010. Т. 1. С. 272–274.



УДК 539.182/184, 519.677

О ВЫЧИСЛЕНИИ АТОМНЫХ ИНТЕГРАЛОВ С ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННЫМИ ФУНКЦИЯМИ

В. В. Нечаев, О. Д. Зиганшина, Н. К. Сучкова

Саратовский государственный технический университет им. Ю. А. Гагарина
Email: VL-Nechaev@yandex.ru

Рассмотрен новый тип корреляционных атомных интегралов, возникающих в вариационных расчетах энергии трехчастичных кулоновских систем. Подынтегральная функция в них наряду с линейным членом по межчастичному расстоянию под экспонентой дополнительно содержит квадратичный член. Показано, что эти интегралы аналитически выражаются через функцию Фаддеевой чисто мнимого аргумента и ее производные. Разработан устойчивый и быстрый алгоритм для вычисления производных функции Фаддеевой до двадцатого порядка. Даны тестовые значения исследованных специальных функций.

Ключевые слова: атомные интегралы, трехчастичные кулоновские системы, производные функции Фаддеевой, устойчивый алгоритм расчета.

Calculation of Atomic Integrals with Exponentially Correlated Functions

V. V. Nechaev, O. D. Ziganshina, N. K. Suchkova

A new type of correlation atomic integrals occurring in variation energy calculations of three-particle Coulomb systems is studied. A integrand in them along with an interparticle distance linear term under an exponent additionally contains a quadratic term. It is demonstrated that these integrals are analytically expressed through Faddeeva function of a pure imaginary argument and its derivatives. A stable and fast algorithm for calculation of Faddeeva function derivatives to the twentieth order is developed. The test values of the studied special functions are provided.

Keywords: atomic integrals, three-particle Coulomb systems, derivatives of Faddeeva function, stable algorithm for calculation.

При проведении высокоточных вариационных расчетов энергии трехчастичных кулоновских систем возникает необходимость в быстром вычислении следующих шестикратных интегралов [1]:

$$I(i, j, k) = \int r_1^i r_2^j r_{12}^k \exp(-\alpha r_{12}^2 - \beta r_{12} - b r_1 - c r_2) dV_1 dV_2, \quad (1)$$

где, i, j, k – целые числа; r_1, r_2 – модули радиус-векторов точек 1 и 2 относительно некоторой точки трехмерного пространства; r_{12} – расстояние между точками 1 и 2; α, β, b, c – постоянные действительные коэффициенты; dV_1, dV_2 – элементы объема для векторов r_1, r_2 соответственно.

В исходном выражении (1) можно провести интегрирование по угловым переменным с использованием преобразования, предложенного в [2]. Перейдем к сферическим координатам для каждого трехмерного интеграла и свяжем полярную ось системы координат для внутреннего интеграла с радиус-вектором r_1 для внешнего интеграла. Учитывая, что

$$r_{12}^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos(\theta),$$

$$dr_{12} = -\frac{r_1 r_2}{r_{12}} d(\cos(\theta))$$

получаем

$$I(i, j, k) = \int_0^\infty d\varphi_1 \int_0^\pi d\theta_1 \sin(\theta_1) \int_0^{2\pi} d\varphi_2 R(i, j, k) = 8\pi^2 R(i, j, k), \quad (2)$$

где

$$I(i, j, k) = \int_0^\infty dr_1 \int_0^\infty dr_2 \int_{|r_1-r_2|}^{r_1+r_2} dr_{12} r_1^{i+1} r_2^{j+1} r_{12}^{k+1} \exp(-\alpha r_{12}^2 - \beta r_{12} - b r_1 - c r_2).$$

Интеграл (2) сходится при условии

$$((\alpha > 0) \wedge (b + c > 0)) \vee ((\alpha = 0) \wedge (b + c > 0) \wedge (b + \beta > 0) \wedge (c + \beta > 0)). \quad (3)$$

Докажем это утверждение для $I(-1, -1, -1)$. Воспользуемся периметрическими координатами [3]. Связь r_1, r_2, r_{12} с новыми координатами в общем случае задается линейным преобразованием:

$$r_1 = a_2 \rho_2 + a_{12} \rho_{12},$$

$$r_2 = a_{12} \rho_{12} + a_1 \rho_1,$$

$$r_{12} = a_1 \rho_1 + a_2 \rho_2,$$

где a_1, a_2, a_{12} – постоянные, отличные от нуля коэффициенты. Требование отличия коэффициентов от нуля необходимо для биективности преобразования. Положим $a_1 = a_2 = a_{12} = 1$. Якобиан перехода в этом случае имеет вид

$$J = \det \begin{vmatrix} 0 & a_2 & a_{12} \\ a_1 & 0 & a_{12} \\ a_1 & a_2 & 0 \end{vmatrix} = 2a_1 a_2 a_{12} = 2.$$



Основное достоинство периметрических координат заключается в том, что они позволяют перейти от зависимых пределов в интеграле (2) к независимым. В таких координатах условие треугольника

$$\begin{aligned} |r_2 - r_{12}| &\leq r_1 \leq r_2 + r_{12}, \\ |r_{12} - r_1| &\leq r_2 \leq r_{12} + r_1, \\ |r_1 - r_2| &\leq r_{12} \leq r_1 + r_2 \end{aligned}$$

выполняется автоматически для любых сочетаний периметрических координат $\rho_1, \rho_2, \rho_{12}$, т. е.

$$\begin{aligned} I(-1, -1, -1) &= 8\pi^2 \int_0^\infty \exp(-\alpha r_{12}^2 - \beta r_{12}) dr_{12} \int_0^\infty \exp(-br_1) dr_1 \int_{|r_1 - r_2|}^{r_1 + r_2} \exp(-cr_2) dr_2 = \\ &= 16\pi^2 \int_0^\infty \int_0^\infty d\rho_1 d\rho_2 \exp(-\alpha(\rho_1 + \rho_2)^2 - (\beta + b)\rho_1 - (\beta + c)\rho_2) \int_0^\infty d\rho_{12} \exp(-(b + c)\rho_{12}). \end{aligned} \quad (4)$$

Из этого выражения следует необходимое условие сходимости $b + c > 0$.

Теперь рассмотрим два случая:

1) $\alpha = 0$.

Интеграл $\int_0^\infty \int_0^\infty d\rho_1 d\rho_2 \exp(-(\beta + b)\rho_1 - (\beta + c)\rho_2)$

представляется в виде двух сомножителей

$\int_0^\infty d\rho_1 \exp(-(\beta + c)\rho_1)$ и $\int_0^\infty d\rho_2 \exp(-(\beta + b)\rho_2)$, откуда вытекают еще два условия сходимости $-\beta + b > 0$ и $\beta + c > 0$.

2) $\alpha \neq 0$. Очевидно, интеграл (4) расходится при $\alpha < 0$. При $\alpha < 0$ интеграл

$\int_0^\infty \int_0^\infty d\rho_1 d\rho_2 \exp(-\alpha(\rho_1 + \rho_2)^2 - (\beta + b)\rho_1 - (\beta + c)\rho_2)$

всегда меньше, чем интеграл

$$\int_0^\infty \int_0^\infty d\rho_1 d\rho_2 \exp(-\alpha\rho_1 - \alpha\rho_2 - (\beta + b)\rho_1 - (\beta + c)\rho_2).$$

Данный интеграл факторизуется на интегралы

$$\int_0^\infty d\rho_1 \exp(-\alpha\rho_1^2 - (\beta + b)\rho_1),$$

$$\begin{aligned} I(-1, -1, -1) &= 8\pi^2 \int_0^\infty \exp(-\alpha r_{12}^2 - \beta r_{12}) dr_{12} \int_0^\infty \exp(-br_1) dr_1 \int_{|r_1 - r_2|}^{r_1 + r_2} \exp(-cr_2) dr_2 = \\ &= 8\pi^2 \int_0^\infty \exp(-\alpha r_{12}^2 - \beta r_{12}) \varphi(r_{12}) dr_{12} = \end{aligned} \quad (6)$$

$$= \frac{8\pi^2}{\alpha(b+c)(x-y)} (g_0(y) - g_0(x)) = \frac{4\pi^2}{\alpha\sqrt{\alpha}(x+y-t)} \left(\frac{g_0(y) - g_0(x)}{(x-y)} \right),$$

где $x = (b + \beta) / 2\sqrt{\alpha}$, $y = (c + \beta) / 2\sqrt{\alpha}$, $t = \beta / \sqrt{\alpha}$,

$$\varphi(x) = \int_0^\infty \exp(-bz) \int_{|z-x|}^{z+x} \exp(-cy) dy = \frac{2(\exp(-bx) - \exp(-cx))}{(c^2 - b^2)}, \quad g_0(x) = \exp(x^2) \int_x^\infty \exp(-z^2) dz.$$

они независимы. Так же как и межчастичные расстояния, периметрические координаты положительны.

Введем вспомогательный производящий интеграл:

$$I(-1, -1, -1) = \int \frac{\exp(-\alpha r_{12}^2 - \beta r_{12} - br_1 - cr_2)}{r_1 r_2 r_{12}} dV_1 dV_2.$$

Проведем интегрирование по угловым переменным как в уравнении (2) и преобразуем его к периметрической системе координат:

$$\int_0^\infty d\rho_2 \exp(-\alpha\rho_2^2 - (\beta + c)\rho_2),$$

которые, при сделанном предположении $\alpha < 0$, сходятся независимо от величин $\beta + c$ и $\beta + b$. Снизу величина интеграла (4) ограничена нулем, что доказывает сходимость $I(-1, -1, -1)$.

Интегралы $I(i, j, k)$ с $i \geq -1, j \geq -1, k \geq -1$ определяются дифференцированием производящего интеграла $I(-1, -1, -1)$ по параметрам β, b, c :

$$I(i, j, k) = \left(-\frac{\partial}{\partial b}\right)^{i+1} \left(-\frac{\partial}{\partial c}\right)^{j+1} \left(-\frac{\partial}{\partial \beta}\right)^{k+1} I(-1, -1, -1). \quad (5)$$

Интегралы (1) хорошо известны для случая $\alpha = 0$ [2–6]. Далее мы покажем, что в более общем случае $\alpha \neq 0$ они аналитически выражаются через функцию Фаддеевой [7] чисто мнимого аргумента и ее производные, а также рассмотрим устойчивый алгоритм их расчета.

Найдем аналитическое выражение для $I(-1, -1, -1)$:



Последняя функция возникает при интегрировании экспоненты от квадратичного полинома:

$$\int_0^{\infty} \exp(-z^2 - 2xz) dz = g_0(x). \quad (7)$$

$g_0(x)$ – это вспомогательная функция, которая носит название масштабированной дополнительной функции ошибок. Некоторые свойства $g_0(x)$ можно найти в [8], где рассмотрена функция комплексного аргумента $w(z) = \exp(-z^2) \operatorname{erfc}(-iz)$, так называемая функция Фаддеевой. Для чисто мнимого аргумента $w(z)$ с точностью до множителя совпадает с $g_0(x)$. Для случая комплексного аргумента эффективный алгоритм ее вычисления был разработан в работе [9] и недавно улучшен [10].

При дифференцировании интеграла $I(-1, -1, -1)$ по параметрам β, b, c (5) возникают производные от функции $g_0(x)$ высокого порядка

$$g_n(x) = (g_0(x))^{(n)},$$

эффективное и точное вычисление которых представляет самостоятельную проблему. Специфика прикладных задач [1] такова, что необходимо рассчитывать десятки тысяч интегралов (1) для различных значений параметров α, β, b, c с заданной точностью, поэтому использование имеющихся систем аналитических вычислений (Maple [11], Mathematica [12] и др.) ограничено тестовыми расчетами для отдельных частных случаев. В связи с этим нами была поставлена задача изучения свойств $g_n(x)$ и разработки быстрого, устойчивого алгоритма их вычисления.

Данные функции знакопостоянны (четные – положительные, нечетные – отрицательны):

$$g_{2j}(x) > 0, \quad g_{2j+1}(x) < 0, \quad j \geq 0. \quad (8)$$

Это свойство следует из формулы, получаемой дифференцированием (7):

$$g_n(x) = (-2)^n \int_0^{\infty} z^n \exp(-z^2 - 2xz) dz,$$

так как подынтегральное выражение всегда неотрицательно. Функции $g_n(x)$ подчиняются рекуррентным соотношениям:

$$g_1(x) = 2xg_0(x) - 1, \quad (9)$$

$$g_n(x) = 2xg_{n-1}(x) + 2(n-1)g_{n-2}(x) \quad (10)$$

и обладают следующими свойствами на бесконечности:

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} g_n(x)x^{-n} \exp(-x^2) = 2^n \sqrt{\pi},$$

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} g_n(x)x^{n+1} = (-1)^n \frac{n!}{2}. \quad (11)$$

При $x = 0$ можно получить простые соотношения $g_{2n}(0) = 2^{n-1}(2n-1)!!\sqrt{\pi}$, $g_{2n+1}(0) = -2^n(2n)!!$.

Функцию $g_n(x)$ можно также представить в виде

$$g_n(x) = g_0(x)K_n(x) + L_n(x), \quad (12)$$

где $K_n(x), L_n(x)$ – полиномы, как и $g_n(x)$, подчиняющиеся рекуррентной формуле (9), причем $K_0(x) = 1, K_1(x) = 2x; L_0(x) = 0, L_1(x) = -1$. $K_n(x)$ выражаются через полиномы Эрмита комплексного аргумента $K_n(x) = (-1)^n H_n(ix)$. Первое слагаемое правой части отношения

$$g_0(x) = -L_n(x)/K_n(x) + g_n(x)/K_n(x) \quad (13)$$

является оценкой сверху (нечетные n) и снизу (четные n) для $g_0(x)$, а при больших n, x оно же может использоваться для подсчета $g_0(x)$. Для доказательства этого рассмотрим систему рекурсий и ограничений

$$x_n = a_n x_{n-2} + b x_{n-1}, \quad (14)$$

$$y_n = a_n y_{n-2} - b y_{n-1}, \quad (15)$$

$$b, x_n, y_n > 0, \quad (16)$$

$$a_n > a_{n-1} > \dots > \max\{0, 1-b\}, \quad (17)$$

т. е. b, x_n , неотрицательны, y_n, a_n положительны, $\{a_n\}$ строго монотонно возрастает.

Лемма 1. Последовательность $\{x_n\}$ при

$$x_0 \leq x_1 \quad b \geq 1 - a_2 x_0 / x_1 \quad b \geq 1 - a_2 x_0 / x_1, \quad (18)$$

удовлетворяющая (14), (16), (17), строго монотонно возрастает, начиная со второго члена.

Доказательство. Из условий (18) и соотношения (14) следует $x_1 - x_0 \geq 0$, $x_2 - x_1 = a_2 x_0 + (b-1)x_1 \geq 0$. Строгая монотонность для следующих членов доказывается по индукции

$$x_n - x_{n-1} = a_n x_{n-2} - a_{n-1} x_{n-3} +$$

$$+ b(x_{n-1} - x_{n-2}) \geq a_{n-1}(x_{n-2} - x_{n-3}) +$$

$$+ b(x_{n-1} - x_{n-2}) \geq 0.$$

Здесь использовано условие (17) для замены a_n на a_{n-1} .

Лемма 2. Последовательности $\{x_{2j}/y_{2j}\}, \{x_{2j+1}/y_{2j+1}\}$, определяемые системой рекурсий (14), (15) и ограничений (16), (17), являются убывающими.

Доказательство. Система неравенств

$$\frac{x_n}{y_n} = \frac{a_n x_{n-2} + b x_{n-1}}{a_n y_{n-2} - b y_{n-1}} > \frac{x_{n-2}}{y_{n-2}} + \frac{b x_{n-1}}{a_n y_{n-1}} > \frac{x_{n-2}}{y_{n-2}}$$

доказывает лемму.

Лемма 3. Если последовательность частичных сумм

$$s_n = \sum_j^n 1/a_j \quad (19)$$

неограничена сверху, то последовательности $\{x_n\}, \{x_n/y_n\}$, определяемые системой рекурсий



(14), (15) и ограничений (16), (17), (18), неограничены сверху.

Доказательство. Из уравнения (15) и условий (16), (17) следует, что

$$y_n < a_n y_{n-2}, \quad y_n < y_m \prod_{j=1}^{[n/2]} a_{2j+m},$$

где $m = \text{mod}(n, 2)$, $[n/2]$ – целая часть числа $n/2$.

Последовательность $\{x_n\}$ строго монотонно возрастает по условию (18) и

$$x_n \geq (a_n + b)x_{n-2}, \quad x_n \geq x_0 \prod_{j=1}^{[n/2]} (a_{2j+m} + b). \quad (20)$$

Тогда

$$\frac{x_n}{y_n} \geq k \prod_{j=1}^{[n/2]} \left(1 + \frac{b}{a_{2j+m}} \right) \geq bk \sum_{j=1}^{[n/2]} \frac{1}{a_{2j+1}}, \quad (21)$$

где $k = \min\{x_1, x_0\} / y_m$.

Последовательность частичных сумм в (21) является неограниченной при $n \rightarrow \infty$, как и последовательность (19). Последовательность $\{x_n\}$ неограниченна в силу выполнения неравенств (17) и (20).

Следствие 1. Прямая рекурсия (9), (10) для функции $g_n(x)$ неустойчива при $x > 0$, а знак ошибки одинаков для всех $g_n(x)$.

Доказательство. Обозначим через $g'_n(x)$ сумму точной функции $g_n(x)$ и ошибки $\varepsilon_n(x)$: $g'_n(x) = g_n(x) + \varepsilon_n(x)$. В соответствии с рекурсией для первого члена (9) ошибка $\varepsilon_1(x) = 2x\varepsilon_0(x)$ имеет тот же знак, что и $\varepsilon_0(x)$, согласно (10) этот знак сохраняется для всех $\varepsilon_n(x)$. Поведение данной функции подчиняется уравнению (14). Последовательность $\{(-1)^n g_n(x)\}$ удовлетворяет (15). Таким образом, ошибка $\varepsilon_n(x)$ не ограничена сверху (лемма 3) и строго монотонно возрастает (лемма 1) при $2x \geq 1 - 2\varepsilon_0(x) / 2x\varepsilon_1(x) = 1 - 1/x$. Поскольку действительных корней уравнение $2x^2 = x - 1$ не имеет, ошибка растет во всей рассматриваемой области ($x > 0$). Относительная ошибка $|\varepsilon_n(x) / g_n(x)|$ возрастает с увеличением n (лемма 2) и также неограниченна (лемма 3).

Следствие 2. Последовательность дробно-полиномиальных функций

$$\{-L_n(x) / K_n(x)\} \quad (22)$$

сходится при $x > 0$ к $g_0(x)$. При этом последовательность четных членов сходится к пределу сверху, а нечетных – снизу.

Доказательство. Перепишем (13) в виде $-L_n(x) / K_n(x) = g_0(x)(1 - g_n(x) / L_n(x))^{-1}$.

Знакопостоянная последовательность $\{-L_n(x)\}$ удовлетворяет (14). В качестве последовательности, присутствующей в (15), снова

будем рассматривать $\{(-1)^n g_n(x)\}$. Тогда из лемм 2 и 3 следует

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |L_n(x) / g_n(x)| = \infty \text{ и } \lim_{n \rightarrow \infty} (-L_n(x) / K_n(x)) = g_0(x).$$

С учетом неравенств (8) получаем

$$-L_{2j}(x) / K_{2j}(x) < g_0(x) < -L_{2j+1}(x) / K_{2j+1}(x),$$

$$\lim_{j \rightarrow \infty} (-L_{2j}(x) / K_{2j}(x)) = g_0(x) + 0,$$

$$\lim_{j \rightarrow \infty} (-L_{2j+1}(x) / K_{2j+1}(x)) = g_0(x) - 0.$$

В силу леммы 2 последовательности

$$\{L_{2j}(x) / g_{2j}(x)\}, \{L_{2j+1}(x) / g_{2j+1}(x)\}$$

монотонны, а значит, и последовательности

$$\{-L_{2j}(x) / K_{2j}(x)\}, \{-L_{2j+1}(x) / K_{2j+1}(x)\}$$

монотонно приближаются к пределу $g_0(x)$ с разных сторон.

В соответствии со следствием 1 знак ошибки аппроксимации при использовании прямой рекурсии для приближенного вычисления $g_0(x)$ сохраняется для всех $g_n(x)$. Это значит, что если $g'_0(x)$ является верхней (нижней) оценкой для $g_0(x)$, то $g'_n(x)$, вычисленная по прямой рекурсии (9), (10), также будет оценкой сверху (снизу) для $g_n(x)$. Оценка ошибки аппроксимации $g_0(x)$ (22) может быть получена как разность текущего дробно-полиномиального разложения и разложения на единицу (или любое нечетное число) более высокого порядка $\varepsilon_n = |g_0 + L_n / K_n| < |-L_{n+1} / K_{n+1} + L_n / K_n|$. Здесь для краткости обозначено $L_n = L_n(x)$, $K_n = K_n(x)$, $g_n = g_n(x)$, $\varepsilon_n = \varepsilon_n(x)$.

Рассмотрим выражение под знаком модуля

$$-L_{n+1} / K_{n+1} + L_n / K_n = (L_n K_{n+1} - L_{n+1} K_n) / (K_{n+1} K_n).$$

Для его упрощения преобразуем числитель отношения с учетом выполнения рекуррентного соотношения (9) для полиномов L_n, K_n :

$$M_n = L_n K_{n+1} - L_{n+1} K_n =$$

$$= L_n (K_{n+1} - 2xK_n) - L_{n+1} (K_n - 2xL_n) =$$

$$= 2n(L_n K_{n-1} - L_{n-1} K_n) = -2nM_{n-1}.$$

То есть $M_n = (-2)^n n! M_0$, $M_0 = L_0 K_1 - L_1 K_0 = 1$ или $M_n = (-2)^n n!$. Тогда выражение для ошибки примет вид

$$\varepsilon_n = |g_0 + L_n / K_n| < 2^n n! / (K_{n+1} K_n) < 2^n n! / K_n^2.$$

Функция g_n также может быть представлена в виде дробно-полиномиального разложения. Из (12) и (13) следует представление g_n в виде предела последовательности дробно-полиномиальных выражений

$$g_n = \lim_{m \rightarrow \infty} Z_{nm} / K_m, \quad (23)$$

где

$$Z_{nm} = K_m L_n - K_n L_m. \quad (24)$$

Члены последовательности $(K_m L_n - K_n L_m) / K_m$ являются верхними (при четном m) и нижними



оценками (при нечетном m) для g_n в соответствии со следствиями 1, 2 к лемме 3.

Заметим, что $L_n K_{n+1} - L_{n+1} K_n = (-2)^n n!$,

$$\begin{aligned} L_n K_{n+2} - L_{n+2} K_n &= L_n (K_{n+2} - 2(n+1)K_n) - \\ &- K_n (L_{n+2} - 2(n+1)L_n) = \\ &= 2x(L_n K_{n+1} - K_n L_{n+1}) = 2x(-2)^n n!. \end{aligned}$$

При $n \neq m$ величина $L_n K_m - L_m K_n$ является полиномом степени $|n - m| - 1$. Использование данного полинома позволяет избежать ошибок вычитания, возникающих при непосредственном использовании прямой рекурсии. Для представления этого полинома можно использовать многочленную рекурсию.

$$\begin{aligned} \text{Обозначим } Z_{nm} &= L_n K_m - L_m K_n = \\ &= L_n (K_m - (2x)^{m-n} K_n) - K_n (L_m - (2x)^{m-n} L_n). \end{aligned}$$

Из разности

$$\begin{aligned} K_m - (2x)^{m-n} K_n &= \sum_{i=n+1}^m (K_i - 2xK_{i-1})(2x)^{m-i} = \\ &= \sum_{i=n+1}^m 2(i-1)(2x)^{m-i} K_{i-2} \end{aligned}$$

непосредственно следует рекурсия

$$Z_{nm} = \sum_{i=n+1}^m 2(i-1)(2x)^{m-i} Z_{ni-2}, \quad (25)$$

$$Z_{nm} = 0, \quad Z_{nn+1} = (-2)^n n! Z_{01}. \quad (26)$$

Коэффициенты полинома Z_{nm} являются целыми числами и легко могут быть рассчитаны без потери точности при применении к ним рекурсии (25), (26). В результате, Z_{nm} / K_m при $m > n$ задает верхние и нижние границы для g_n .

Для полиномов Z_{nm} может быть определена и другая рекурсия. Для её получения определим минимальное число p , не превышающее n и той же четности, что и m :

$$p = n + \text{mod}(m - n, 2). \quad (27)$$

Преобразуем:

$$K_m - B^{mp} K_p = \sum_{i=p+2}^m B^{mi} (K_i - 2(i-1)K_{i-2}) = \sum_{i=p+2}^m 2xB^{mi} K_{i-1},$$

$$\text{где } B_{mi} = 2^{(m-i)/2} (m-1)!! / (i-1)!! \quad (28)$$

Тогда с учетом равенства

$$Z_{nm} = L_n (K_m - B^{mp} K_p) - K_n (L_m - B^{mp} L_p) + B^{mp} Z_{np}$$

получаем вторую рекуррентную формулу:

$$Z_{nm} = B^{mp} Z_{np} + \sum_{i=p+2}^m 2xB^{mi} Z_{ni-1}. \quad (29)$$

При расчете, а также при исследовании свойств $g_n(x)$ полезно использовать отношение последовательных функций g_n :

$$r_n(x) = g_n(x) / g_{n-1}(x) < 0, \quad n \geq 1.$$

Из формулы (10) для этой функции при $n > 1$ можно получить выражения для прямой и обратной рекурсий:

$$r_n(x) = 2x + \frac{2(n-1)}{r_{n-1}(x)}, \quad (30)$$

$$r_{n-1}(x) = \frac{2(n-1)}{r_n(x) - 2x}. \quad (31)$$

Соотношению (30) соответствует конечная непрерывная дробь

$$r_n(x) = 2x + \frac{2(n-1)}{2x + \frac{2(n-2)}{2x + \dots \frac{2}{2x+1/g_0(x)}}}. \quad (32)$$

Уравнению (31) соответствует бесконечная непрерывная дробь

$$r_n(x) = \frac{-2n}{2x + \frac{2(n+1)}{2x + \frac{2(n+2)}{2x + \dots}} \dots = -\mathbf{K}_{k=n}^{\infty}(2k/2x). \quad (33)$$

При этом прямая рекурсия (30) и обратная (31) должны быть устойчивы для $x < 0$ и $x > 0$ соответственно.

Из формулы (30) и $r_n(x) < 0$ следует

$$|2x| < |r_n(x)| < |2x| + \frac{n-1}{|x|} \quad (x < 0, \quad n > 2). \quad (34)$$

Аналогично, из формулы (31) получаем

$$\frac{n}{x + (n+1)/2x} < |r_n(x)| < \frac{n}{x}, \quad (x > 0, \quad n \geq 1). \quad (35)$$

Из этих свойств, в частности, находим

$$|g_n(x)| < |g_1(x)| \frac{n!}{x^{n-1}}, \quad (x > 0, \quad n \geq 1),$$

$$|g_n(x)| < |g_1(x)(2x)^{n-2}|, \quad (x < 0, \quad n > 2).$$

Обобщением свойств (34), (35) являются следующие неравенства:

$$-\mathbf{K}_{k=0}^{2l} (2(k+n)/2x) < r_n(x) < -\mathbf{K}_{k=0}^{2l+1} (2(k+n)/2x)$$

при $x > 0, n \geq 1$ и

$$2x + \mathbf{K}_{k=1}^{2l+1} (2(n-k)/2x) < r_n(x) < 2x + \mathbf{K}_{k=1}^{2l} (2(n-k)/2x)$$

при $x > 0, n > 2l + 2$, для левой части неравенства и $n > 2l + 1$ для правой ($l = 0, 1, \dots$).

Приведем еще одно соотношение, вытекающее из (10):

$$g_n(x) / g_{n-2}(x) = 2(n-1) + 2xr_{n-1}(x). \quad (36)$$

1. При $x \geq 0$ с учетом $r_{n-1}(x) < 0$ и $g_n(x) / g_{n-2}(x) > 0$ получим

$$0 < g_n(x) / g_{n-2}(x) \leq 2(n-1).$$

2. При $x < 0$ с учетом $r_{n-1}(x) < 0$ и (34) из (36) следует

$$0 < g_n(x) / g_{n-2}(x) < 4(n-1) + 4x^2 \quad (n > 2). \quad (37)$$

Очевидно, последнее неравенство справедливо и для $x \geq 0$.

При разработке программы вычисления $g_n(x)$ мы ограничились $n \leq 20$. Численные расчеты



функций $g_n(x)$ в широком диапазоне x показывают, что прямая рекурсия (10) неустойчива (см. следствие 1). В этом случае можно воспользоваться обратной рекурсией, которая устойчива, но не является уточняющей. Она требует знания точных значений функций $g_{19}(x)$, $g_{20}(x)$. В нашей работе мы использовали для их вычисления на интервале $0 \leq x \leq 6$ интерполяцию кубическими сплайнами и Паде-аппроксимацию. Для $x > 6$ мы использовали разложение в непрерывную дробь [13] отношения двух последовательных функций (33), обратную рекурсию для $r_n(x)$ (31) и рациональную Чебышевскую аппроксимацию для $g_0(x)$ [14]. При $x \leq 0$ применялась прямая рекурсия для функций $r_n(x)$ в сочетании со сплайн-интерполяцией для $g_0(x)$ и $g_1(x)$. Было найдено, что для больших отрицательных x рациональнее пользоваться выражением функций $g_n(x)$ через их значения в положительной области

$$\begin{aligned} g_n(-x) &= \exp(x^2) \int_{-x}^{\infty} dz \exp(-z^2) = \\ &= \exp(x^2) \left(\int_{-\infty}^{\infty} dz \exp(-z^2) - \int_x^{\infty} dz \exp(-z^2) \right) = \\ &= \sqrt{\pi} \exp(x^2) - g_0(x), \\ g_n(-x) &= (-1)^n \left(\frac{d^n}{dx^n} \sqrt{\pi} \exp(x^2) - g_n(x) \right). \end{aligned} \quad (38)$$

Соотношение симметрии (38) позволяет получить более точные значения по сравнению с асимптотической формулой (11) и дает возможность избежать различного представления g -функции на отрезках полуоси $(-\infty, 0]$.

Разработанный алгоритм обеспечивал 9 верных знаков для требуемых вспомогательных функций при всех x . В действительности точность расчета зависит только от точности используемых аппроксимаций стартовых функций в уравнениях (9), (10). Заметим, что для важного случая $b = c$ ($x = y$) в выражениях (5), (6) для интегралов (1) имеется неопределенность типа $0/0$. Применяя правило Лопиталя для раскрытия неопределенности, можно найти дополнительные формулы в данном специальном случае. Однако более общим и эффективным оказывается алгоритм, основанный на разложении интеграла (6) в ряд Тейлора вблизи особой точки $b = c$.

Вычислим производную n -го порядка от выражения в квадратных скобках формулы (6) по переменной $r = x - y$:

$$\begin{aligned} \left[\frac{g_0(y) - g_0(x)}{r} \right]^{(n)} &= \sum_{j=0}^n C_n^j \left(\frac{1}{r} \right)^j [g_0(y) - g_0(x)]^{(n-j)} = \\ &= \sum_{j=0}^n C_n^j \frac{(-1)^j j!}{r^{j+1}} [(-1)^{n-j} g_{n-j}(y) - g_{n-j}(x)] \left(\frac{1}{2} \right)^{n-j}. \end{aligned}$$

Используя правило Лопиталя, определим производную в точке $r = 0$:

$$\begin{aligned} \left[\frac{g_0(y) - g_0(x)}{r} \right]_{r=0}^{(n)} &= \\ &= \sum_{j=0}^n C_n^j \frac{(-1)^j j!}{(j+1)!} \left[(-1)^{n+1} g_{n+1} \left(\frac{s}{2} \right) - g_{n+1} \left(\frac{s}{2} \right) \right] \left(\frac{1}{2} \right)^{n+1} = \\ &= \frac{(-1)^{n+1} - 1}{2^{n+1}} g_{n+1} \left(\frac{s}{2} \right) \sum_{j=0}^n C_n^j \frac{(-1)^j}{j+1} = \frac{(-1)^{n+1} - 1}{2^{n+1}(n+1)} g_{n+1} \left(\frac{s}{2} \right). \end{aligned}$$

Откуда получим

$$\left[\frac{g_0(y) - g_0(x)}{x - y} \right] = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{(2j+1)!} \left(\frac{x-y}{2} \right)^{2j} g_{2j+1} \left(\frac{x+y}{2} \right).$$

Тогда разложение интеграла (6) в ряд Тейлора можно записать в виде

$$I(-1, -1, -1) = \frac{4\pi^2}{\alpha \sqrt{\alpha(s-t)}} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{(2j+1)!} \left(\frac{r}{2} \right)^{2j} g_{2j+1} \left(\frac{s}{2} \right), \quad (39)$$

где $s = x + y$ и $s - t = (b + c)/(2\sqrt{\alpha}) > 0$ согласно условию (3).

Этот ряд знакопостоянен по свойству (8) и уже не имеет особенности. Члены функционального ряда (39) неотрицательны. Для отношения соседних членов с использованием (37) можно получить следующее неравенство:

$$\lim_{j \rightarrow \infty} \frac{g_{2j+1}(s/2)}{g_{2j-1}(s/2)} \frac{(r/2)^2}{2j(2j+1)} \leq \lim_{j \rightarrow \infty} \frac{(8j+s^2)}{2j(2j+1)} = 0 < 1.$$

Следовательно, по признаку Даламбера ряд (39) сходится. Если при его вычислении ограничиться $k - 1$ членом, то сумму остаточного ряда можно оценить с помощью системы неравенств. Перепишем (37) в виде $|g_n(x)| < 4(x^2 + n - 1)|g_{n-2}(x)|$. Выберем целое четное число $l > x^2$, тогда

$$|g_n(x)| < 2^{n-m} (l + n - 1)! / (l + m - 1)! |g_m(x)|,$$

где $m = \text{mod}(n, 2)$. Учитывая (8) и формулу Стирлинга для оценки факториала, получаем

$$R_k = \sum_{j=k}^{\infty} \frac{-g_{2j+1}(s/2)}{(2j+1)!} \left(\frac{r}{2} \right)^{2j} < \frac{-g_1(s/2)}{(l+m-1)!} \sum_{j=k}^{\infty} \frac{2^{2j} (l+2j)^{1/2}}{(2j+1)!} \left(\frac{r}{2} \right)^{2j} <$$



$$\begin{aligned} &< \frac{-g_{2j+1}(s/2)}{(l+m-1)!!} \sum_{j=k}^{\infty} \frac{2^j(l+2j)^{1/2}}{j!} \left(\frac{r}{2}\right)^{2j} < \frac{-g_1(s/2)}{(l+m-1)!!} \sum_{j=k}^{\infty} \left(\frac{er^2}{2j}\right)^j (l+2j)^{1/2} < \\ &< \frac{-g_1(s/2)}{(l+m-1)!!} (er^2)^{1/2} \left(1 + \frac{l}{2k}\right)^{1/2} \sum_{j=k}^{\infty} \left(\frac{er^2}{2j}\right)^{j-1/2}. \end{aligned}$$

Для $k > er^2/2$ получаем окончательную оценку

$$R_k < \frac{-g_1(s/2)}{(l+m-1)!!} \left(er^2 \left(1 + \frac{l}{2k}\right)\right)^{1/2} \frac{(er^2/2k)^{k-1/2}}{1 - (er^2/2k)}.$$

При дифференцировании (39) по параметрам β, b, c (см. 5) получается разложение для соответствующего интеграла (1).

В таблице представлены результаты вычисления вспомогательных функций $g_n(x)$ по программе, реализованной на языке Fortran.

Тестирование всех интегралов было проведено при помощи системы аналитических вычислений Maple [11].

Значения функции $g_0(x)$ и ее производных $g_n(x)$ при различных значениях аргумента

$n \setminus x$	-0.5	0.5	3.0	10.0
0	1.730234434E+0	5.456413608E-1	1.586356399E-1	4.975365939E-2
1	-2.730234434E+0	-4.543586392E-1	-4.818616082E-2	-4.926812176E-3
2	6.190703301E+0	6.369240823E-1	2.815431483E-2	9.710752718E-4
3	-1.711164104E+1	-1.180510475E+0	-2.381875428E-2	-2.857432653E-4
4	5.425586084E+1	2.641034019E+0	2.601336334E-2	1.115863254E-4
5	-1.911489891E+2	-6.803049778E+0	-3.446985417E-2	-5.421961426E-5
6	7.337075976E+2	1.960729041E+1	5.331450836E-2	3.147096890E-5
10	3.011285623E+5	3.044513508E+3	9.302643509E+1	1.329000489E-5
15	-1.517837837E+9	-5.745251213E+6	-1.782099170E+2	-3.489317344E-5
20	1.657950330E+13	2.725817937E+10	1.167747294E+5	4.277646952E-4

Заключение

Таким образом, в настоящей работе получено аналитическое выражение двухчастичного шестикратного интеграла, встречающегося в высокоточных вариационных расчетах трехчастичных кулоновских систем. Разработан устойчивый и быстрый алгоритм для вычисления производных от функции Фаддеевой чисто мнимого аргумента до двадцатого порядка.

Благодарности

Считаем своим приятным долгом выразить благодарность кандидату физико-математических наук Д. А. Шершакову за многочисленные обсуждения, кандидату физико-математических наук В. А. Дубровскому за содействие при выполнении работы.

Список литературы

1. Shershakov D. A., Nechaev V. V., Berezin V. I. Exponential basis functions with quadratic dependence on interelectron distance for variational calculations of two-electron atoms // J. Phys. B. 2000. Vol. 33, № 1. P. 123–130.
2. Calais J.-L., Löwdin P. O. A simple method of treating atomic integrals containing function of r_{12} // J. Mol. Spectr. 1962. Vol. 8, № 3. P. 203–211.
3. Pekeris C. L. Ground state of two-electron atoms // Phys. Rev. 1958. Vol. 112, № 5. P. 1649–1658.
4. Sack R. A., Rootan C. C. J., Kolos W. Recursive evaluation of some atomic integrals // J. Math. Phys. 1967. Vol. 8, № 5. P. 1093–1094.
5. Эфрос В. Д. Задача трех тел. Обобщенное экспоненциальное разложение, произвольные состояния в коррелированном базисе и энергия связи мезомолекул // Журн. эксперим. и теорет. физ. 1986. Т. 90, № 1. С. 10–24.
6. Ley-Koo E., Bunge C. F., Jauregui R. Evaluation of relativistic atomic integrals using perimetric coordinates // Intern. J. Quant. Chem. 1997. Vol. 63, № 1. P. 93–97.
7. Фаддеева В. Н., Терентьев Н. М. Таблицы значений функции $w(z) = e^{z^2} (1 + 2i / \sqrt{\pi}) \int_0^z e^{t^2} dt$ от комплексного аргумента. М., 1954. 268 с.
8. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям. М., 1979. 832 с.
9. Gautschi W. Efficient computation of the complex error function // SIAM J. Numer. Anal. 1970. Vol. 7, № 1. P. 187–198.



10. Poppe G. P. M., Wijers C. M. More efficient computation of the complex error function // ACM Trans. Math. Soft. 1990. Vol. 16, № 1. P. 38–46.
11. Maplesoft, «Maple», Version 15, Waterloo Maple Inc. (2012). URL: <http://www.maplesoft.com> (дата обращения: 01.07.2012).
12. Wolfram Research, Inc., «Mathematica», Version 8.0,

Champaign, IL (2012). URL: <http://www.wolfram.com> (дата обращения: 01.07.2012).

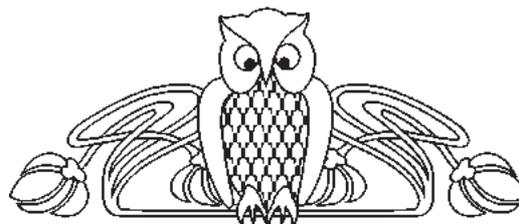
13. Джоунс У., Трон В. Непрерывные дроби / пер. с англ. М., 1985. 414 с.
14. Cody W. J. Rational Chebyshev approximations for the error function // Math. Comput. 1969. Vol. 23, № 107. P. 631–637.

УДК 537.8

ДИНАМИКА ДУАЛЬНОЙ ФАЗЫ

Ю. Н. Зайко

Поволжский институт управления им. П. А. Столыпина – филиал РАНХ и ГС при Президенте РФ, Саратов
E-mail: zyrnick@rambler.ru



В статье рассмотрена динамика дуальной фазы, связанной с дуальным характером дионов – гипотетических частиц, обладающих одновременно электрическим и магнитным зарядом. Получены уравнения, описывающие динамику дуальной фазы из условия, чтобы уравнения Максвелла сохраняли свой вид под действием дуальных преобразований, соответствующий эффективному электрическому характеру заряда диона. Найдены частные решения этих уравнений в вакууме и в поле электрического диполя. Показано, что найденные ранее решения уравнений Максвелла в виде сферических волн с нулевым орбитальным моментом соответствуют монополюному излучению диона. Показан голдстоуновский характер дуальной фазы.

Ключевые слова: дион, магнитный заряд, голдстоуновская мода.

Dynamics of Dual Phase

Yu. N. Zayko

This article presents dynamics of dual phase, which is connected with dual character of dions – hypothetical particles possessing both electrical and magnetic charges. For description of dual phase the set of equations is received from condition that Maxwell equations conserve their electrical character under dual transformations, what corresponds to effective electrical charge of dion. Some special solutions of these equations for example in vacuum, and in field of electrical dipole are found. It was shown, that solutions of Maxwell equations for spherical waves with zero orbital moment momentum correspond to monopole radiation of dion. Goldstone character of dual phase was shown.

Key words: dion, magnetic charge, Goldstone mode.

Введение

Уравнения Максвелла допускают формулировку, симметричную относительно электрических и магнитных зарядов [1]:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{H} - \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} &= e \vec{J}, & \operatorname{div} \vec{E} &= e \rho, \\ \operatorname{rot} \vec{E} + \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} &= -g \vec{J}, & \operatorname{div} \vec{H} &= g \rho. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь \vec{E} и \vec{H} – напряженности электрического и магнитного полей, ρ и \vec{J} – плотность числа и тока частиц соответственно (в системе Хевисайда–Лоренца). Предполагается, что частицы, называемые дионами и служащие источниками полей, несут одновременно электрический (e) и магнитный (g) заряды. Как известно, с помощью дуального преобразования полей

$$\begin{aligned} \vec{E} &= \cos \theta \cdot \vec{E} + \sin \theta \cdot \vec{H}, \\ \vec{H} &= -\sin \theta \cdot \vec{E} + \cos \theta \cdot \vec{H}, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\cos \theta = \frac{e}{q}, \quad \sin \theta = \frac{g}{q}, \quad q = \sqrt{e^2 + g^2},$$

где θ – параметр дуального преобразования (дуальная фаза), можно исключить магнитный заряд из уравнений (1), т.е. привести их к виду [1]:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{H} - \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} &= q \vec{J}, & \operatorname{div} \vec{E} &= q \rho, \\ \operatorname{rot} \vec{E} + \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} &= -g \vec{J}, & \operatorname{div} \vec{H} &= 0, \end{aligned} \quad (3)$$

описывающему электродинамику частиц с эффективным электрическим зарядом q ¹. Таким образом, вводимый подобным способом магнитный заряд оказывается ненаблюдаемым [1]². При этом параметр θ считается постоянным, хотя и неопределенным в силу неопределенности e и g . С этой точки зрения как заряды (электрический и магнитный), так и поля получают свое наименование в результате соглашения, и мы всегда можем изменить его и называть электрическое

¹ Аналогично уравнения движения дуально заряженных частиц приводятся к уравнениям движения частиц, несущих эффективный электрический заряд q .

² Аналогично может быть «исключен» и электрический заряд [1].



поле магнитным и наоборот, как и заряды. Такой метафизический подход не характерен для современной физики.

В отличие от этого подхода в настоящей работе предполагается, что с фазой θ связано некоторое поле. Это налагает ограничения на значения θ в соседних точках пространства в близкие моменты времени. Они носят характер уравнений, получаемых из лагранжиана (или из уравнений) электромагнитного поля в предположении, что θ – независимая динамическая переменная. С этим полем может быть связана гипотетическая безмассовая частица, обеспечивающая взаимодействие между дионами [2], подобно тому как фотоны переносят взаимодействие между электрически заряженными частицами.

Эти рассуждения могут быть дополнены соображениями, аналогичными тем, которые приводят к представлению о динамической природе электрического заряда, согласно которому электромагнитное взаимодействие должно осуществляться с помощью калибровочного поля [1, 3].

1. Вывод основных уравнений

Полевые уравнения принято выводить из выражения для лагранжиана, связанного с соответствующими полями. В задачах дуальной электродинамики такой подход связан с известными трудностями [1]. Тем не менее такие попытки предпринимаются. Для этого можно рассмотреть, например, лагранжиан приведенного ниже вида для электромагнитного поля, создаваемого дуально заряженными частицами [1]:

$$\Lambda = -m \int ds + q \int d^4x \cdot v_\mu C_\mu - \frac{1}{2} \int d^4x \cdot \Phi_{\mu\nu}^2, \quad (4)$$

$$C_\nu = \cos \theta \cdot A_\nu + \sin \theta \cdot B_\nu,$$

$$\Phi_{\mu\nu} = \cos \theta \cdot F_{\mu\nu} + \sin \theta \cdot \tilde{F}_{\mu\nu} = \partial_\mu C_\nu - \partial_\nu C_\mu,$$

где m – масса дионов, v_μ – их скорость, A_ν и B_ν – векторный и псевдовекторный потенциалы, $F_{\mu\nu}$ – тензор электромагнитного поля, значком \sim (тильда) обозначен дуальный ему тензор. Варьируя Λ по потенциалам, получим уравнения Максвелла для фотонов:

$$\partial_\nu \Phi_{\mu\nu} = qv_\mu. \quad (5)$$

Выполняя дифференцирование в (5) и считая θ функцией координат и времени, получим уравнения, описывающие динамику θ , имеющие вид³:

$$\Phi_{\mu\nu,\theta} \cdot \partial_\nu \theta = 0, \quad (6)$$

³ Здесь мы уже явно отходим от использования лагранжева метода.

запятая обозначает производную по соответствующей переменной, $\partial_\nu = \partial/\partial x_\nu$.

Система уравнений (6) имеет нетривиальные решения при условии обращения ее детерминанта Δ в нуль. Вычисляя его, находим:

$$\Delta = (\vec{E}\vec{H})^2 = \frac{H^2 - E^2}{2} \sin 2\chi + \vec{E}\vec{H} \cos 2\chi, \quad (7)$$

$$\chi = \theta + \frac{\pi}{2}.$$

Таким образом, нетривиальная динамика угла θ имеет место при обращении в нуль обоих инвариантов электромагнитного поля $H^2 - E^2 = 0$ и $\vec{E}\vec{H} = 0$.

Рассмотрим некоторые возможные решения (6). Беря миноры (точнее, алгебраические дополнения) к первым двум строкам $\Phi_{\mu\nu,\theta}(\theta) = \Phi_{\mu\nu}(\chi)$, получим две различные системы уравнений:

$$\begin{aligned} \partial_i \chi &\sim H_i, \\ \partial_i \chi &= 0, \\ (i &= 1, 2, 3) \end{aligned} \quad (8a)$$

и

$$\begin{aligned} \partial_x \chi &\sim -E_y, \\ \partial_y \chi &\sim E_x, \\ \partial_i \chi &\sim -H_z. \end{aligned} \quad (8b)$$

Выбор других строк или столбцов не даст ничего нового, приводя лишь к переобозначению координатных осей. Комбинируя уравнения (8) с уравнениями (3) придем к окончательным уравнениям для χ :

$$\begin{aligned} \partial_x^2 \chi - \partial_i^2 \chi &= 0, \\ \Delta \phi &= 0, \\ \Delta &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \end{aligned} \quad (9)$$

Ось координат x выделена тем, что вдоль нее решение распространяется как волна со скоростью света c ⁴. Понятно, что это задано внешними условиями, и направление оси x может быть приписано любой другой оси.

Можно получить аналогичные результаты непосредственно из уравнений (3), предполагая их инвариантность при изменениях θ (или ϕ).

Подставляя в уравнения (1) выражения для полей \vec{E} и \vec{H} из (2) из условия, что уравнения для них по-прежнему будут иметь вид (3), получим уравнения для дуальной фазы:

$$\begin{aligned} \nabla \theta \cdot \vec{E} &= 0, \nabla \theta \cdot \vec{H} = 0, \\ \nabla \theta \times \vec{E} + \vec{H} \cdot \partial_i \theta &= 0, \\ \nabla \theta \times \vec{H} - \vec{E} \cdot \partial_i \theta &= 0. \end{aligned} \quad (10)$$

⁴ В уравнениях (4) и далее положено $c = 1$.



Из первой пары уравнений (10) получим

$$\nabla\theta = -\alpha \cdot \vec{S}, \quad \vec{S} = \vec{E} \times \vec{H} = \vec{E} \times \vec{H}, \quad (11a)$$

где \vec{S} – вектор плотности потока энергии электромагнитного поля, α – некоторый коэффициент. Вторая пара уравнений (10) приведет к уравнению

$$\partial_t \theta = \frac{\alpha}{W} \cdot \vec{S}^2, \quad W = \frac{\vec{E}^2 + \vec{H}^2}{2} = \frac{\vec{E}^2 + \vec{H}^2}{2}. \quad (11b)$$

где W – плотность энергии электромагнитного поля. Подставляя (11a) в (11b) получим уравнение

$$\partial_t \theta + \vec{V} \cdot \nabla \theta = 0, \quad \vec{V} = \frac{\vec{S}}{W}, \quad (12)$$

где \vec{V} – скорость переноса электромагнитной энергии. Если $V = c$, что справедливо в так называемой волновой зоне (см. ниже), то это уравнение совпадает с первым уравнением (9), где $c = 1$. Таким образом, направление оси x в (9) совпадает с направлением распространения электромагнитной энергии. Второе уравнение (9) получим, предполагая, что $\text{div} \vec{S} = 0$ ⁵.

2. Решения уравнений для дуальной фазы

2.1. Электромагнитное поле без источников

Для этого случая $\text{div} \vec{S} = 0$. Решения уравнений (9) можно получить, налагая на них некоторые граничные условия. Рассмотрим поведение дуальной фазы вблизи диона. Естественным условием будет требование, чтобы на больших расстояниях от оси x возмущения фазы θ были малы и мы в асимптотике пришли бы к обычной электродинамике, соответствующей значению $\theta = 0$. Характерной особенностью уравнений (9) является то, что невозможно получить их решения, ограниченные всюду. Например, решением, удовлетворяющим поставленному выше условию, является

$$\theta_k(\vec{r}) = bK_0(k\rho) \cdot \exp[\pm i(kx - \omega t)], \quad (13)$$

$$\rho = \sqrt{y^2 + z^2}, \quad k = \frac{\omega}{c},$$

где K_0 – модифицированная функция Бесселя, k – волновое число, ω – частота, c – скорость света в вакууме, b – постоянная, определяемая из условия нормировки

$$\int \theta_k^*(\vec{r}) \theta_k(\vec{r}) d\vec{r} = 2\pi \delta(k - k'), \quad (14)$$

откуда следует $b = k/\sqrt{\pi}$.

Как известно, K_0 имеет особенность в нуле. Это обстоятельство затрудняет интерпретацию полученного решения, приводя к тому, что на

⁵ Система уравнений (10) не эквивалентна (6), которая соответствует только одной паре уравнений Максвелла. Для полной эквивалентности к (6) надо добавить уравнения $\Phi_{[\mu\nu,\sigma]} = 0$, приводящие ко второй паре [4].

малых расстояниях от оси x появляются области, в которых изменения фазы θ порядка 2π чередуются с возрастающей частотой. Напомним, что сама фаза θ определена по модулю 2π . Апелляция к необходимости на малых масштабах применять квантовую теорию не спасает положения, поскольку квантовомеханический оператор фазы не определен [5].

2.2. Электромагнитное поле дипольного излучателя

Электромагнитные поля элементарного дипольного излучателя, расположенного в точке $r = 0$ определяются выражениями [6]:

$$H_\varphi = \frac{\sin \vartheta}{4\pi r} \left(\ddot{p} + \frac{\dot{p}}{r} \right),$$

$$E_\vartheta = \frac{\sin \vartheta}{4\pi r} \left(\ddot{p} + \frac{\dot{p}}{r} + \frac{p}{r^2} \right), \quad (15)$$

$$E_r = \frac{\cos \vartheta}{4\pi r} \left(\frac{\dot{p}}{r} + \frac{p}{r^2} \right),$$

где φ, ϑ, r – сферические координаты, $p(t)$ – дипольный момент излучателя, $c = 1$, точка означает производную по времени. Исходя из (15), легко получить выражения для \vec{S} и W , и, подставив их в уравнения (11) и (12), найти их решения. Приведем явный вид \vec{S} (явный вид W не так важен):

$$S_r = \left(\frac{\sin \vartheta}{4\pi r} \right)^2 \left\{ \dot{p}^2 + \frac{1}{2r} \frac{d}{dt} \left[\dot{p}^2 + \left(\dot{p} + \frac{p}{r} \right)^2 \right] \right\}, \quad (16)$$

$$S_\vartheta = -\frac{\sin 2\vartheta}{(4\pi r)^2} \frac{1}{2r} \frac{d}{dt} \left(\dot{p} + \frac{p}{r} \right)^2.$$

В дальней зоне⁶ ($r \gg \lambda$, λ – длина волны излучения) имеем:

$$S_\vartheta = 0, S_r = W = \left(\frac{\sin \vartheta}{4\pi r} \right)^2 \dot{p}^2, \quad (17)$$

и уравнения (11a) и (12) имеют вид

$$\frac{\partial \theta}{\partial r} + \alpha S_r = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial \vartheta} = 0, \quad \frac{\partial \theta}{\partial t} + c \frac{\partial \theta}{\partial r} = 0. \quad (18)$$

В последнем уравнении явно учтена скорость света c . Из него следует, что его решение имеет вид $\theta = \theta(r - ct)$.

Первые два уравнения (18) эквивалентны уравнению (11a). Чтобы исследовать их решения, надо знать вид α . Его можно получить двумя способами. Во-первых, если роль уравнения (11a), кроме определения пространственной зависимости θ , заключается еще в задании начальных значений для уравнения (11b), то производная

⁶ Говоря строго, уравнения (11) и (12) для фазы θ применимы только в дальней зоне, где выполняются условия $H^2 - E^2 = 0$ и $\vec{E}\vec{H} = 0$.



по времени от его левой части должна равняться нулю⁷. Можно показать, что это действительно так, если $\alpha = b/W$, где b не зависит от полей E и H . Действительно, вычисляя производную по времени от левой части (11а), получим:

$$\nabla \theta_i + (\alpha \vec{S})_i = b[\nabla(V^2) + \vec{V}_i] = 0,$$

поскольку в дальней зоне скорость \vec{V} не зависит от времени и равна по величине c . Во-вторых, можно непосредственно вычислить α , применив уравнение (11а) к случаю распространения плоской электромагнитной волны между двумя идеально отражающими зеркалами и учитывая, что набег фазы θ вдоль замкнутой траектории кратен 2π .

Решая уравнение (18) для $\alpha = b/W$, найдем явный вид фазы $\theta = -b(r - ct)$, откуда следует, что $b = -k$, где k – волновое число. Это согласуется с известным уравнением [4]: $\omega_r + k_t = 0$, где $\omega = -\theta_t = ck$, $k = \theta_r$.

В силу теоремы о двойственности [8] можно утверждать, что аналогичный результат имеет место и в окрестности элементарного магнитного излучателя.

3. Электродинамика дионов

В работе [9] получены решения уравнений Максвелла⁸ для поля излучения волны E -типа с орбитальным моментом $l = 0$:

$$\begin{aligned} E_\vartheta &= \frac{i\omega e}{cr} \text{ctg} \vartheta \cdot e^{i\omega\left(\frac{r-t}{c}\right)}, \\ H_\varphi &= \pm \frac{i\omega e}{cr} \text{ctg} \vartheta \cdot e^{i\omega\left(\frac{r-t}{c}\right)}, \\ E_r &= \frac{e}{r^2} e^{i\omega\left(\frac{r-t}{c}\right)}, \end{aligned} \quad (19)$$

где e – постоянная. Покажем, что это поле описывает излучение диона, расположенного в начале координат, фаза которого линейно зависит от времени. Для этого рассмотрим наряду с (19) поле излучения волны M -типа, используя двойственную симметрию уравнений Максвелла, т. е. заменяя в (19) $\vec{E} \rightarrow -\vec{H}$ и $\vec{H} \rightarrow \vec{E}$, а также $e \rightarrow m$:

$$\begin{aligned} H_\vartheta &= -\frac{i\omega m}{cr} \text{ctg} \vartheta \cdot e^{i\omega\left(\frac{r-t}{c}\right)}, \\ E_\varphi &= \pm \frac{i\omega m}{cr} \text{ctg} \vartheta \cdot e^{i\omega\left(\frac{r-t}{c}\right)}, \\ H_r &= -\frac{m}{r^2} e^{i\omega\left(\frac{r-t}{c}\right)}. \end{aligned} \quad (20)$$

⁷ Аналогичная ситуация имеет место в электродинамике, где одна пара уравнений Максвелла, не содержащая производных по времени, используется для задания начальных значений для второй пары [7].

⁸ И Эйнштейна–Максвелла, так как волна (19) не создает гравитационного поля [9].

В работе [9] было найдено выражение для тока эквивалентного источника, соответствующего (19):

$$I_e(\rho, z) = \frac{i\omega e}{2} \frac{z}{r} e^{i\omega\left(\frac{r-t}{c}\right)}, r = \sqrt{z^2 + \rho^2}. \quad (21)$$

Легко показать, что ток эквивалентного источника, соответствующего (20) есть:

$$I_m(\rho, z) = \frac{i\omega m}{2} \frac{z}{r} e^{i\omega\left(\frac{r-t}{c}\right)}. \quad (22)$$

Вводя величину $p = (e - im)e^{-i\omega t}$, такую, что $dp/dt = 2Y(r=0)$, где $Y = I_e - iI_m$ перепишем (19) и (20) в виде, напоминающем выражения для полей электромагнитной волны, излучаемой электрическим дипольным излучателем, расположенным в точке $r = 0$ [6]:

$$\begin{aligned} E_\vartheta + iH_\vartheta &= -\frac{\dot{p}}{cr} \text{ctg} \vartheta \cdot e^{i\omega\left(\frac{r-t}{c}\right)}, \\ E_\varphi + iH_\varphi &= -\frac{i\dot{p}}{cr} \text{ctg} \vartheta \cdot e^{i\omega\left(\frac{r-t}{c}\right)}, \\ E_r + iH_r &= \frac{p}{r^2} e^{i\omega\left(\frac{r-t}{c}\right)}, \dot{p} = \frac{dp}{dt}. \end{aligned} \quad (23)$$

Если перенести фактор $e^{-i\omega t}$ в левую часть (22), то слева мы получим выражения для соответствующих полей (23) после дуального поворота на угол $\theta = \omega t$. Роль излучателя играет дион с монотонно изменяющейся фазой, т. е. периодически переходящий из электрического в магнитное состояние и обратно. Напомним, что излучение систем, состоящих из зарядов одного сорта (только электрических, или только магнитных), не содержит монополярных членов с $l = 0$. Другой особенностью электромагнитного поля диона (19) является то, что оно не создает гравитационного поля в отличие от электромагнитных полей волн с $l \neq 0$ [9].

Заключение

В работе показано, что условие «электрического» характера фазы дуального преобразования может быть записано в виде некоторой системы уравнений (11) и (12), одно из которых – уравнение (12) – имеет характер волнового уравнения, причем скорость распространения волны равна скорости света в вакууме c . Поскольку это уравнение первого порядка, то его решением является только расходящаяся волна, распространяющаяся от начала координат на бесконечность.

Второе уравнение – (11а) – описывает структуру волны дуальной фазы.

Полученные результаты позволяют говорить о некоей моде (безмассовой, голдстоуновской [9]), переносящей значение дуальной фазы со скоро-



стью света из областей, в которых это значение установлено (экспериментально или по соглашению) в другие области. В пользу голдстоуновской природы этой моды говорит то, что она связана с нарушением дуальной симметрии (2) путем приписывания фазе дуального преобразования θ конкретного, хотя и неизвестного значения [1], и, кроме того, она имеет спектр $\omega = ck$, характерный для голдстоуновской моды. С ней связано установление дальнего порядка во всей доступной исследованию с помощью световых сигналов части Вселенной, в том смысле, что фиксирование характера максвелловских уравнений в одной ее части распространяется и на другие ее части. Этот результат позволит пролить свет на вопросы, связанные с многолетними безрезультатными поисками магнитных зарядов.

В работе [9] эта мода отождествлялась с фотонами. Результаты настоящей работы получены без данного предположения. Однако все вышеизложенное дает веские основания в пользу такого заключения. Во-первых, взаимодействие дионов в «электрической» фазе, как и обычных электрически заряженных частиц, должно переноситься фотонами. Во-вторых, поле, излучаемое дионом, является электромагнитным полем. В третьих, закон дисперсии $\omega = ck$ рассматриваемой моды совпадает с фотонным. И наконец, в четвертых, введение особой частицы, которая наряду с фотонами должна переносить взаимодействие между электрически (и магнитно) заряженными частицами и обладать при этом всеми свойствами фотона⁹, противоречит принципу экономии мышления [10].

Подход, принятый в настоящей работе, отличается от подхода Дж. Уилера и Мизнера [11], использующих совместное решение уравнений Максвелла и Эйнштейна (так называемая «уже единая теория поля» Дж. Райнича [12]). Кроме того, что используются только уравнения Максвелла, рассмотрен случай, представляющий определенные трудности в указанном подходе.

⁹ Следует оговориться, что вопрос относительно поляризации этой частицы остается пока нерешенным.

Во-первых, явно учтены заряды, создающие поля, а во-вторых, оба инварианта электромагнитного поля обращаются в нуль. Несмотря на это, результаты, представленные в настоящей работе, в каком-то смысле, являются решением проблемы синхронизации дуальных фаз в различных областях пространства, первоначально разделенных областями, в которых электромагнитное поле отсутствует. В связи со сказанным уместно также сослаться на работу [13].

Список литературы

1. Стражев В. И., Томильчик Л. М. Электродинамика с магнитным зарядом. Минск : Наука и техника, 1975. 336 с.
2. Долгов А. Д. Магнитный монополю // Физическая энциклопедия : в 5 т. М.: Сов. энцикл., 1990. Т. 2. С. 687–688.
3. Берестецкий В. Б. Проблемы физики элементарных частиц. М. : Наука, 1979. 256 с.
4. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика : в 10 т. Т. 2. Теория поля. 5-е изд. М. : Наука, 1967. 460 с.
5. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М. : Наука, 1971. 544 с.
6. Николис Дж. Динамика иерархических систем. Эволюционное представление / пер. с англ. Ю. А. Данилова. М. : Мир, 1989. 486 с.
7. Вебер Дж. Общая теория относительности и гравитационные волны / пер. с англ. под ред. Д. Иваненко. М. : Изд-во иностр. лит., 1962. 272 с.
8. Никольский В. В., Никольская Т. И. Электродинамика и распространение радиоволн. М. : Наука, 1989. 544 с.
9. Зайко Ю. Н. Точные решения уравнений Максвелла–Эйнштейна // Изв. Саратов. ун-та. Новая сер. 2010. Т. 10. Сер. Физика, вып. 1. С. 50–58.
10. Неванлинна Р. Пространство, время и относительность / пер. с англ. под ред. И. М. Яглома. М. : Мир, 1966. 230 с.
11. Уилер Дж. Гравитация, нейтрино, Вселенная / пер. с англ. под ред. Д. Иваненко. М. : Изд-во иностр. лит., 1962. 404 с.
12. Rainich G. Y. Electrodynamics of the General Relativity Theory // Trans. Amer. Math. Soc. 1925. Vol. 27. P. 106–130.
13. Witten L. Initial Value Problem of the Einstein-Maxwell Field // Phys. Rev. 1960. Vol. 120, № 2. P. 635–640.



УДК 533.9, 539.1

VACUUM CREATION OF CHARGED PARTICLES: SOME INTEGRAL RELATIONS

A. V. Chertilin, A. G. Lavkin, R. S. Sitalieva, P. I. Smolyansky,
S. A. Smolyansky, A. V. Tarakanov

Saratov State University, Russia
E-mail: smol@sgu.ru

Dependence on the wave length and the periodical electric field strength of the densities of particle number and energy of the created from vacuum particle-antiparticle plasma of the fermi and bose types had investigated. Analytical and numerical calculations had fulfilled in the leading approximation for the case of rather small fields in comparison with the Schwinger critical field $E_c = m^2/e$.

Key words: vacuum creation, fermion, boson, kinetic equation, the number density, Schwinger effect.

Вакуумное рождение заряженных частиц: некоторые интегральные соотношения

А. В. Чертилин, А. Г. Лавкин, Р. С. Ситалиева,
П. И. Смолянский, С. А. Смолянский, А. В. Тараканов

Изучена зависимость от длины волны и напряженности периодического электрического поля плотностей числа частиц и энергии, порожденной из вакуума плазмы, состоящей из частиц и античастиц фермиевского и бозевского типа. Аналитические и численные расчеты проведены в рамках лидирующего приближения в случае достаточно слабых полей по сравнению с критическим полем Швингера $E_c = m^2/e$.

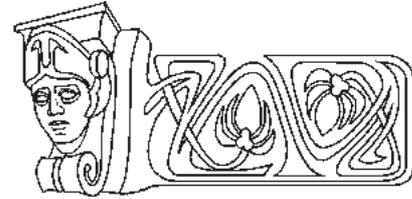
Ключевые слова: вакуумное рождение, бозон, фермион, кинетическое уравнение, плотность числа частиц, эффект Швингера.

Introduction and Statement of the Problem

The kinetic description of the vacuum particle creation under action of the quasi-classical field of different physical nature had obtained wide spread occurrence in the physics of heavy ion collisions, in the strong laser fields and cosmology (see the review works [1–4]). In the case of the electromagnetic field, as a rule, the linear polarized time dependent space homogeneous electric field is considered, $A^\mu(t) = (0, 0, 0, A^3(t) = A(t))$. For such fields the kinetic equation has the simplest form and admits the solution in the low density approximation,

$$f(\mathbf{p}, t) = \frac{1}{4} \left| \int_{t_0}^t dt' \lambda(\mathbf{p}, t') e^{2i\theta(t', t_0)} \right|^2. \quad (1)$$

It is assumed, that the distribution function $f(\mathbf{p}, t)$ is rather small, $f(\mathbf{p}, t) \ll 1$. The amplitude $\lambda(\mathbf{p}, t)$ has different structure for the fermions (f) and the scalar bosons (b),



$$\lambda_i(\mathbf{p}, t) = \frac{eE(t)w_i(\mathbf{p})}{\omega^2(\mathbf{p}, t)}, \quad (2)$$

where $E(t) = -A(t)$ is the field strength and ($i = f, b$),

$$w_i(\mathbf{p}) = \begin{cases} \varepsilon_\perp(\mathbf{p}) = w_f, \\ P = w_b, \end{cases} \quad (3)$$

$\varepsilon_\perp(\mathbf{p}, t) = (m^2 + p_\perp^2)^{1/2}$; is the transversal energy ($p_\perp = (p_1^2 + p_2^2)^{1/2}$), $P = p_\parallel - eA(t)$ is the kinematic momentum and $\omega(\mathbf{p}, t) = [\varepsilon_\perp^2(\mathbf{p}) + P^2]^{1/2}$ is the quasi-energy.

For the periodical electric («laser») field

$$A(t) = (E_0/v) \cos vt, \quad E(t) = E_0 \sin vt \quad (4)$$

(v is the angular frequency) on the basis of Eq. the following solution was obtained in the leading approximation relatively of the electric field :

$$f(\mathbf{p}, t) = f_0(\mathbf{p}) + \frac{1}{2} f_2(\mathbf{p}) [1 - \cos 2vt], \quad (5)$$

$$f_{0i}(\mathbf{p}) = \pi \alpha E_0^2 \frac{v^2 w_i^2(\mathbf{p})}{\omega_0^4(\mathbf{p}) [4\omega_0^2(\mathbf{p}) - v^2]^2}, \quad (6)$$

$$f_{2i}(\mathbf{p}) = \pi \alpha E_0^2 \frac{w_i^2(\mathbf{p})}{\omega_0^4(\mathbf{p}) [4\omega_0^2(\mathbf{p}) - v^2]}. \quad (7)$$

Here we used the notations: $\omega_0(\mathbf{p}) = \omega(\mathbf{p}, t)|_{E=0}$ and $\alpha = e^2 / 4\pi$. The resonance condition $v = 2\omega_0(\mathbf{p})$ shows on the one photon character excitation of the particle-antiparticle plasma. For the bosons according to Eq.(3) $w_{b0} = P_\parallel$.

In the present work, on the basis of Eqs. (5)–(7) some physical observables will be obtained, both for the fermionic and the bosonic fields. The question is about the particle number density of the quasi-particles

$$n(t) = g \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} f(\mathbf{p}, t) \quad (8)$$

(g is the degeneration factor: $g_f = 4$ and $g_b = 2$ for the particles with the lowest spins), the energy density

$$\varepsilon(t) = g \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \omega(\mathbf{p}, t) f(\mathbf{p}, t). \quad (9)$$



The Integral Observables

We will consider the fermion and boson cases separately.

The Fermion Case

Firstly let us calculate the number density (8) of the electron-positron plasma (EPP). Performing the transition to the cylindrical coordinate system,

$$\int d^3p = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} dp_p \int_0^{\infty} p_{\perp} dp_{\perp},$$

and substituting the functions (6) and (7) into Eq.(8), we obtain

$$n(t) = n_0 + \frac{1}{2}n_2[1 - \cos 2vt], \quad (10)$$

where ($b = v/2m$),

$$n_0^f = \alpha E_0^2 \frac{-4\sqrt{|1-b^2|} + 4 - 2b^4 - b^2(3\sqrt{|1-b^2|} - 1)}{24b^4 m \sqrt{|1-b^2|}}, \quad (11)$$

$$n_2^f = \alpha E_0^2 \frac{-4\sqrt{|1-b^2|} + 4 - 2b^4 - b^2(3\sqrt{|1-b^2|} - 1)}{24b^4 m \sqrt{|1-b^2|}}, \quad (12)$$

In the leading approximation relatively $b \ll 1$ (this condition is a consequence of the low density approximation $f \ll 1$) we obtain from here

$$n_0^f = \frac{5\alpha}{3 \cdot 2^8 m} E_0^2 \frac{v^2}{m^2}, \quad n_2^f = \frac{3\alpha}{32m} E_0^2. \quad (13)$$

where now

$$\varepsilon_0^f = \frac{\alpha E_0^2}{\pi} \cdot \frac{3 \arctan(b/\sqrt{|1-b^2|}) + (3b+2b^3)\sqrt{|1-b^2|}}{12b^3 \sqrt{|1-b^2|}}. \quad (15)$$

The integral ε_2^f has the logarithmic divergence. The regularization procedure in such kind divergent integral is not uniquely defined (the cut off over upper momentum, a few variants of the counter-term method) and leads to some different results. We will use the method based on subtraction of the leading terms at $p \rightarrow \infty$. The p -dependent

$$\varepsilon_{2R}^f = \frac{\alpha g E_0^2 m^2}{2(2\pi)^2} \int \frac{d^3p}{\omega_0^3 |4\omega_0^2 - v^2|} = \frac{\alpha E_0^2}{2\pi b^3} \cdot \left(b - \sqrt{|1-b^2|} \arctan \frac{b}{\sqrt{|1-b^2|}} \right). \quad (16)$$

The Boson Case

Let us calculate now the boson particle number density similar to the fermion case

$$n_0^b = \alpha E_0^2 \frac{-8\sqrt{|1-b^2|} + 8 - b^2(4+b^2)}{24b^4 m \sqrt{|1-b^2|}}, \quad (17)$$

The resonance denominators in Eqs. (11), (12) show also on the one photon mechanism of EPP excitation.

Dependence $n_0^f(\lambda)$ and $n_2^f(\lambda)$ are depicted on Fig.1. In the «dangerous» point $b = 1$ (it corresponds to the energy condition of the one EPP creation, $v = 2m$) the density $n_2^f(\lambda)$ remains limited while $n_0^f(\lambda)$ is displayed the break stipulated by absence of the damping mechanism in the considered approximation.

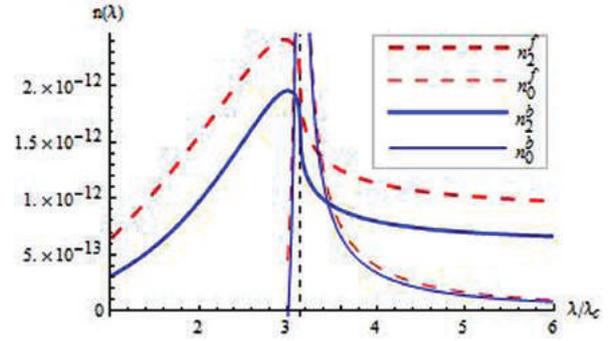


Fig.1. The number densities as functions λ of the EPP and boson plasma for $E_0 = 3 \cdot 10^{-5} E_{cr}$

The frequency dependence of the energy density has the form similar to Eq.(10),

$$\varepsilon(t) = \varepsilon_0 + \frac{1}{2}\varepsilon_2[1 - \cos 2vt], \quad (14)$$

part of the numerator in the integrand function Eq.(9) is equal to $\varepsilon_1^2(\mathbf{p})$. The relevant reduction of the divergence degree can be reached by means of elimination here p^2 -dependence. Thus, the regularized expression for the energy density of the oscillation part EPP energy will be equal then

$$n_0^b = \alpha E_0^2 \frac{-8\sqrt{|1-b^2|} + 8 - b^2(4+b^2)}{24b^4 m \sqrt{|1-b^2|}}, \quad (18)$$

Fig.1 shows the particle number density boson and fermion for comparison.



The corresponding energy density has the same time dependence (15), where now

$$\varepsilon_0^b = \frac{\alpha E_0^2 b^2}{4\pi} \left(-6\sqrt{|1-b^2|} \arctan \frac{b}{\sqrt{|1-b^2|}} - 2b(-3+b^2) \right). \quad (19)$$

The time dependent part of the energy density is diverged also (the logarithmic divergence) as in the fermionic case. However, the counter-term procedure leads (in the leading approximation) to nulling of the corresponding integral, i.e.

$$\varepsilon_{2R}^b = 0. \quad (20)$$

Some actual time dependence appears here in the next order ($\sim \alpha^4$) of the perturbation theory, that corresponds to the 4-th harmonics in $\varepsilon_R^b(t)$ spectrum.

Summary

We had investigated some features in behaviour of the particle number and energy densities of the fermion and boson particle-antiparticle gases created from vacuum under action of a strong periodical electric field. We had limited by the multiphoton domain $\gamma \gg 1$ only (γ is the adiabaticity parameter). Figs. 1 and 2 demonstrate the well known fermion domination in the theory of vacuum particle creation [6].

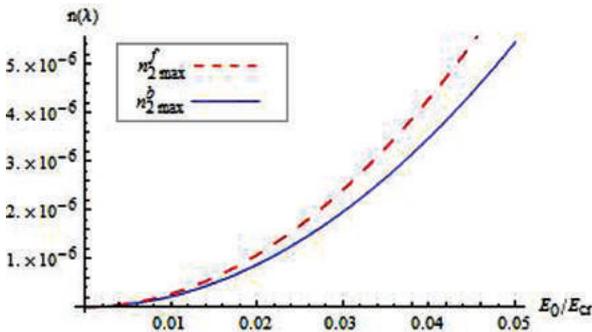


Fig.2. The dependence $n_{max}(E_0)$ for the bosons and fermions

Position of the resonance points of the curves $n_{0,2}^i(\lambda)$ (Fig.1) is rather unexpected: in shifts considerably sideways long waves relatively of the point $\lambda = \pi\lambda_c$ which corresponds to the one photon creation mechanism.

A consequence of the conducted analysis is understanding of the fact that the distribution functions (5)–(7) (obtained as a result of the perturbation theory) have not «good» asymptotics at $p \rightarrow \infty$ that leads to the divergence of the energy density and the all highest moment.

The entropy calculated on the basis of Eqs. (6) and (7) has a complicated oscillator character.

The authors are grateful Prof. A. V. Prozorkevich for useful remarks.

References

1. Vinnik D. V., Miserny V. A., Prozorkevich A. V., Smolyansky S. A., Toneev V. D. Kinetic description of vacuum particle production in collisions of ultrarelativistic nuclei // Physics of Atomic Nuclei. 2001. Vol. 64. P. 775–786.
2. Blaschke D. B., Prozorkevich A. V., Röpke G., Roberts C. D., Schmidt S. M., Shkirmanov D. S., Smolyansky S. A. Dynamical Schwinger effect and high-intensity lasers. Realising of nonperturbative QCD // Eur. Phys. J. D. 2009. Vol. 55. P. 341–358.
3. Filatov A. V., Prozorkevich A. V., Smolyansky S. A., Toneev V. D. Inertial Mechanism : Dynamical Mass as a Source of Particle Creation // Physics of Elementary Particles and Atomic Nuclei. 2008. Vol. 39. P. 1721–1770.
4. Smolyansky S. A., Blaschke D. B., Tarakanov A. V., Schmidt S. M. Vacuum particle creation: statistical description // Applied Nonlinear Dynamics. 2009. Vol. 17. P. 17–29 (in russian).
5. Smolyansky S. A., Blaschke D. B., Fedotov A. M., Lavkin A. G., Prozorkevich A. V. Short Distance electro-magnetic Response of the Physical Vacuum. 2011. Workshop PWL 2011, Dresden, Sept. 5–9. URL: www.hzdr.de. (дата обращения: 01.06.2012).
6. Grib A. A., Mamaev S. G. and Mostepanenko V. M. Vacuum Quantum Effects in Strong External Fields. Friedmann Laboratory Publishing. St. Petersburg, 1994.



УДК 579.23:53.086:615.281

СОВРЕМЕННЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ ИЗУЧЕНИЯ УЛЬТРАСТРУКТУРЫ КЛЕТОК МИКРООРГАНИЗМОВ МЕТОДОМ СКАНИРУЮЩЕЙ ЗОНДОВОЙ МИКРОСКОПИИ



П. С. Ерохин, Д. В. Уткин, Т. В. Бугоркова, О. С. Кузнецов, Н. А. Осина

ФКУЗ Российский научно-исследовательский противочумный институт «Микроб», Саратов
E-mail: rusrap1@microbe.ru

В обзоре приведены основные сведения о применении сканирующей зондовой микроскопии в микробиологических исследованиях. Методы сканирующей зондовой микроскопии нашли использование в изучении ультраструктуры и морфологических особенностей микроорганизмов, их механических свойств и др. Обсуждены перспективы развития методов сканирующей зондовой микроскопии в качестве инструмента изучения микроорганизмов и их сообществ.

Ключевые слова: микроорганизмы, биопленка, методы сканирующей зондовой микроскопии, полуконтактный метод, контактный метод, сканирующая туннельная микроскопия.

Current Abilities Investigation Ultrastructure Cells of Microorganisms Using Method Scanning Probe Microscopy

P. S. Erokhin, D. V. Outkin, T. V. Bugorkova,
O. S. Kuznetsov, N. A. Ossina

This review presents data about current application of scanning probe microscopy in microbiology research. Methods of scanning probe microscopy belong used to study the ultrastructural and morphological features of microorganisms, their mechanical properties et al. The review also present data about the development methods of scanning probe microscopy to study microorganisms and their communities.

Key words: microorganisms, biofilm, methods of scanning probe microscopy, semicontact method, contact method, scanning tunneling microscopy.

Введение

К одним из наиболее современных методов, позволяющим производить измерения характеристик материалов и диагностику процессов в низкоразмерных системах, относится электронная и сканирующая зондовая микроскопия (СЗМ). СЗМ включает в себя сканирующую туннельную микроскопию и спектроскопию [1, 2], а также различные варианты сканирующей силовой микроскопии (ССМ), в частности – атомно-силовую микроскопию (АСМ) [3–5]. Методы СЗМ, в отличие от электронной микроскопии, имеют ряд преимуществ: подготовка объекта к исследованию менее длительна, не требуются дополнительные этапы окрашивания, возможность исследований с субнанометровым пространственным разрешением локальных свойств клеточной стенки, а

также магнитной и электрической проводимости исследуемого объекта.

Физической основой функционирования АСМ являются силы межатомного (или межмолекулярного) взаимодействия, возникающие между исследуемой поверхностью и зондом, находящимся на расстоянии порядка 0,1–10 нм. В зависимости от локально измеряемой физической величины, используемой для получения информации о локальных свойствах исследуемой поверхности, в СЗМ используются различные типы зондов с кантилевером.

Методы СЗМ получили широкое применение в метрологическом обеспечении нанотехнологий, но в изучении биологических объектов используются недостаточно.

Цель настоящего обзора – дать наиболее характерные примеры использования АСМ в исследованиях различных характеристик микроорганизмов.

1. Полуконтактная АСМ

Наиболее распространенным режимом АСМ, применимым для исследования морфологии и изучения поверхностных ультраструктур, является полуконтактный, который включает в себя три метода сканирования: полуконтактный, рассогласования и отображения фазы.

Характерной особенностью полуконтактного метода сканирования образца является то, что большую часть периода колебаний кантилевер не касается его поверхности. Контакт иглы кантилевера с образцом происходит при сближении иглы с его поверхностью до попадания в область сил отталкивания. При работе в этом режиме возбуждаются вынужденные колебания кантилевера вблизи резонанса с амплитудой порядка 10–100 нм. В зависимости от характера взаимодействия иглы кантилевера с поверхностью объекта, может меняться сдвиг фазы основной гармоники колебаний кантилевера относительно возбуждающего сигнала и амплитуды. Основным фактором является ограничение амплитуды колебаний на уровне,



примерно равном расстоянию между вершиной иглы в свободном состоянии кантилевера и поверхностью исследуемого материала.

Полуконтактный метод в большей степени используется для исследования топографии исследуемого объекта. Проведенное рядом авторов изучение микроорганизмов подтвердило линейные размеры бактерий *Escherichia coli*, *Pseudomonas putida*, *Bacillus subtilis*, антибактериальную активность хитозана в отношении *B. cereus* [5, 6].

Применение метода рассогласования АСМ дает возможность более детального рассмотрения морфологии и ультраструктуры бактериальных клеток и вирусов [4]. Этот метод основан на регистрации амплитуды колебаний кантилевера, что способствует выявлению более мелких морфологических особенностей исследуемого объекта. С использованием метода рассогласования выявлены флагеллярный аппарат, пилы и жгутики бактерий [5].

В методе отображения фазы регистрируется не только амплитуда колебаний кантилевера, но и сдвиг его фазы колебаний. Последний показатель зависит от жесткости зонда и объекта исследований, а также топографии поверхности (разброс высот):

$$\Delta\varphi \sim k(z_1 - z_2)$$

Если поверхность объекта будет неоднородной по своим свойствам, соответствующим будет и сдвиг фазы. Метод отображения фазы АСМ был использован для выявления одной из важнейших поверхностных структур бактериальной клетки – капсулы с высоким пространственным разрешением. На основе сдвига фазы колебаний зонда на примере грамположительных и грамотрицательных бактерий были получены количественные показатели, отражающие размеры капсулы. Соответствующее изменение фазы составило $1-2^\circ$ для бескапсульных и $15-35^\circ$ для капсульных микроорганизмов [7].

2. Контактная АСМ

Отличительной чертой контактных методов является наличие непосредственного контакта между иглой кантилевера и исследуемым объектом. Работа в этом режиме основана на регистрации взаимодействия локального участка поверхности с зондом. При идеальных условиях сила воздействия на исследуемый материал, в первую очередь, зависит от прогиба и жесткости балки кантилевера. Контактная АСМ включает в себя метод постоянной высоты, метод латеральных сил, метод модуляции силы.

Метод постоянной высоты по своей сути аналогичен полуконтактному методу и может дать информацию о рельефных особенностях объекта

исследования. Метод латеральных сил позволяет различать области с различными коэффициентами трения. Он может быть полезен при исследовании полупроводников, полимеров, пленочных покрытий, при изучении физико-химических свойств поверхности (например, загрязнений). Данные об использовании этого метода при изучении клеток микроорганизмов отсутствуют.

В методе модуляции силы на Z-секцию сканера подается дополнительное модулированное напряжение. Оно совершает вертикальные колебания сканера. В зависимости от локальной жесткости поверхности образца изменяется величина его продавливания и изгиб кантилевера. Этот метод может быть использован для изучения жесткости биологических объектов [8, 9]. Применение указанных методов АСМ способствовало определению локальных свойств бактерий: жесткости, пластичности и адгезивности через определение силы взаимодействия зонда с поверхностью клетки, вычисление энергии их взаимодействия, зета потенциала и угла контакта бактерий с поверхностью [10, 11].

Например, D. S. Hwang et al [12], изучали адгезивные свойства *Escherichia coli* K12, T. G. Kuznetsova et al [10] показали, что для случая многократного превосходства жесткости кантилевера над жесткостью образца, силовое взаимодействие зонд-объект описывается соотношением

$$F(h) = (4/3)R^{1/2} (E^*h^3/2),$$

$$E^* \approx (E_{\text{sample}})/(1 - \nu_{\text{sample}}^2),$$

где h – глубина взаимодействия, E^* – эффективный модуль системы зонд-образец, E_{sample} , ν_{sample} – модуль Юнга и коэффициент Пуассона образца.

По данным зарубежных авторов [3, 13] метод модуляции силы перспективен для изучения взаимодействия антиген-антитело, бактерий и бактериофагов. Для этого на иглу кантилевера наносили специфические или неспецифические антитела и определяли их адгезионное взаимодействие с бактериями методом модуляции силы. Использование такого подхода позволило определить несколько параметров – резонансную частоту колебаний зонда, силу адгезии и др. Согласно данным U. Sungkanak et al [15], метод выявления возбудителя холеры с использованием АСМ зондов обладает высокой чувствительностью (примерно 146.5 пг/Гц) и нижняя граница детекции (10^3 м.к./мл).

3. Бесконтактный режим

Преимуществом АСМ перед электронной микроскопией является возможность проведения исследований в бесконтактном режиме сканирования. Суть режима сводится к отсутствию непо-



средственного физического контакта зонда с исследуемым материалом. В бесконтактном режиме сканирования кантилевер колеблется на собственной резонансной частоте. Около поверхности исследуемого материала, кантилевер попадает в неоднородное силовое поле. Наличие градиента силы приводит к частотному сдвигу резонансного пика. При сканировании в бесконтактном режиме, обратная связь меняет расположение иглы кантилевера по нормали к поверхности объекта. При этом поддерживается постоянная амплитуда или фаза колебаний кантилевера. В результате сканирования получается поверхность постоянного градиента силы. В режиме постоянной высоты регистрируется изменение либо амплитуды, либо фазы колебаний кантилевера, при неизменном расстоянии между зондом и поверхностью исследуемого объекта. По данным ряда авторов, исследование биопленок микроорганизмов может быть выполнено не только в воздушной, но и в жидкой среде [16, 17]. Для этого требуются специальные зонды, обладающие меньшей жесткостью, иногда в форме треугольника для снижения влияния капиллярных сил. Бесконтактным методом АСМ была установлена структура биопленки *Salmonella typhimurium* [18], а также ультраструктура бактериальных клеток, входящих в состав сообщества микроорганизмов. Бактерии, исследованные в жидкой среде, более шероховаты по сравнению с клетками, исследуемыми на воздухе. Однако использование жидкостной микроскопии накладывает дополнительные условия для исследования микроорганизмов, связанных с их возможным перемещением в жидкости. Группой авторов было показано [19, 20], что эффективность применения этого типа микроскопических исследований может

быть повышена с иммобилизацией бактерий поли-L-лизиним. Такая методика позволяет получить больше информации о микроорганизмах, а также снизить до минимума влияние дрейфа бактерий в жидкости на качество получаемой информации. Авторами [19] установлено, что бактерии, иммобилизованные на слюду, и исследованные в жидкой фазе более сморщены по сравнению с бактериями, изучение которых проводилось на воздухе. Кроме того представленные М. J. Doktycz et al [19] данные свидетельствуют о том, что бесконтактный режим сканирования в меньшей степени позволяет выявлять флагеллярный аппарат клеток прокариот.

4. СЗМ в изучении электрической проводимости биологических объектов

Методы СЗМ нашли свое применение для изучения проводимости биологических объектов. Для этих целей предложено использовать сканирующую туннельную микроскопию (СТМ) и спектроскопию (СТС) [1, 2]. Суть этого режима СЗМ заключается в поддержании постоянной величины туннельного тока с помощью системы обратной связи. При этом сигнал обратной связи, подаваемый на сканер для вертикального смещения, отражает рельеф поверхности. Метод сканирующей туннельной спектроскопии употребим для получения вольт-амперных характеристик исследуемого образца [1, 2].

В связи с тем, что СТМ и СТС изображения не могут быть проанализированы в рамках ортодоксальной теории туннельных явлений, была разработана самосогласованная теория, которая дает наиболее полное описание туннелирования в наносистемах. Согласно ей было получено выражение для туннельного тока, которое адекватно описывает процессы в СТМ и СТС измерениях

$$I \sim 2\pi e \int ((T^2 v_p(\varepsilon) v_k(\varepsilon) [n_p^0(\varepsilon) - n_k^0(\varepsilon - eV)]) / (T^2 v_p \Gamma_p + T^2 v_k \Gamma_k + \Gamma_p \Gamma_k)) d\varepsilon,$$

в этом выражении $v_p(k)$ – плотность состояний, $n_p(k)$ – числа заполнения, Γ_p, Γ_k – скорости релаксации носителей.

Клетки прокариот [1] способны использовать широкий круг растворенных акцепторов электронов (например, кислород, азот, фосфор), которые присоединяются к их внеклеточным ферментам. Многие бактерии могут облеплять нерастворимые материалы и тем самым сохранять внеклеточный обмен электронов. Поэтому обязательным этапом исследования электрической проводимости биологических объектов является нанесение на препарат слоя металла, что существенно повышает информативность метода исследования. Согласно данным М. Y. El-Naggar et al [1], для оптимизации

исследований электрической проводимости микроорганизмов с использованием СТМ, в качестве напыляемых металлов предложено использовать железо и марганец.

5. Перспективы и проблемы применения АСМ

Методы атомно-силовой микроскопии имеют широкие перспективы в изучении микробиологических объектов. Возможность изучения топографии, морфологии, ультраструктуры бактериальных клеток и вирусов расширяет наши знания о микроорганизмах. Высокое разрешение указанных выше методов АСМ, позволяет использовать их для изучения архитектоники и особенностей строения, состава биопленок и межклеточных структур микроорганизмов [7, 21–24], влияния



антибактериальных препаратов на морфологию бактерий и изменение клеточной стенки [25, 26]. Важным направлением является использование методов АСМ при оценке токсических действий, на моделях микроорганизмов, наноматериалов и других синтетических материалов, применяемых в медицине [27, 28].

Некоторые проблемы возникают при использовании методов СЗМ при работе с возбудителями опасных инфекционных заболеваний, поскольку подразумевается выполнение ряда дополнительных мер по обеспечению биологической безопасности. Обеззараживание исследуемого биологического материала должно обеспечивать не только безопасную работу, но и сохранять морфологию и ультраструктуру микроорганизмов. В настоящее время для этих целей широко используют определенные концентрации альдегидов и спиртов [29]. Проведенные исследования и данные других авторов [5, 29, 30] показали, что 2,5% глутаральдегид соответствует необходимым требованиям и поэтому используется для фиксации микроорганизмов при изучении морфологии, ультраструктуры бактериальных клеток и их спор [8, 9].

Заключение

Проведенный анализ литературных данных показал нарастающий интерес к использованию АСМ при исследовании микроорганизмов. Большая совокупность методов СЗМ способствует решению широкого диапазона задач, направленных на углубленное изучение многих свойств микроорганизмов, включая специфическое или неспецифическое взаимодействие возбудителей инфекционных заболеваний с антителами или бактериофагами. Атомно-силовая микроскопия позволяет получать комплексную надежную количественную информацию о физической природе процессов, протекающих в биологических объектах.

Список литературы

1. El-Naggar M. Y., Gorby Y. A., Xia W., Neelson K. H. The molecular density of states in bacterial nanowires // *Biophys. J.* : Biophys. Let. Doi : 10.1529/biophysj.108.134411.
2. Gorby Y. A., Yanina S., Mclean J. S., Rosso K. M., Moyles D., Dohnalkova A., Beveridge T. J., Chang I. S., Kim B. H., Kim K. S., Culley D. E., Reed S. B., Romine M. F., Saffarini D. A., Hill E. A., Shi L., Elias D. A., Kennedy D. W., Pinchuk G., Watanabe K., Ishii S., Logan B., Neelson K. H., Fredrickson J. K. Electrically conductive bacterial nanowires produced by *Shewanella oneidensis* strain MR-1 and other microorganisms // *PNAS*. 2006. Vol. 103, № 30. P. 11358–11363.
3. Johnson L., Gaupa A. K., Ghafoor A., Akin Demir, Bashir R. Characterization of vaccinia virus particles using microscale silicon cantilever resonators and atomic force microscopy // *Sens. and Actuat. B*. 2006. Vol. 115. P. 189–197.
4. Кайшева А. Л., Иванов Ю. Д., Згода В. Г., Французов П. А., Плевакова Т. О., Крохин Н. В., Зиборов В. С., Арчаков А. И. Визуализация и идентификация вирусных частиц гепатита с при помощи атомно-силовой микроскопии, сопряженной с МС/МС анализом // *Биомедицинская химия*. 2010. Т. 56, вып. 1. С. 26–39.
5. Chao Y., Zhang T. Optimization of fixation methods for observation of bacterial cell morphology and surface ultrastructures by atomic force microscopy // *Appl. Microbiol. Biotechnol.* 2011. Vol. 92. P. 381–392.
6. Fernandes J. C., Eaton P., Gomes A. M., Pintado M. E., Malcata F. X. Study of the antibacterial effects of chitosans on *Bacillus cereus* (and its spores) by atomic force microscopy imaging and nanoindentation // *Ultramicrosc.* 2009. Vol. 109. P. 854–860.
7. Stukalov O., Korenevsky A., Beveridge T. J., Dutcher J. R. Use of atomic force microscopy and transmission electron microscopy for correlative studies of bacterial capsules // *Appl. and Environ. Microbiol.* 2008. Vol. 74, № 17. P. 5457–5465.
8. Chada V. G. R., Sanstad E. A., Wang R., Driks A. Morphogenesis of *Bacillus* spore surfaces // *J. of Bacteriol.* 2003. Vol. 185, № 21. P. 6255–6261.
9. Zaman M. S., Goyal A., Dubey G. P., Gupta P. K., Chandra H., Das T. K., Ganguli M., Singh Y. Imaging and analysis of *Bacillus anthracis* spore germination // *Microsc. Res. Tech.* 2005. Vol. 66, № 6. P. 307–311.
10. Kuznetsova T. G., Starodubtseva M. N., Yegorenkov N. I., Chizhik S. A., Zhdanov R. I. Atomic force microscopy probing of cell elasticity // *Micron*. 2007. Vol. 38. P. 824–833.
11. Emerson R. J., Camesano T. A. Nanoscale investigation of pathogenic microbial adhesion to a biomaterial // *Appl. and Environ. Microbiol.* 2004. Vol. 70, № 10. P. 6012–6022.
12. Hwang D. S., Gim Y., Cha H. J. Expression of functional recombinant mussel adhesive protein type 3A in *Escherichia coli* // *Biotechnol. Prog.* 2005. Vol. 21. P. 965–970.
13. Volle C. B., Ferguson M. A., Aidala K. E., Spain E. M., Nunez M. E. Spring constants and adhesive properties of native bacterial biofilm cells measured by atomic force microscopy // *Coll. Surf. B Biointerfaces*. 2008. Vol. 67, № 1. P. 32–40.
14. XiaoXiao H., Rong J., Liu Y., KeMin W., Wei L., Wei-Hong T., HuiMin L. Study on the specific interaction between angiogenin and aptamer by atomic force microscopy (AFM) // *Chi. Sci. Bull.* 2008. Vol. 53, № 2. P. 198–203.
15. Sungkanak U., Sappat A., Wisitsoraat A., Promptmas C., Tuantranont A. Ultrasensitive detection of *Vibrio cholerae* O1 using microcantilever-based biosensor with dynamic force microscopy // *Biosens. Bioelectron.* 2010. Vol. 26, № 2. P. 784–789.
16. Ahimou F., Semmens M. J., Novak P. J., Haugstad G. Biofilm cohesiveness measurement using a novel atomic force microscopy methodology // *Appl. and Environ. Microbiol.* 2007. Vol. 73, № 9. P. 2897–2904.
17. Raspanti M., Congiu T., Guizzardi S. Tapping mode atomic force microscopy in fluid of hydrated extracellular matrix // *Matrix Biol.* 2001. Vol. 20, № 8. P. 601–604.
18. Jonas K., Tomenius H., Kader A., Normak S., Romling U., Belova L. M., Melefors O. Roles of curli, cellulose and BapA in *Salmonella* biofilm morphology studied by atomic force microscopy // *BMC Microbiol.* 2001. Vol. 70, № 7. doi: 10.1186/1471-2180-7-70.
19. Doktycz M. J., Sullivan C. J., Hoyt P. R., Pelletier D. A., Wu S., Allison D. P. AFM imaging of bacteria in liquid media



- immobilized on gelatin coated mica surfaces // Ultramicr. 2003. Vol. 97. P. 209–216.
20. Laurino P., Kikkeri R., Azzouz N., Seeberger P. H. Detection of bacteria using gluco-dendronized polylysine prepared by continuous flow photofunctionalization // Nano Lett. 2011. Vol. 11. P. 73–78.
 21. Beech I. B., Smith J. R., Steele A. A., Penegar I., Campbell S. A. The use of atomic force microscopy for studying interaction of bacterial biofilms with surface // Coll. and surf. B: Bioint. 2002. Vol. 23. P. 231–247.
 22. Inoue T., Shingaki R., Sogawa N., Sogawa C. A., Asaumi J.-I., Kokeguchi S., Fukui K. Biofilm formation by a Fimbriae-Deficient mutant of *Actinobacillus actinomycescomitans* // Microbiol. Immunol. 2003. Vol. 47, № 11. P. 877–881.
 23. Pham D. K., Ivanova E. P., Wright J. P., Nicolau D. V. AFM analysis of the extracellular polymeric substances (EPS) released during bacterial attachment on polymeric surfaces // Proc. SPIE. 2003. Vol. 4962. P. 151–159.
 24. Yu B., Chen M., Crawford R. J., Ivanova E. P. Bacterial extracellular polysaccharides involved in biofilm formation // Molecules. 2009. Vol. 14. P. 2535–2554.
 25. Hammer M. U., Brauser A., Olak C., Brezesinski G., Goldmann T., Gutschmann T., Andra J. Lipopolysaccharide interaction is decisive for the activity on the antimicrobial peptide NK-2 against *Escherichia coli* and *Proteus mirabilis* // Biochem. J. 2010. Vol. 427. P. 477–488.
 26. Braga P. C., Ricci D. Atomic force microscopy: application to investigation of *Escherichia coli* morphology before and after exposure to cefodizime // Antimicrob. agents and chemother. 1998. Vol. 42, № 1. P. 18–22.
 27. Дерябин Д. Г., Васильченко А. С., Алешина Е. С., Тлягулова А. С., Нукиян А. Н. Исследование взаимодействия углеродных наноматериалов с клетками *Escherichia coli* методом атомно-силовой микроскопии // Российские нанотехнологии. 2010. Т. 5, № 11–12. С. 136–141.
 28. Fang J., Lyon D. Y., Wiesner M. R., Dong J., Alvarez P. J. J. Effect of a fullerene water suspension on bacterial phospholipids and membrane behavior // Environ. Sci. Technol. 2007. Vol. 41. P. 2636–2642.
 29. Pelling A. E., Li Y., Wenyuan S., Gimzewski J. K. Nanoscale visualization and characterization of *Mycococcus Xanthus* cells with atomic force microscopy // PNAS. 2005. Vol. 102, № 18. P. 6484–6489.
 30. Boyd J. M., Dacanay A., Knickle L. C., Touhami A., Brown L. L., Jericho M., Johnson S. C., Reith M. Contribution of Type IV Pili to the virulence of *Aeromonas salmonicida* subsp. *salmonicida* in Atlantic Salmon (*Salmo salar* L.) // Infect. and Immun. 2008. Vol. 76, № 4. P. 1445–1455.

УДК 577.31

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНДОТЕЛИЙ-ЗАВИСИМОЙ РЕЛАКСАЦИИ КЛЕТКИ ГЛАДКОЙ МУСКУЛАТУРЫ



А. Ю. Неганова, Д. Э. Постнов

Саратовский государственный университет
E-mail: nasty1503@yandex.ru, E-mail: postnov@info.sgu.ru

Работа посвящена исследованию характеристик локальных механизмов регуляции сократительной активности клетки гладкой мускулатуры средствами компьютерного моделирования. Влияние эндотелия моделируется в виде роста концентрации оксида азота NO, который активирует производство циклического гуанозинмонофосфата (сGMP). Последний влияет на баланс внутриклеточной концентрации кальция и, в конечном итоге, на сократительную активность клетки. Согласно результатам проведенных вычислительных экспериментов сGMP-индуцированное угнетение Ca²⁺-АТФазы, локализованной в мембране клетки (а) или в мембране саркоплазматического ретикулума (б), по-разному влияет на характеристики кальциевых колебаний и, следовательно, потенциально имеет различное релаксирующее действие.

Ключевые слова: клетка гладкой мускулатуры, кальциевые колебания, циклический гуанозинмонофосфат.

Mathematical Modeling of Endothelium-Induced Smooth Muscle Cell Relaxation

A. Yu. Neganova, D. E. Postnov

By means of computer modeling we investigate the characteristics of the local mechanisms of regulation of contractile activity of smooth muscle cells. Influence of the endothelium is modeled as the increase of nitric oxide (NO) concentration and subsequent production of cyclic guanosine monophosphate (сGMP). The latter affects the balance of intracellular calcium concentration and, ultimately, the contractile activity of the cell.

Our computations show, that сGMP-induced inhibition of Ca²⁺-ATPase, localized (i) in the cell membrane or (ii) in the membrane of sarcoplasmic reticulum has a different effect on the characteristics of calcium oscillations and, therefore, potentially has a different relaxing effect.

Key words: smooth muscle cell, calcium oscillations, cyclic guanosine monophosphate.

Введение

Сократительная активность клеток гладкой мускулатуры (КГМ) является основным фактором, управляющим просветом сосуда. Известно, что нарушения в регуляции тонуса сосудов связаны с такими заболеваниями, как, например, гипертония или диабет. Несмотря на отсутствие детальной информации о причинно-следственных связях и механизмах этих нарушений, нет никаких сомнений в том, что они есть. Поэтому очень важно изучать механизмы работы КГМ для того, чтобы понять, какие именно сбои в их работе могут быть связаны с возникновением тех или иных заболеваний.

Механическое сокращение КГМ контролируется Ca²⁺ регулируемым ферментом [1, с. 340]. В свою очередь изменение внутриклеточной концен-



трации Ca^{2+} играет основную роль в сокращении КГМ и контролируется различными путями. Так, базальный тонус сосуда поддерживается фоновой активностью симпатических нервных окончаний. Нейромедиатор (норадреналин) высвобождается в ответ на поступление по аксону нейрона потенциала действия и вызывает усиление сократительной активности КГМ посредством активации внутриклеточного производства вторичного мессенджера IP_3 [2]. IP_3 вызывает значительный рост внутриклеточной концентрации Ca^{2+} и, как следствие, сокращение КГМ. Другой механизм регуляции тонуса сосуда основан на активации механочувствительных ионных каналов, активирующихся при растяжении его стенки. В ответ активируются сократительные механизмы КГМ и наступает ответное сокращение сосуда.

Циклический гуанозинмонофосфат (cyclic guanosine monophosphate – cGMP) вырабатывается в КГМ под влиянием оксида азота (nitric oxide – NO), поступающего из клеток эндотелия, которые выстилают внутреннюю поверхность сосуда. Согласно экспериментальным данным действие cGMP на процессы в КГМ разнонаправленно, однако два основных его результата это: 1) понижение концентрации Ca^{2+} во внутриклеточной жидкости, 2) снижение чувствительности к Ca^{2+} сократительного механизма. Оба эти эффекта в конечном итоге приводят к расслаблению КГМ [3–6].

Как можно видеть, путей влияния на тонус сосудов много. Наряду с экспериментальным изучением такой сложной системы взаимодействие всех этих механизмов пытаются понять с помощью математического моделирования [2,7]. Количественная математическая модель позволяет в рамках вычислительного эксперимента воспроизвести ситуации, которые крайне трудно или невозможно реализовать на живом объекте. Кроме того, в этом случае возможно одновременно фиксировать изменение целого ряда величин, что также затруднительно в натурном эксперименте.

В данной работе мы используем метод вычислительного эксперимента для исследования того, как изменение концентрации оксида азота NO влияет на активный транспорт кальция и колебания его внутриклеточной концентрации.

Математическая модель

При моделировании внутриклеточной динамики кальция широко используются модели «двух ёмкостей» и «одной ёмкости» [2,8]. Расширенная и уточненная версия модели «двух ёмкостей» была предложена в работе G. Houart, G. Dupont и A. Goldbeter [7]. Она содержит 3 дифференциаль-

ных уравнения и описывает изменение во времени трех переменных: концентрацию свободного Ca^{2+} в цитозоле (Z), его концентрацию во внутриклеточных хранилищах (Y) и концентрацию IP_3 (A). Уравнения модели имеют вид:

$$\frac{dZ}{dt} = V_{in} - V_2 + V_3 + k_f Y - kZ,$$

$$\frac{dY}{dt} = V_2 - V_3 - k_f Y,$$

$$\frac{dA}{dt} = \beta V_4 (1 + \alpha(Z - Z_0)) - V_5 - \varepsilon A,$$

где

$$V_{in} = V_0 + V_1 \beta,$$

$$V_2 = V_{M2} \frac{Z^2}{K_2^2 + Z^2},$$

$$V_3 = V_{M3} \frac{Z^m}{K_Z^m + Z^m} \frac{Y^2}{K_Y^2 + Y^2} \frac{A^4}{K_A^4 + A^4},$$

$$V_5 = V_{M5} \frac{A^p}{K_5^p + A^p} \frac{Z^n}{K_d^n + Z^n},$$

где V_0 – постоянное поступление Ca^{2+} из внеклеточного пространства; V_1 – максимальное поступление Ca^{2+} из внеклеточного пространства под действием стимула; β – степень стимуляции клетки агонистом, изменяется от 0 до 1; V_2 – вкачивание цитозольного Ca^{2+} во внутриклеточные хранилища; V_3 – выход Ca^{2+} из внутриклеточных хранилищ под действием кальций-индуцированного освобождения кальция (calcium-induced calcium release – CICR); V_{M2} , V_{M3} – максимальное значение для V_2 и V_3 соответственно; K_2 , K_Y , K_Z и K_A – вкачивание Ca^{2+} в хранилища, его выход оттуда и активация выхода под действием Ca^{2+} и IP_3 , соответственно; k_f – пассивная утечка кальция из хранилищ в цитозоль; k – транспорт (откачка) цитозольного Ca^{2+} в межклеточную жидкость; V_4 – максимальная интенсивность стимул-индуцированного образования IP_3 ; V_5 – значение фосфорилиции IP_3 3-киназой (ее максимальное значение V_{M5} , K_5 – константа полунасыщения); α – степень влияния Ca^{2+} на стимуляцию фосфолипазы C (phospholipase C – PLC); Z_0 – равновесная концентрация Ca^{2+} в цитозоле.

Тот факт, что 3-киназа стимулируется кальцием [9,10], отражен неявно через константу K_d . Так как распад IP_3 может осуществляться также кальциево независимым путем (при помощи 5-фосфатазы) [9,11], в уравнение (3) включено слагаемое εA , где ε – параметр.



Известно, что сGMP, образующийся внутри клетки, активирует АТФазу мембраны КГМ и АТФазу саркоплазматического ретикулума [12]. На основе этих фактов нами в уравнение (1) модели и в соотношение для V_2 были введены следующие изменения:

$$\frac{dZ}{dt} = V_{in} - V_2 + V_3 + k_f Y - k(1 + cG_1 [cGMP])Z,$$

$$V_2 = V_{M2} \frac{Z^2}{K_2^2 (1 - cG_2 [cGMP]) + Z^2}.$$

В приведенных выражениях введены новые параметры, которые характеризуют: cG_1 – увеличение выхода Ca^{2+} во внеклеточное пространство под влиянием сGMP; cG_2 – увеличение скорости активного транспорта Ca^{2+} во внутриклеточные хранилища; $[cGMP]$ – концентрация цитозольного сGMP.

Динамика концентрации внутриклеточного сGMP в рамках нашей модели описывалась следующими уравнениями и функциями [3]:

$$\frac{dE_b}{dt} = -k_1 E_b [NO] + k_{-1} E_{6c} + k_4 E_{5c},$$

$$\frac{dE_{6c}}{dt} = k_1 E_b [NO] - k_{-1} E_{6c} - k_2 E_{6c} - k_3 E_{6c} [NO],$$

$$\frac{dE_{5c}}{dt} = k_3 E_{6c} [NO] + k_2 E_{6c} - k_4 E_{5c},$$

$$\frac{d[NO]}{dt} = J_{no} - k_{dno} [NO],$$

$$\frac{d[cGMP]}{dt} = V_{max,sGC} E_{5c} - \frac{[cGMP] V_{max,pde}}{K_{m,pde} + [cGMP]},$$

$$V_{max,pde} = k_{pde} [cGMP],$$

$$k_4 = K_4 [cGMP]^m.$$

Уравнения (10), (11) и (12) описывают процессы активирования базовой формы (E_b) растворимой гуанилат циклазы (soluble guanylate cyclase – sGC) при помощи NO в два этапа, с образованием промежуточного (E_{6c}) и активированного (E_{5c}) комплексов; k_1, k_{-1} – константы скорости для процесса связывания NO с базовой формой sGC и обратного процесса соответственно; k_2 – константа скорости процесса естественного распада состояния E_{6c} в E_{5c} ; k_3 – константа скорости для NO-зависимого пути превращения E_{6c} в E_{5c} ; k_4 – константа скорости для процесса необратимого перехода состояния E_{5c} в E_b ; $K_{m,pde}$ – константа Михаэлиса–Ментен. Уравнение (13) описывает динамику концентрации NO, исходя из предположения, что NO утилизируется сразу же после отсоединения от E_{5c} так называемыми «мусорщиками» (миоглобин, гемоглобин и др.), а также за счет связывания с sGC. При этом J_{no} – это эндогенный (произведенный в эндотелии) или экзогенный (принесенный потоком крови) приток NO, выражающий физиологическую доступность NO, а k_{dno} – константа смешанного потребления NO, которая отражает активность «мусорщиков» NO. Уравнение (14) описывает динамику концентрации сGMP во времени. При этом $V_{max,sGC}$ представляет собой максимальную скорость производства сGMP, когда $E_{5c} = 1$, а $V_{max,pde}$ – максимальная скорость гидролиза сGMP. k_{pde} – константа пропорциональности между скоростью гидролиза сGMP и его концентрацией в цитозоле. В формуле (16) m отражает силу обратной связи между конечным продуктом сGMP и особым регуляторным механизмом, снижающим чувствительность sGC к NO, а K_4 – константа. Приведем численные значения модельных параметров:

NO	$220 \cdot 10^{-9}$ моль·л ⁻¹	V_0	$0.333 \cdot 10^{-7}$ моль·л ⁻¹ ·с ⁻¹
k_1	$2.0 \cdot 10^9$ моль ⁻¹ ·с ⁻¹ ·л	V_1	$0.333 \cdot 10^{-7}$ моль·л ⁻¹ ·с ⁻¹
k_{-1}	100 с ⁻¹	β	0.035
K_4	0.011	V_{M2}	$0.1 \cdot 10^{-6}$ моль·л ⁻¹ ·с ⁻¹
k_2	0.1 с ⁻¹	V_{M3}	$0.333 \cdot 10^{-6}$ моль·л ⁻¹ ·с ⁻¹
k_3	$0.003 \cdot 10^9$ моль ⁻¹ ·с ⁻¹ ·л	V_{M5}	$0.08333 \cdot 10^{-6}$ моль·л ⁻¹ ·с ⁻¹
$V_{max,sGC}$	$0.852 \cdot 10^{-6}$ моль·с ⁻¹ ·л ⁻¹	K_2	$0.1 \cdot 10^{-6}$ моль·л ⁻¹
$K_{m,pde}$	$2.0 \cdot 10^{-6}$ моль·л ⁻¹	K_Z	$0.5 \cdot 10^{-6}$ моль·л ⁻¹
k_{pde}	0.0195 с ⁻¹	K_Y	$0.2 \cdot 10^{-6}$ моль·л ⁻¹
k_f	0.01667 с ⁻¹	K_A	$0.2 \cdot 10^{-6}$ моль·л ⁻¹
k	0.1667 с ⁻¹	V_4	$0.333 \cdot 10^{-7}$ моль·с ⁻¹ ·л ⁻¹
m	2	K_d	$0.4 \cdot 10^{-6}$ моль·л ⁻¹
ε	0.001667 с ⁻¹	K_5	$1 \cdot 10^{-6}$ моль·л ⁻¹



Результаты

В ходе работы был проведен ряд вычислительных экспериментов, в процессе которых было исследовано влияние изменения отдельных параметров, описывающих силу воздействия сGMP на режим кальциевых колебаний.

На рис. 1 изображен результат вычислительного эксперимента, в ходе которого ступенчато изменялось значение параметра cG_1 , характеризующего увеличение скорости откачки Ca^{2+} во внеклеточное пространство под влиянием сGMP. Концентрация NO при этом была зафиксирована на уровне 220 нмоль/л. Начальная концентрация сGMP при этом составляла 0 мкмоль/л. Как видно из рис. 1, а, при переключении параметра со значения $cG_1 = 0.0$ на значение $cG_1 = 0.003$ амплитуда колебаний заметно уменьшается, при этом не наблюдается заметного изменения частоты колебаний концентрации кальция. Последующее увеличение параметра до значения $cG_1 = 0.004$ создает такой же эффект, при этом форма колебаний меняется мало. Таким образом, данный путь влияния NO-сGMP относительно мало изменяет среднее значение внутриклеточной концентрации кальция, тогда как ее пиковые значения уменьшаются значительно.

На вставке рис. 1, б приведены зависимости амплитуды и частоты колебаний концентрации внутриклеточного Ca^{2+} от параметра cG_1 . Как можно видеть, в пределах данного интервала значений cG_1 амплитуда колебаний A снижается практически линейно. Частота f растет сначала медленно, а затем при значении параметра $cG_1 > 0.0015$ быстрее. При этом конечное значение частоты на $\approx 30\%$ больше начального, в то время как значение амплитуды уменьшилось в ≈ 4 раза.

На рис. 2, а приведены результаты другого вычислительного эксперимента, в ходе которого ступенчато изменялся параметр cG_2 , характеризующий увеличение скорости активного транспорта сGMP во внутриклеточные хранилища. При изменении параметра с $cG_2 = 0.0$ на $cG_2 = 0.065$ хорошо заметно увеличение амплитуды колебаний концентрации кальция. Однако при увеличении с $cG_2 = 0.065$ до $cG_2 = 0.08$ характер колебаний сильно меняется. Амплитуда возрастает еще больше, а частота сильно падает, вместо регулярных колебаний появляются редкие всплески концентраций кальция, между которыми концентрация Ca^{2+} в цитоплазме мала.

На рис. 2, б представлены зависимости амплитуды и частоты колебаний Ca^{2+} от параметра cG_2 . Как видно частота меняется нелинейно,

вначале снижается, затем медленно растет, и в конце наступает резкий спад частоты, при котором она изменяется в ≈ 15 раз от начального значения. В то же самое время амплитуда меняется плавно и медленно, однако при достижении значения параметра $cG_2 = 0.07$ происходит ее резкое увеличение.

Обсуждение результатов и выводы

В данной работе нами была предложена и протестирована работоспособная математическая модель, описывающая, как изменение концентрации вазорелаксанта, оксида азота NO, приводит к изменению концентрации сGMP и в результате воздействует на параметры динамики внутриклеточной концентрации кальция. В ходе проведенных вычислительных экспериментов были получены зависимости, количественно характеризующие вышеуказанную причинно-следственную цепочку.

Из целого ряда (не менее пяти) известных путей воздействия сGMP на баланс внутриклеточной концентрации кальция нами были выбраны те, которые управляют интенсивностью активного транспорта (откачки) кальция и «работают» на восстановление и поддержание нормально низкой его внутриклеточной концентрации. А именно Ca^{2+} -АТФаза в мембране клетки (параметр модели cG_1) и Ca^{2+} -АТФаза внутренних мембран клетки (sarco/endoplasmic reticulum Ca^{2+} -АТФазе – SERCA) – аналогичный ионный насос, но расположенный в мембране саркоплазматического ретикулума (параметр модели cG_2). Как показывают полученные результаты, оба пути воздействия NO приводят к угнетению кальциевых колебаний (что отражает их вазорелаксирующее действие), однако конкретные проявления этого существенно различны. В то время как рост cG_1 плавно уменьшает амплитуду колебаний, при увеличении cG_2 имеет место скачкообразный переход от одного к другому типу колебаний.

С точки зрения связи наблюдаемых эффектов с сократительной динамикой клетки гладкой мускулатуры описанные выше результаты, могут быть интерпретированы с учетом того, что зависимость степени активации актин-миозиновых комплексов от концентрации кальция носит ступенчатый характер (показатель функции Хилла равен 8–9), а сокращение практически прекращается при $Z < 0.25$ мкмоль/л [13]. В случае воздействия на мембранную АТФазу максимальные значения внутриклеточной концентрации кальция плавно снижаются при сохранении частоты, и при $cG_1 > 0.004$ стимуляция сократительной активности прекратится. При воздействии на

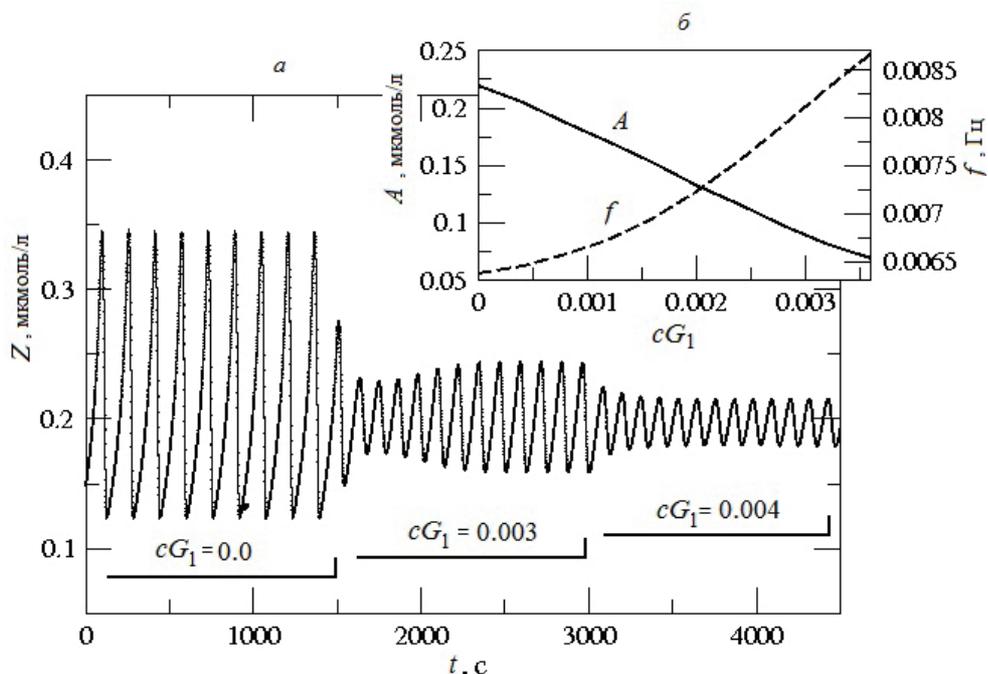


Рис 1. Результат вычислительного эксперимента, имитирующего увеличение активности АТФазы клеточной мембраны: *a* – изменения в колебаниях концентрации кальция (Z) при ступенчатом изменении cG_1 ; *б* – зависимости амплитуды A (сплошная линия) и частоты колебаний f (пунктирная линия) концентрации цитоплазматического Ca^{2+} от параметра cG_1 . По вертикальной оси справа отложены значения частоты, по вертикальной оси слева – амплитуды

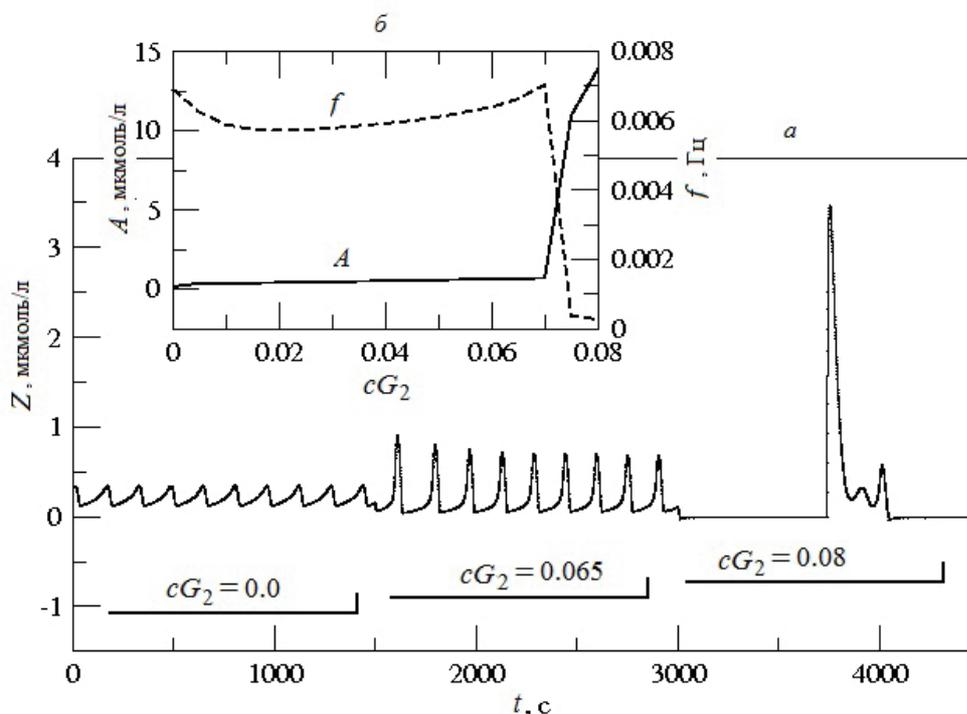


Рис 2. Результаты вычислительного эксперимента, имитирующего увеличение активности АТФазы мембраны саркоплазматического ретикулума: *a* – временные реализации переменной Z при различных значениях параметра cG_2 ; *б* – зависимости амплитуды A (сплошная линия) и частоты колебаний f (пунктирная линия) концентрации цитоплазматического Ca^{2+} от параметра cG_2 . По вертикальной оси справа отложены значения частоты, по вертикальной оси слева – амплитуды



SERCA сократительная активность стимулируется даже в случае редко следующих импульсов (при $cG_2 > 0.07$), так как их амплитуда значительно превышает порог.

Результаты данной работы будут использованы для дальнейшей разработки более полной математической модели, пригодной для моделирования нейрогенных путей активации и расслабления КГМ.

Список литературы

1. Фундаментальная и клиническая физиология / пер с англ. и нем. под ред. А. Камкина, А. Каменского. М.: Академия, 2004. 340 с.; 342 с.
2. Keener J., Sneyd J. Mathematical Physiology. N.Y.: Springer-Verlag, 1998. P. 163.
3. Yang J., Clark J. W., Brayn R. M., Robertson C. S. Mathematical modeling of the nitric oxide/cGMP pathway in the vascular smooth muscle cell // Amer. J. Physiol. Heart Circ. Physiol. 2005. Vol. 289. H886–H897.
4. Carvajal J. A., Germain A. M., Huidobro-Toro J. P., Weiner C. P. Molecular mechanism of cGMP-mediated smooth muscle relaxation // J. Cell Physiol. 2000. Vol. 184. P. 409–420.
5. Lincoln T. M., Dey N., Sellak H. cGMP-dependent protein kinase signaling mechanisms in smooth muscle: from the regulation of tone to gene expression // J. Appl. Physiol. 2001. Vol. 91. P. 1421–1430.
6. Lucas K. A., Pitari G. M., Kazerounian S., Ruiz-Stewart I., Park J., Schulz S., Chepenik K. P., Waldman S. A. Guanylyl cyclases and signaling by cyclic GMP // Pharmacological reviews. 2000. Vol. 52. P. 375–414.
7. Houart G., Dupont G., Goldbeter A. Bursting, Chaos and Birhythmicity Originating from Self-modulation of the Inositol 1,4,5-trisphosphate Signal in a Model for Intracellular Ca^{2+} Oscillations // Bulletin of Mathematical Biology. 1999. № 61. P. 507–530.
8. Dupont G., Goldbeter A. One-pool model for Ca^{2+} oscillations involving Ca^{2+} and inositol 1,4,5-trisphosphate as co-agonist for Ca^{2+} release // Cell Calcium. 1993. № 14. P. 311–322.
9. Takazawa K., Lemos M., Delvaux A., Lejeune C., Dumont J. E., Erneux C. Rat brain inositol 1,4,5-trisphosphate 3-kinase. Ca^{2+} sensitivity, purification and antibody production // Biochemical J. 1990. Vol. 268. P. 213–217.
10. Takazawa K., Passareiro H., Dumont J.E., Erneux C. Purification of bovine brain inositol 1,4,5-trisphosphate 3-kinase. Identification of the enzyme by sodium dodecyl sulphate/polyacrylamide-gel electrophoresis // Biochemical J. 1989. Vol. 261. P. 483–488.
11. Berridge M. J. Inositol trisphosphate and calcium signaling // Nature. 1993. Vol. 361. P. 315–325.
12. Nilsson H., Aalkjar C. Vasomotion: Mechanisms and Physiological Importance // Molecular Interventions. 2003. № 3. P. 79–89.
13. Bursztyjn L., Eytan O., Jaffa A. J., Elad D. Mathematical model of excitation-contraction in a uterine smooth muscle cell // Amer. J. Physiol. Cell. Physiol. 2007. № 292. P. 1816–1829.

УДК 579.23:53.086:615.281

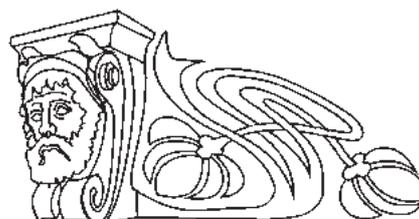
КОМПЛЕКСНЫЙ ПОДХОД К ИЗУЧЕНИЮ БИОПЛЕНОК МИКРООРГАНИЗМОВ МЕТОДОМ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

П. С. Ерохин, О. С. Кузнецов, Н. П. Коннов, Н. А. Видяева, Д. В. Уткин

ФКУЗ Российский научно-исследовательский
противочумный институт «Микроб», Саратов
E-mail: rusrapi@microbe.ru

Проведены исследования биопленок *Staphylococcus aureus* и *Escherichia coli* методом атомно-силовой микроскопии (АСМ). С помощью комплексного подхода на основе полуконтактного режима АСМ показано, что биопленки *S. aureus* и *E. coli* представляют собой организованное сообщество микроорганизмов. Методами рассогласования и отображения фазы изучен внеклеточный матрикс биопленок *S. aureus* и *E. coli*, подтверждены размеры бактерий и биопленок. Полуконтактный метод позволяет выявлять S-слои на поверхности микроорганизмов, контактный – различий в адгезии бактерий.

Ключевые слова: атомно-силовая микроскопия, внеклеточный матрикс, биопленка, микроорганизмы.



A Complex Approach for the Study of Biofilms of Microorganisms by Atomic Force Microscopy

P. S. Erokhin, O. S. Kuznetsov, N. P. Konnov,
N. A. Vidyeva, D. V. Outkin

The biofilms of *Staphylococcus aureus* and *Escherichia coli* have been investigated by atomic force microscopy (AFM). The usage of complex approach of semi-contact AFM mode has shown that the *S. aureus* and *E. coli* biofilms represent an organized community of microorganisms. Semicontact error mode and phase imaging mode investigation of extracellular matrix of *S. aureus* and *E. coli* biofilms,



confirms dimensions of bacteria and biofilms. Semicontact mode let a development S-layer on surface of microorganisms, contact – different in adhesive force of bacteria.

Key words: atomic force microscopy, extracellular matrix, biofilm, microorganisms.

Введение

Одним из основных способов выживания бактерий во внешней окружающей среде является способность к образованию биопленки. Изучение этой способности относится к одной из наиболее интересных областей в биологии и медицине [1–5].

Атомно-силовая микроскопия, физической основой функционирования которой являются короткодействующие силы взаимодействия между исследуемой поверхностью и зондом, является перспективным методом биологических и медицинских исследований, позволяющим изучать особенности структуры поверхности как бактерий, так и их ассоциаций, различных таксономических групп [6].

Современные исследования биопленок с использованием микроскопической техники направлены на выявление внеклеточного матрикса, образуемого сообществом микроорганизмов [6, 7], изучение его физических, биохимических и топографических свойств [8]. Особое внимание уделяется влиянию на них антимикробных препаратов [3, 4].

Целью данной работы явилось комплексное применение трех методов: полуконтактного, рассогласования и отображения фазы полуконтактной АСМ и метода модуляции силы контактного режима сканирования для изучения биопленок грамположительных и грамотрицательных бактерий на примере *E. coli* и *S. aureus*.

1. Материалы и методы

В работе использовались штаммы *E. coli* M-17 и *S. aureus* A-100. При исследовании биопленок на абиотической поверхности, культуры выращивали в LB бульоне на круглом покровном стекле (Merck, Германия) диаметром 18 мм, помещенном в чашки Петри диаметром 4 см, в течение 24 ч при температуре 37 °С. Дополнительно штамм *E. coli* M-17 выращивали в течение 30 мин в питательной среде с добавлением антибиотика «Цефазолин – АКОС» (Синтез, Россия) в концентрации 50 мкг/мл, для создания более выраженных неблагоприятных условий. Фиксация и обеззараживание материала проводились с использованием 2.5 % раствора глутаральдегида с экспозицией 2 часа при температуре 4 °С, по-

сле чего изучаемый объект (приготовленный препарат) тщательно отмывали бидистиллированной водой и высушивали на воздухе при комнатной температуре. Актуальность выбора этого антибиотика связана с его активностью в отношении грамотрицательных бактерий. Он относится к группе цефалоспоринов, механизм действия которых связан с подавлением синтеза пептидогликанов и высвобождением аутолитических ферментов, что приводит к разрушению клеточной стенки микроорганизма и его гибели.

Изучение биопленок проводили в световом микроскопе (CarlZeiss, Германия), а затем в атомно-силовом микроскопе SolverP47-PRO (NT-MDT, Россия) с использованием кремниевых кантилеверов, напыленных золотом NSG01 (NT-MDT, Россия) для полуконтактной АСМ (резонансная частота кантилевера составляла 120 кГц, константа жесткости – 5.5 Н/м). Обработка изображений выполнялась в программе Nova (NT-MDT, Россия), которая дает возможность редактировать полученные данные, а также представлять их в дву- (2D) и трехмерном (3D) формате.

Линейные размеры бактерий измеряли в мкм, шероховатость – в нм. Регистрацию амплитуды колебаний кантилевера для более детальной визуализации ультраструктуры бактерий проводили методом рассогласования. Фазовые изображения формировали в следующем стиле: темные пиксели соответствовали нулевой фазе, светлые пиксели – максимуму фазы. Амплитуду Set Point регистрировали в нА, которая изменялась от минимальных до максимальных величин в зависимости от размера бактерий и условий сканирования.

2. Результаты

Образование биопленки штаммами *E. coli* и *S. aureus* предварительно изучалось на стеклах в световом микроскопе, после чего отбирались те образцы, на которых наблюдалось сформированное «сообщество» микроорганизмов.

Для более детального изучения архитектуры биопленок *S. aureus* и *E. coli* применяли три метода АСМ: полуконтактный, рассогласования и отображения фазы (фазового контраста).

Полуконтактный метод использовали для получения дву- и трехмерных топографических изображений бактерий и определяли линейные размеры клеток (длину, ширину, высоту, шероховатость). Полученные данные представлены в таблице. Бактерии, входящие в состав биопленки, отличались полиморфизмом, у *S. aureus* обнаруживали тяжи.



Характеристики бактерий и биопленок

Параметр	<i>E. coli</i>	<i>S. aureus</i>
Длина, мкм	0.7–1.3	0.7–1.3
Ширина*, мкм	0.81–1.45	0.7–1.3
Высота**, мкм	0.8–1.3	0.7–1.3
Толщина жгутиков, нм	75–80	–
Шероховатость бактерий, нм	26–45	4–8
Толщина матрикса, нм	200–300	60–80
Шероховатость биопленки, нм	251.347	94.4257
Сдвиг фазы бактерия – покровное стекло, °	10–12	40–42
Сдвиг фазы матрикс – бактерия, °	3–4	32–34
Сдвиг фазы покровное стекло – матрикс, °	8–9	8–10
Сила адгезии бактерий, нН	14–21	15–22
Сила адгезии матрикса, нН	15–24	16–25

Примечание. *параметр, определяемый в направлении, параллельном подложке; **параметр, определяемый в направлении, перпендикулярном подложке.

Для определения шероховатости поверхности бактерий также был использован полуконтактный метод. Шероховатость бактериальных клеток характеризует наличие *S*-слоя [9] на поверхно-

сти микроорганизмов (рис. 1, а, 2, а, таблица), функция которого состоит в сохранении формы клеток, защите от агрессивных факторов среды, во взаимодействии с клетками про- и эукариот.

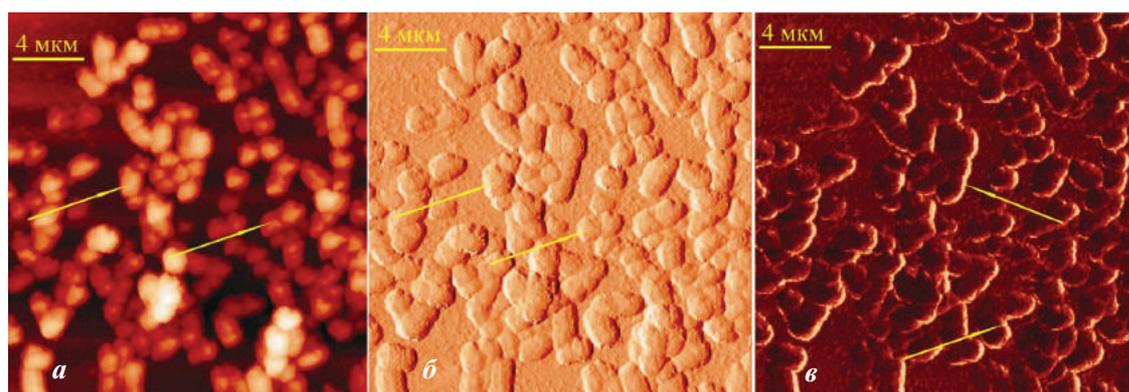


Рис. 1. АСМ изображения клеток *S. aureus*: а – полуконтактный метод; б – метод рассогласования; в – метод отображения фазы. Стрелками обозначено: а, б – бактерии; в – внеклеточный матрикс биопленки *S. aureus*. Размер изображений 20 × 20 мкм

Изучение шероховатости также способствует определению наличия и распределения основного компонента поверхности бактериальной клетки – пептидогликана.

Метод рассогласования. Этот метод, основанный на регистрации амплитуды колебаний кантилевера при сканировании поверхности объекта, применялся для выявления дополнительных особенностей биопленки микроорганизмов. Были выявлены тонкие детали ультраструктуры биопленки, в частности внеклеточный матрикс биопленок *S. aureus* и *E. coli* (рис. 1б, 2б). Установлена его размерность (см. таблицу). Кроме того, метод рассогласования позволил выявить жгутики и пили бактерий

E. coli и определить их размерность (см. таблицу).

Метод отображения фазы. Метод отображения фазы чувствителен к взаимодействию кантилевер – объект, что способствует определению механических, химических, топографических и гетерогенных свойств объекта исследований. Этим методом показана зависимость диссипации энергии (переход кинетической энергии колебаний зонда в энергию электрического тока) колебаний кантилевера от адгезивного взаимодействия между кантилевером и поверхностью объекта исследований, а также определение его локальных вязкоэластичных свойств.

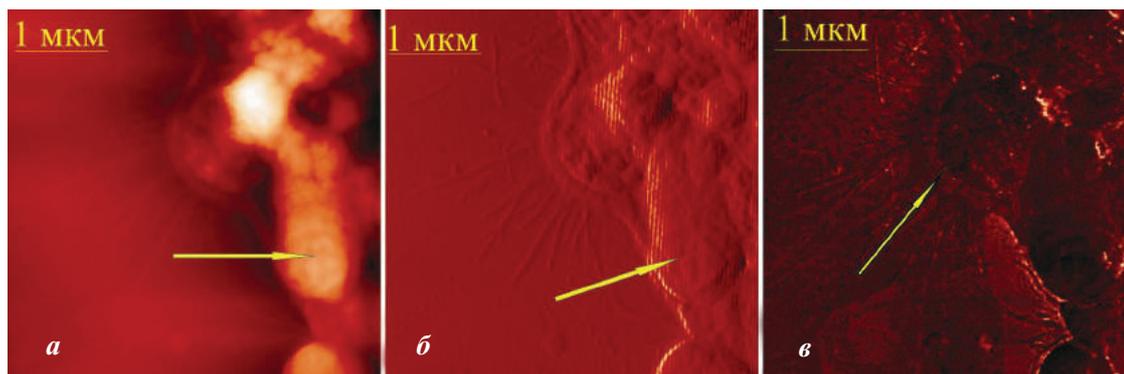


Рис. 2. АСМ изображения клеток *E. coli*: *a* – полуконтактный метод; *б* – метод рассогласования; *в* – метод отображения фазы. Стрелками обозначено: *a*, *б* – бактерии; *в* – внеклеточный матрикс биопленки *E. coli*

При исследовании биопленок методом отображения фазы была проведена регистрация изменения амплитуды и сдвиг фазы колебаний кантилевера (рис. 1, *в*, 2, *в*, 3 *а*, *б*). Фазовые изображения имели в своем составе темные и светлые пиксели. Значения фазовых сдвигов приведены в таблице. Изменения фазы колебаний кантилевера связаны с взаимным расположением клеток микроорганизмов и матрикса (у стафилококка он

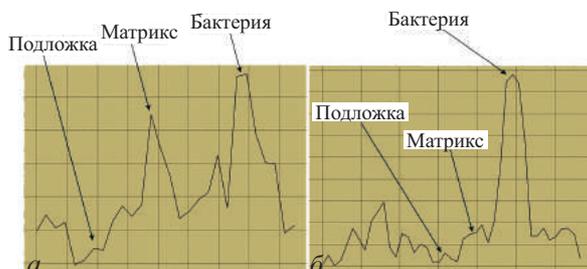


Рис. 3. Профиль фазового сдвига на выбранном участке изображения: *a* – *E. coli*; *б* – *S. aureus*. По оси абсцисс отложена длина в мкм, по оси ординат – градусы

расположен на бактериях, у кишечной палочки – около них), различия в их линейных размерах, жесткости и адгезивности (см. рис. 1, *в*, 2, *в*, таблица). Определение силы адгезии проводили как для бактерий, так и для матрикса **методом модуляции силы**. Соответствующие значения приведены в таблице.

Для повышения визуальной четкости изображения, контрастирования локальной неоднородности, выделения границы объектов, имеющих разную высоту, применяли фильтр HighPass 3x3 программы Nova. При выполнении фильтрации изображения *E. coli* дополнительно были выявлены гранулы диаметром 10–80 нм на поверхности бактерий (рис. 4, *в*). По всей вероятности, они имеют полисахаридную природу.

Для улучшения качества визуализации полученных данных был применен метод совмещения изображений. В качестве примера была выбрана *E. coli*. В результате более четко просматривались субклеточные структуры и внеклеточный матрикс (см. рис. 4, *а*, *б*).

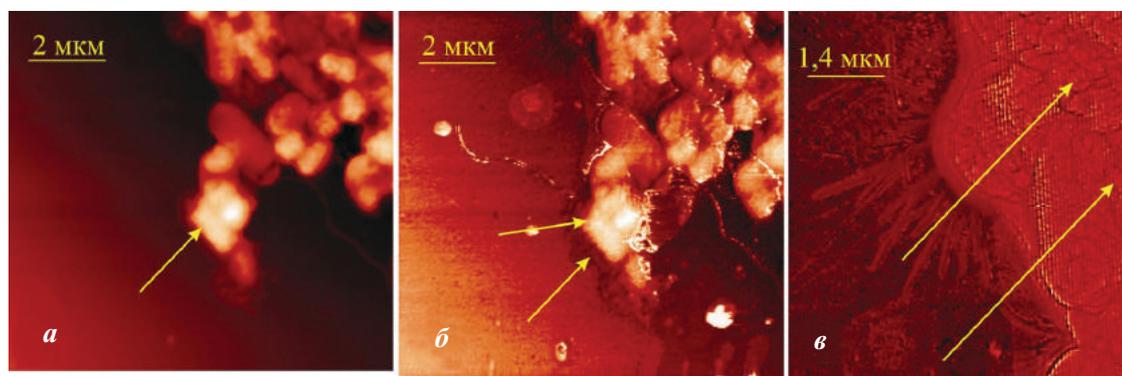


Рис. 4. Совмещение АСМ изображений *E. coli*: *a* – исходное изображение, *б* – после совмещения, *в* – фильтрация изображения. Стрелками отмечено: *a* – бактерии, *б* – бактерии и матрикс, *в* – гранулы



Заключение

Таким образом, используя комплексный подход, включающий три метода полуконтактного режима (полуконтактный, рассогласования, отображения фазы) и метод модуляции силы контактной АСМ с этапом наложения изображения, на примере *E. coli* и *S. aureus* проведен субморфологический анализ микроорганизмов и образуемой ими биопленки. Используя инструменты программы, мы определили размеры бактерий и внеклеточного матрикса. Полученные размеры бактерий сопоставимы с данными, приведенными в определителе бактерий Берджи [10]. Изменением фазы колебаний кантилевера и методом модуляции силы определили локальную вязкоупругость и адгезивные свойства подложки, бактерий, биопленки.

Список литературы

1. Коннов Н. П., Попов Н. В., Величко Л. Н., Князева Т. В. Феномен образования биопленок *Yersinia pestis* в организме блох // Паразитология. 2009. Т. 43, № 4. С. 330–337.
2. Juda M., Paprota K., Jaloza D., Malm A., Rybojad P., Gozdzik K. EDTA as a potential agent preventing formation of *Staphylococcus epidermidis* biofilm on polychloride vinyl biomaterials // Ann. Agric. Environ. Med. 2008. Vol. 15. P. 237–241.
3. Lynch S. V., Mukundakrishnan K., Benoit M. R., Ayyaswamy P. S., Matin A. *Escherichia coli* biofilms formed under low-shear modeled microgravity in a ground-based system // Appl. and Environ. Microbiol. 2006. Vol. 72, № 12. P. 7701–7710.
4. Oh Y. J., Jo W., Yang Y., Park S. Influence of culture conditions on *Escherichia coli* O157:H7 biofilm formation by atomic force microscopy // Ultramicrosc. 2007. Vol. 101. P. 869–874.
5. Hammer M. U., Brauser A., Olak C., Brezesinski G., Goldmann T., Gutschmann T., Andra J. Lipopolysaccharide interaction is decisive for the activity on the antimicrobial peptide NK-2 against *Escherichia coli* and *Proteus mirabilis* // Biochem. J. 2010. Vol. 427. P. 477–488.
6. Pham D. K., Ivanova E. P., Wright J. P., Nicolau D. V. AFM analysis of the extracellular polymeric substances (EPS) released during bacterial attachment on polymeric surfaces // Proc. SPIE. 2003. Vol. 4962. P. 151–159.
7. Raspanti M., Congiu T., Guizzardi S. Tapping mode atomic force microscopy in fluid of hydrated extracellular matrix // Matrix Biol. 2001. Vol. 20, № 8. P. 601–604.
8. Volle C. B., Ferguson M. A., Aidala K. E., Spain E. M., Nunez M. E. Spring constants and adhesive properties of native bacterial biofilm cells measured by atomic force microscopy // Coll. Surf. B Biointerfaces. 2008. Vol. 67, № 1. P. 32–40.
9. Ерошенко Г. А., Коннов Н. П., Кутырев В. В., Видяева Н. А., Шавина Н. Ю., Одинокоев Г. Н., Кузнецов О. С. Изучение способности к образованию биопленок у штаммов *Yersinia pestis* основного и неосновных подвидов // Журн. микробиол., эпидем. и иммунобиол. 2009. Т. 5. С. 13–19.
10. Определитель бактерий Берджи : в 2 т. / пер. с англ. ; под ред. Дж. Хоулта, Н. Крига, П. Снита, Дж. Стейли и С. Уилльямса. М. : Мир, 1997.

УДК 621.371 (075.8)

ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ И ПЛОТНОСТИ ЭНЕРГИИ И ИМПУЛЬСА ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ В ДИСПЕРГИРУЮЩЕЙ СРЕДЕ

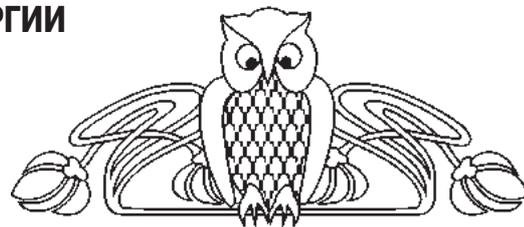
М. В. Давидович

Саратовский государственный университет
E-mail: DavidovichMV@info.sgu.ru

В работе анализируются некоторые противоречия современной электродинамики сплошных сред, а именно вид плотностей энергии и импульса поля и системы поле–вещество, тензора энергии-импульса и представление скоростей переноса энергии и импульса. На основе нестационарного подхода получены балансные уравнения для плотностей энергии и импульса системы поле–вещество с зависимостью от предыстории процесса соз-

дания поля, а также в нестационарном случае определены скорости их переноса. Найдены плотности энергии и импульса монохроматического поля. Показано выполнение для них локальных и глобальных законов сохранения.

Ключевые слова: Абрагама–Минковского контрroversия, тензор энергии-импульса, плотность энергии, скорость переноса энергии, фазовая скорость, групповая скорость.





The Conservation Laws and the Densities of Electromagnetic Field Energy and Momentum in Dispersive Media

M. V. Davidovich

New general nonstationary balance equations for energy and momentum densities of field–matter system based on rigorous nonstationary approach for their definitions with dependence from the field creation prehistory have been obtained. Also the transport velocities of these densities have been derived. The concrete examination and detailed consideration have been performed for simplest dispersion law which is defined by the conductivity connected with the dissipation. For this case the energy and momentum densities, phase velocity, group velocity, and

transport velocities of energy and momentum have been determined. The energy and momentum conservation have been shown for plane electromagnetic wave in the conducting medium and for plane wave diffraction on the conducting plate.

Key words: Abraham–Minkowski controversy, energy-momentum tensor, energy density, energy transport velocity, phase velocity, group velocity.

Введение

В монографиях, учебниках, а также в большинстве работ, касающихся затронутых в данной статье вопросов, плотность электромагнитной энергии системы поле–вещество (СПВ) определяется (в системе СИ) так:

$$u(\vec{r}, t) = u_e(\vec{r}, t) + u_m(\vec{r}, t) = \{ \vec{E}(\vec{r}, t) \cdot \vec{D}(\vec{r}, t) + \vec{H}(\vec{r}, t) \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) \} / 2, \quad (1)$$

т.е. как в статике (см., например, [1, с. 422; 2, с. 255; 3, с. 608; 4, с. 61; 5, с. 124; 6, с. 25; 7, с. 50–53; 8, с. 216; 9, с. 10; 10, с. 53, 189; 11, с. 10]). Этот список легко можно продолжить и сделать весьма внушительным (например, [12–22]). Далее часто слово «плотность» будем опускать. Выражение (1), правильное в вакууме и в статике, пошло от Максвелла (1873) и Пойтинга (1884), когда дисперсия не рассматривалась. В ряде работ (например, [7, 23]) входящие в (1) электрическая и магнитная плотности определяются интегралами типа

$$u_e(\vec{r}, t) = \int \vec{E}(\vec{r}, t) \cdot \vec{D}(\vec{r}, t) dt = \int \vec{E}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{D}(\vec{r}, t), \quad (2)$$

что верно, но смысл подобных соотношений обычно не раскрывается, а часто утверждается, что из соотношений типа (2) следует (1) [7]. Другой используемый подход – это определение плотности работы (энергии) w , затраченной источниками на создание поля, соответствующими дифференциальными соотношениями [10, 23–26], из которых также не ясна в общем случае ее зависимость от времени. Вместо интегрирования соответствующих дифференциальных уравнений обычно рассматривают монохроматические и квазимонохроматические процессы [11, 21, 23–26], определяя $w(\vec{r}, t)$ для них методом Фурье. В обширном ряде работ (например, [24, 26]) приводится результат Бриллюэна (1921):

$$\langle u(\vec{r}, t) \rangle = \frac{1}{2} \left[\epsilon_0 \frac{d(\omega \epsilon(\omega, \vec{r}))}{d\omega} \langle \vec{E}^2(\vec{r}, t) \rangle + \mu_0 \frac{d(\omega \mu(\omega, \vec{r}))}{d\omega} \langle \vec{H}^2(\vec{r}, t) \rangle \right]. \quad (3)$$

Он получен для монохроматических и квазимонохроматических полей при пренебрежении по-

терями путем введения комплексных амплитуд, разложением спектрального интеграла от них по малому параметру при удержании одного члена и усреднением за период (далее обозначаемый скобками $\langle \rangle$) [26], т.е. точно так, как вводится первое приближение теории дисперсии (ППТД) и групповая скорость (ГС). Собственно (3) есть соотношение приближенное и подгоняющее ГС под скорость энергии (СЭ). Средние значения монохроматических полей в (3) не зависят от времени. Для квазимонохроматических полей подразумевается, что ω – некая центральная частота в спектре. Ее, однако, однозначно определить нельзя. При этом левая часть соотношения (3) становится функцией времени и указанной частоты, что говорит не в его пользу. Недостатки этого подхода следующие. Вводятся комплексные спектральные амплитуды в пренебрежении членами $\vec{E} \partial_t \vec{D}$ и $\vec{E}^* \partial_t \vec{D}^*$ [26, с. 381], что строго верно только для монохроматических сигналов (для нестационарных процессов следует использовать аналитические сигналы [27]). Разложение спектрального интеграла (как и интеграла в приближении теории дисперсии) асимптотическое, т.е. приближенное и, вообще говоря, нерасходящееся. Для увеличения точности и оценки погрешности необходимо вводить следующие члены [27]. Для сходимости спектр должен быть финитным и не выходить за круг сходимости ряда Тейлора [27]. Однако даже квазигармоническое поле имеет инфинитный спектр, хотя его основная часть и сосредоточена в узкой полосе. Соотношение (3) (как и ГС) ничего не определяет при потерях. Но дисперсия означает потери [26]. Полное отсутствие потерь в конечной полосе приводит к отсутствию дисперсии. Действительно, дисперсия обусловлена рядом резонансных частот вещества, дисперсионные кривые для которых суммируются



(накладываются), при этом квантовое и классическое рассмотрение дают одинаковые результаты [28]. Отсутствие потерь в полосе означает раздвижение соседних частот на бесконечность, т.е. отсутствие дисперсии. Это единственный случай, когда ППТД есть соотношение точное. Тогда для скоростей в монохроматической волне имеем $v_e(\omega) = v_p(\omega) = v_g(\omega)$, где введены СЭ, фазовая скорость (ФС) и ГС. Формула (3) заведомо неверна при быстро изменяющихся полях (широком спектре), сильной дисперсии и потерях. Трудности определения плотности энергии в диспергирующих средах отмечены в ряде работ (например, [11, с. 28], [28, с. 226]). Это, в частности, связано с невозможностью однозначного в общем случае ее введения в монохроматическом поле [11, 26]. Довольно редко указывается, что при определении u необходимо учитывать кинетическую энергию частиц вещества [28–32]. Например, в [29] для плазмы вводится формула с использованием вектора поляризации

$$u(\vec{r}, t) = \left\{ \epsilon_0 \vec{E}(\vec{r}, t) + \mu_0 \vec{H}(\vec{r}, t) \right\} / 2 + \partial_t \vec{P}^e(\vec{r}, t) / (2\epsilon_0 \omega_p^2).$$

Часто используется лагранжев формализм в пренебрежении потерями и с абсолютизацией групповой скорости как скорости энергии [29–31]. Между тем знание $u(\vec{r}, t)$ необходимо для определения скорости переноса электромагнитной части энергии СПВ $\vec{v}_e(\vec{r}, t) = \vec{S} / u(\vec{r}, t)$ согласно концепции Н. А. Умова [33], где $\vec{S}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}, t) \times \vec{H}(\vec{r}, t)$ есть вектор Пойнтинга. При учете пространственной дисперсии также рассматриваются монохроматические процессы, при этом используется Фурье-разложение по волновому вектору \vec{k} [24, 26, 34–36], магнитное поле из рассмотрения исключается, соотношение (1) считается верным при $\mu = 1$, а вектор Пойнтинга приобретает добавку, связанную с градиентом по \vec{k} . Эти результаты также неприменимы к нестационарным диссипативным процессам, требуют усреднения за период и явно зависят от ω и \vec{k} . Тем не менее, \vec{S} в (24) модифицируется введением низкочастотного соотношения $\vec{\epsilon}(\vec{k}, \omega) = \hat{I} - j(\epsilon_0 \omega)^{-1} \hat{\sigma}(\vec{k}, \omega)$.

В определении плотности электромагнитного импульса (линейного момента) поля в электродинамике сплошных сред также нет однозначности. Вот уже более ста лет сохраняется парадоксальное состояние, известное как Абрагама–Минковского контroversия, когда нет определенности в отношении правильного выбора тензора энергии-импульса (ТЭИ) для СПВ и соответствующих плотностей [37–56]. Для плотности импульса

имеется два основных определения: Минковского [37] $\vec{g}^M = \vec{D}(\vec{r}, t) \times \vec{B}(\vec{r}, t) = n^2 \vec{S}(\vec{r}, t) / c^2 = n^2 \vec{g}^A$ и Абрагама [38] $\vec{g}^A = \vec{S} / c^2$. Здесь $n = \sqrt{\epsilon \mu}$ – показатель преломления (индекс рефракции или коэффициент замедления). Имеется много публикаций как за определение Минковского, например, [49], и против определения Абрагама, так и наоборот – за Абрагама и против Минковского (см., например, публикации [39–42], последние обзоры [47, 48], работу [49] и литературу в них). Кроме этого имеются работы, утверждающие или считающие, что указанные два определения эквивалентны (например, [39, 48]), но все-таки тензор Абрагама более предпочтительный или правильный. Тем не менее, тензором Минковского тоже можно пользоваться, он часто более удобен и более соответствует сплошной среде [39]. В других публикациях тензор Минковского считается более верным. Есть ряд публикаций об экспериментальных подтверждениях и опровержениях как первого, так и второго из определений [48]. В частности, есть публикации по измерению силы Абрагама \vec{f}^A – величины, являющейся дивергенцией к производной по времени от плотности импульса по Абрагаму $\partial_t \vec{g}^A$, в результате которого получается производная $\partial_t \vec{g}^M$ для плотности импульса по Минковскому [39]. Заметим, что сила Абрагама не эквивалентна сумме сил Лоренца, действующих на электрический и магнитный токи поляризации вещества [41], а ее измерение произведено для сверхнизких частот (0.4 Гц) электрического поля и в постоянном магнитном поле [57, 58], т.е. не для динамического электромагнитного поля (ЭП) при отсутствии дисперсии и с невысокой точностью. Более того, фактически измерена сила Лоренца, действующая на электрический ток поляризации диска из титаната бария ($\epsilon = 3620$, $\mu = 1$). При $\mu = 1$ она совпадает с силой Абрагама. Для магнитодиэлектрика в динамическом ЭП сумма сил Лоренца для обоих токов поляризации не совпадает с силой Абрагама. Поэтому экспериментально следовало бы подтвердить либо первый, либо второй результат в динамическом поле. В большинстве теоретических работ рассмотрен именно случай $\mu = 1$. Упомянутая неоднозначность породила также ряд попыток определить и вывести ТЭИ и плотности по-другому, например, с использованием микроскопической электродинамики [43, 44], уравнений движения вещества [28, 32], с использованием теоремы Нётер [49], с использованием электродинамики движущихся



сред [56]. Считается, что однозначно можно определить только ТЭИ системы поле–вещество, а по отдельности указанные величины определяются неоднозначно. Между тем неоднозначность в определении плотности импульса поля ведет к неопределенности скорости его переноса $\vec{v}_i^{(EM)}$, скорости движения вещества $\vec{v}^{(M)}$ и полной скорости переноса импульса поле–вещество \vec{v}_i . Также из нее следует неоднозначность силы давления ЭП на вещество.

Таким образом, в электродинамике сплошных сред имеются противоречия в определении плотностей энергии и импульса, а соответственно и ТЭИ. Так, соотношение (1) даже при весьма низких частотах не верно для плазмы и проводящих сред. Это же утверждение относится и к соотношению (3) для столкновительной плазмы. Указанное состояние связано, на наш взгляд, с тем, что все упомянутые работы (в частности, по ТЭИ) используют материальные соотношения $\vec{D}(\vec{r}, t) = \epsilon_0 \hat{\epsilon}(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r}, t)$, $\vec{B}(\vec{r}, t) = \mu_0 \hat{\mu}(\vec{r}) \vec{H}(\vec{r}, t)$, а чаще всего просто со скалярными константами ϵ и μ . Подход, приводящий к соотношениям типа (3), не учитывает потери и соответственно дисперсию. Он неприменим к произвольной зависимости от времени и к процессам с широким спектром. В данной работе предложены зависимости от предыстории процесса создания поля строгие нестационарные значения рассмотренных плотностей, следующие из нестационарных балансных уравнений. Приведены выражения для скорости переноса энергии и импульса системы

поле–вещество, а также для скорости переноса импульса поля и вещества. Результаты обобщают ранее опубликованные работы автора [32, 59–62].

2. Балансные уравнения для энергии и импульса

Балансные уравнения для энергии и импульса получены в работах [32, 59–62]. Задача о соответствующих плотностях усложняется тем, что поле, воздействуя на среду (тело), передает частицам энергию, импульс и момент импульса. Происходит разогрев и ускорение среды, т.е. нестационарный во времени процесс становится неравновесным: разогретое вещество излучает во всем спектре, а задача требует решения кинетического уравнения и привлечения методов электродинамики движущихся (в общем случае ускоренно) сред. Релятивистски-ковариантные формы таких уравнений весьма сложны даже без учета дисперсии (см., например, [63]). В последнее время изучаются искусственные метаматериалы, в том числе и левые (действительные части спектральных тензоров $\hat{\epsilon}$ и $\hat{\mu}$ которых могут быть отрицательными). Эти метаматериалы в общем случае суть бианизотропные среды (БС) [64] с сильной пространственной дисперсией. Обычно материальные уравнения рассматриваются в форме Ландау–Лифшица [26, 65] с описанием поляризации на основе вектора \vec{D} . Используется и форма Казимира [65]. Исходя из усредненных по малому объему (ячейке периодичности) спектральных материальных уравнений [64], пишем:

$$\vec{D}(\vec{r}, \vec{k}, \omega) = \epsilon_0 \epsilon(\vec{r}, \vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{r}, \vec{k}, \omega) + c^{-1} \hat{\xi}(\vec{r}, \vec{k}, \omega) \vec{H}(\vec{r}, \vec{k}, \omega), \quad (4)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, \vec{k}, \omega) = \mu_0 \hat{\mu}(\vec{r}, \vec{k}, \omega) \vec{H}(\vec{r}, \vec{k}, \omega) + c^{-1} \hat{\zeta}(\vec{r}, \vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{r}, \vec{k}, \omega), \quad (5)$$

$$\vec{D}(\vec{r}, t) = \epsilon_0 \int_{-\infty}^t \int_V \hat{\epsilon}(\vec{r}, \vec{r}', t-t') \vec{E}(\vec{r}', t') d^3 r' dt' + c^{-1} \int_{-\infty}^t \int_V \hat{\xi}(\vec{r}, \vec{r}', t-t') \vec{H}(\vec{r}', t') d^3 r' dt', \quad (6)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \mu_0 \int_{-\infty}^t \int_V \hat{\mu}(\vec{r}, \vec{r}', t-t') \vec{H}(\vec{r}', t') d^3 r' dt' + c^{-1} \int_{-\infty}^t \int_V \hat{\zeta}(\vec{r}, \vec{r}', t-t') \vec{E}(\vec{r}', t') d^3 r' dt'. \quad (7)$$

Уравнения (6)–(7) суть нестационарные обобщения условий Ландау–Лифшица и Казимира для бианизотропии. Тензорные ядра здесь зависят от разности $t-t'$. В этих соотношениях объем интегрирования $V = V(\vec{r}, \vec{r}', t, t')$ в силу принципа причинности определяется из условия $|\vec{r} - \vec{r}'| < c(t-t')$, при этом $\hat{\epsilon}(\vec{r}, \vec{r}', t-t') = 0$,

$\hat{\mu}(\vec{r}, \vec{r}', t-t') = 0$ при $t' > t$. Соотношениям (6), (7) соответствует введение векторов электрической и магнитной поляризации $\vec{P}^{(e,m)}(\vec{r}, t)$ в эквивалентных (6), (7) формах:

$$\begin{aligned} \vec{D}(\vec{r}, t) &= \epsilon_0 \vec{E}(\vec{r}, t) + \vec{P}^e(\vec{r}, t), \\ \vec{B}(\vec{r}, t) &= \epsilon_0 \vec{H}(\vec{r}, t) + \vec{P}^m(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (8)$$



$$\vec{P}^e(\vec{r}, \vec{k}, \omega) = \varepsilon_0 [\hat{\varepsilon}(\vec{r}, \vec{k}, \omega) - \hat{I}] \vec{E}(\vec{r}, \vec{k}, \omega) + c^{-1} \hat{\xi}(\vec{r}, \vec{k}, \omega) \vec{H}(\vec{r}, \vec{k}, \omega), \quad (9)$$

$$\vec{P}^m(\vec{r}, \vec{k}, \omega) = \mu_0 [\hat{\mu}(\vec{r}, \vec{k}, \omega) - \hat{I}] \vec{H}(\vec{r}, \vec{k}, \omega) + c^{-1} \hat{\zeta}(\vec{r}, \vec{k}, \omega) \vec{E}(\vec{r}, \vec{k}, \omega). \quad (10)$$

Используя приближение слабого поля для неподвижной среды в постановке задачи [59–61],

имеем балансное уравнение (закон сохранения энергии)

$$\nabla \cdot \vec{S}(\vec{r}, t) + [\vec{E}(\vec{r}, t) \partial_t \vec{D}(\vec{r}, t) + \vec{H}(\vec{r}, t) \partial_t \vec{B}(\vec{r}, t)] = -[\vec{E}(\vec{r}, t) \vec{J}^e(\vec{r}, t) + \vec{H}(\vec{r}, t) \vec{J}^m(\vec{r}, t)]. \quad (11)$$

Чтобы подсчитать затраченную на создание поля работу источников, указанную величину надо проинтегрировать:

$$w(\vec{r}, t) = \partial_t^{-1} [\vec{E}(\vec{r}, t) \partial_t \vec{D}(\vec{r}, t) + \vec{H}(\vec{r}, t) \partial_t \vec{B}(\vec{r}, t)]. \quad (12)$$

Именно эту величину

$$(а не [\vec{E}(\vec{r}, t) \vec{D}(\vec{r}, t) + \vec{H}(\vec{r}, t) \vec{B}(\vec{r}, t)]/2)$$

следует ассоциировать с $w(\vec{r}, t)$ [32]. Работа (12), затраченная на поле и вещество, зависит от всей предыстории процесса, что для электродинамики сплошных сред естественно, тогда как для поля в вакууме этого не требуется [66]. Решая (11) совместно с (6), (7), определим все поля во временном промежутке $(0, t)$. Это позволяет вычислить плотность диссипированной энергии $q(\vec{r}, t)$ (выделенное тепло единицы объема). Теперь СЭ есть $\vec{v}_e(\vec{r}, t) = \vec{S}(\vec{r}, t)/u(\vec{r}, t)$. Она определена в каждой точке для каждого момента времени. Следует за-

метить, что \vec{S} есть плотность потока мощности поля, поскольку в силу предположения средняя скорость переноса вещества равна нулю. В [59–61] показано, что запись уравнений Максвелла через поля и токи поляризации $\vec{J}_p^e(\vec{r}, t) = \partial_t \vec{P}^e(\vec{r}, t)$, $\vec{J}_p^m(\vec{r}, t) = \partial_t \vec{P}^m(\vec{r}, t)$ не позволяет разделить баланс мощности и получить плотности энергии для поля и вещества по отдельности. Это следствие того, что из $\vec{E}(\vec{r}, t) \vec{J}_p^e(\vec{r}, t) + \vec{H}(\vec{r}, t) \vec{J}_p^m(\vec{r}, t)$ нельзя однозначно, без решения уравнений движения, выделить плотность энергии вещества w_M (с учетом диссипации) и плотность потока его мощности \vec{S}_M . Согласно теореме Гельмгольца векторное поле \vec{S}_M представимо в виде суммы его потенциальной и соленоидальной частей:

$$\vec{S}_M(\vec{r}, t) = \nabla \Phi(\vec{r}, t) + \nabla \times \vec{C}(\vec{r}, t). \quad (13)$$

Отсюда имеем (в пренебрежении энергией взаимодействия):

$$\nabla^2 \Phi(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}, t) \vec{J}_p^e(\vec{r}, t) + \vec{H}(\vec{r}, t) \vec{J}_p^m(\vec{r}, t) - \partial_t w_M(\vec{r}, t) = 0. \quad (14)$$

Эта величина плотности потока мощности определена с точностью до ротора вектора $\vec{C}(\vec{r}, t)$. Указанный ротор поток через замкнутую поверхность не создает. Однако в общем случае $\vec{C}(\vec{r}, t) \neq 0$. Более того, может быть $\vec{C}(\vec{r}, 0) \neq 0$, т.е. в момент возникновения поля в веществе могут циркулировать соленоидальные потоки (вихри).

Следовательно, вектор (13) определен неоднозначно. Для того чтобы решить уравнение (14), необходимо предположить, что вещество находится в некотором ограниченном объеме (что в нестационарном случае является требованием естественным).

Рассмотрим теперь баланс импульса [60]:

$$\begin{aligned} & [\vec{B}(\vec{r}, t) \times \nabla \times \vec{H}(\vec{r}, t) + \vec{D}(\vec{r}, t) \times \nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t)] + \partial_t (\vec{D}(\vec{r}, t) \times \vec{B}(\vec{r}, t)) = \\ & = -[\vec{J}^e(\vec{r}, t) \times \vec{B}(\vec{r}, t) + \vec{D}(\vec{r}, t) \times \vec{J}^m(\vec{r}, t)] = -\vec{f}^L(\vec{r}, t). \end{aligned} \quad (15)$$

В правой части (15) стоит с обратным знаком сила Лоренца $\vec{f}^L(\vec{r}, t)$. Это сила, затрачиваемая сторонними источниками на создание импульса поля и вещества. Второй член слева есть производная плотности импульса поле-вещество по времени. Сама плотность импульса с точностью до постоянного вектора $\vec{g}_0^M(\vec{r})$ есть $\vec{g}^M(\vec{r}, t) = \vec{D}(\vec{r}, t) \times \vec{B}(\vec{r}, t)$, т.е. ее следует взять в форме Минковского. Первый член в (15) представим в виде

$$\nabla \cdot \hat{\Sigma}(\vec{r}, t) = \partial_\nu \hat{\Sigma}_\nu^i(\vec{r}, t) = [\vec{B}(\vec{r}, t) \times \nabla \times \vec{H}(\vec{r}, t) + \vec{D}(\vec{r}, t) \times \nabla \times \vec{E}(\vec{r}, t)]. \quad (16)$$

Здесь $\nu = x, y, z$. Величина $\hat{\Sigma}(\vec{r}, t)$ есть тензор второго ранга в трехмерном пространстве. Поэтому дивергенция от него (свертка по одному индексу) есть стоящий в правой части (16)

вектор. Указанный тензор также определен с точностью до произвольного тензора, для которого $\nabla \cdot \hat{\Sigma}_0(\vec{r}, t) = 0$. Поскольку при $t = t_0 = 0$ поле отсутствовало, следует наложить началь-



ные условия $\vec{g}_0^M(\vec{r}) = 0$, $\hat{\Sigma}_0(\vec{r}, 0) = 0$. При указанных условиях в любой момент времени $\vec{g}^M(\vec{r}, t)$ и $\hat{\Sigma}(\vec{r}, t)$ определяются однозначно через решения задачи возбуждения, т.е. через поля $\vec{E}(\vec{r}, t)$ и $\vec{H}(\vec{r}, t)$ во все предыдущие моменты, при этом для определения $\vec{g}^M(\vec{r}, t)$ следует вычислить интегралы (1), а для определения $\hat{\Sigma}(\vec{r}, t)$ необходимо еще решить дифференциальное уравнение (16). Таким образом, имеем уравнение баланса:

$$\partial_\nu \hat{\Sigma}_\nu^v(\vec{r}, t) + \partial_t g_{\nu'}^M = -f_{\nu'}^L = -\partial_t \partial_t^{-1} f_{\nu'}^L, \quad (17)$$

$$\nu' = x, y, z.$$

Здесь первый член есть поток компоненты ν' полного импульса. Из этого уравнения следует, что скорость переноса компоненты ν' импульса системы поле–вещество есть [19]

$$v_{i\nu'} = \partial_\nu \hat{\Sigma}_\nu^v(\vec{r}, t) / g_{\nu'}^M, \quad (18)$$

а $g_{\nu'}^M$ – полная созданная плотность импульса поля и вещества. В [59–62] показано сохранение импульса СПВ в любом объеме, рассмотрен импульс, переданный веществу, плотность потока вещества и его скорость, а также скорость переноса импульса поля, вещества и СПВ. Рассмотрен ряд конкретных законов дисперсии (в столкновительной плазме, закон Дебая, дисперсия в проводящей среде). Рассмотрены вопросы распространения плоской монохроматической волны в указанных средах, а также дифракция такой волны на проводящей пластине. Получены конкретные выражения для плотностей энергии и импульса такой волны, определены скорости их переноса. В частности, показано, что для двух последних законов дисперсии СЭ и скорости переноса импульса совпадают с ФС. Показана необходимость учета затухания Ландау при рассмотрении соответствующих величин в плазме. Следуя работе [1], нетрудно получить давление плоской монохроматической волны на проводящую пластину с конечной и бесконечной толщиной (полуплоскость), если платина расположена в однородной недиспергирующей среде с проницаемостями ϵ , μ . При этом оказывается, что для обеспечения закона сохранения импульса плотность импульса в такой среде должна быть определена по Минковскому $\vec{g}^M(\vec{r}, t) = \epsilon\mu\vec{E}(\vec{r}, t) \times \vec{H}(\vec{r}, t) / c^2$, а скорость его переноса совпадать с фазовой. При этом в проводящей пластине скорость переноса импульса равна половине фазовой скорости (с учетом влияния на нее проводимости), поскольку часть импульса поля передается веществу, которое в нашем приближении неподвижно. Рассмотрена также дифракция на прозрачной пластине [61] в связи с мысленным экспериментом, изложенным

в [40]. Показано, что в этом случае определенный по Минковскому импульс сохраняется, а определенный по Абрагаму – нет. Рассмотрен также пример из работы [67], связанный с «переносом массы полем» и показаны неточности, имеющиеся в [40] и [67].

Заключение.

О введении ТЭИ в диспергирующей среде

Вопрос о форме ТЭИ в электродинамике сплошных сред и о соответствующих плотностях до сих пор остается дискуссионным (см. дополнительно [49–56]). В одной из последних работ утверждается [56], что он окончательно решен в пользу Абрагама. В ней применена электродинамика движущихся сред, дисперсия не учитывается, но введен ряд дополнительных предположений. В различных модельных примерах как за определенную форму ТЭИ, так и против нее часто содержатся неточности, разбирать которые в данной работе нет возможности (см. [50]). Основное возражение против ТЭИ Минковского состоит в том, что он несимметричен и для него якобы не выполняется закон сохранения импульса [40]. В обеих формах ТЭИ компонента T_{00} определена как в статике, а именно в виде $T_{00} = u = (\epsilon_0 \vec{E}^2 + \mu_0 \vec{H}^2) / 2$, тогда как в динамике имеется взаимодействие поля с веществом, т.е. следует использовать выражения типа (6). Не понятно, почему плотность энергии в среде должна зависеть от параметров среды, а плотность импульса \vec{g}^A – нет, и быть такой же, как в вакууме. Ясно, что взаимодействие между полем и веществом может приводить к асимметрии ТЭИ поля и вещества. При этом следует учитывать поток импульса вещества. Плотность импульса зависит от временного процесса и определяется его предысторией. О конкретной форме ТЭИ для СПВ в виде алгебраических соотношений, по-видимому, можно говорить только для гармонических процессов в средах с определенными законами дисперсии, когда эти гармонические процессы получены как предельный переход от квазимонохроматических процессов создания поля, при котором усредненные за период компоненты T выходят на стационарный уровень. Полный ТЭИ системы поле–вещество при произвольной дисперсии (временной и пространственной) пока не построен, и вопрос о требовании для него симметричности открыт. Если же тензоры поля и вещества симметричны по отдельности, это означает отсутствие взаимодействия между веществом и полем в смысле обмена энергией и импульсом. Требование симметричности обычно возникает из требования однозначности определе-



ния ТЭИ и условия, что тензор момента следует определять через ТЭИ по стандартным формулам, при этом используется связь компонент импульса с компонентами ТЭИ такая, как для поля в вакууме [68, с. 107]. Очевидно, такой ТЭИ есть тензор поля в вакууме, совпадающий с тензором Абрагама. В случае нестационарного возбуждения в среде ТЭИ определяется однозначно, и дополнительного условия не требуется. Тензор же момента импульса системы поле–вещество следует определять отдельно с учетом того, обладало или нет вещество моментом импульса до создания поля, а также момент импульса и импульс, передаваемые сторонним источникам, поскольку замкнутой системой является только СПВ плюс источники поля. В последнее время встает вопрос о ТЭИ и о соответствующих плотностях (и скоростях) в искусственных средах с пространственной дисперсией, включая и бианизотропные левые среды (см., например, подобную неудачную попытку в [67]), модели которых весьма сложны. При этом нельзя вводить показатель преломления.

В заключение заметим, что ТЭИ есть необязательная конструкция [41]. Существенна сила воздействия поля на вещество (сила Лоренца), определяемая токами поляризации, давление ЭП на среду и баланс импульса и энергии в заданном объеме. Свободное ЭП в вакууме удовлетворяет волновому уравнению, инвариантному относительно преобразования Лоренца, и для него удобно ввести ТЭИ в форме Абрагама. Для диспергирующей среды с учетом (6) и (7) уже ввести одно волновое уравнение нельзя, имеем систему связанных уравнений, вид которых слабо соответствует волновому уравнению в вакууме, а указанной инвариантности нет. Полученные плотности зависят от предыстории процесса. Это же относится и к компонентам тензора напряжения СПВ. С учетом разогрева и ускорения вещества сопутствующая система координат, связанная со средой или равномерно движущаяся относительно нее, перестает быть инерционной, и в такой системе подобным образом сконструированный объект уже не преобразуется как 4-тензор плоского пространства Минковского. Часто используют подходы электродинамики движущейся сплошной недиспергирующей среды. Однако во вращающейся и расширяющейся Вселенной такой среды нет. Правда, указанные эффекты слабые, а наиболее сильная для человечества неинерционность связана с вращением Земли вокруг оси. Поэтому строго нельзя ввести инерционную систему, по отношению к которой среда движется равномерно. По-видимому, правильный подход построе-

ния полного ТЭИ, удовлетворяющего условию $\partial_\nu \tilde{T}_\nu^v = 0$, указан в [69]. Он должен включать в себя и энергию и импульс замкнутой системы поле плюс вещество плюс источники поля, учитывать энергию поля, энергию вещества, энергию взаимодействия и диссипации, включая тепловое излучение, а также энергию источников со знаком минус. Тогда полная энергия и импульс сохраняются и равны энергии и импульсу вещества до существования поля. Такой ТЭИ учитывает только ЭП и справедлив в слабых полях, не искривляющих пространство. Ряд подходов к определению энергии, импульса и ТЭИ электромагнитного поля в диспергирующей среде изложен в монографии [70].

Результаты работы докладывались на объединенном семинаре Саратовского государственного университета и ОИЯИ (Дубна) в 2009 г.

Список литературы

1. Тамм И. Е. Основы теории электричества. М. : Наука, 1976. 616 с.
2. Гольдштейн Л. Д., Зернов Н. В. Электромагнитные волны. М. : Сов. радио, 1971. 662 с.
3. Калашиников С. Г. Электричество. М. : Наука, 1964. 668 с.
4. Никольский В. В. Электродинамика и распространение радиоволн. М. : Наука, 1973. 608 с.
5. Стрэттон Дж. Теория электромагнетизма. М. ; Л. : ОГИЗ, 1948. 540 с.
6. Кисунько Г. В. Электродинамика полых систем Л. : ВКАС, 1949. 428 с.
7. Зоммерфельд А. Электродинамика. М. : Изд-во Иностран. лит., 1958.
8. Джексон Дж. Классическая электродинамика. М. : Мир, 1965. 702 с.
9. Каценеленбаум Б. З. Высокочастотная электродинамика. М. : Наука, 1966. 240 с.
10. Власов А. А. Макроскопическая электродинамика. М. : ФИЗМАТЛИТ, 2005. 240 с.
11. Вайнштейн Л. А. Электромагнитные волны. М. : Радио и связь, 1988. 440 с.
12. Абрагам-Беккер. Теория электричества. М. ; Л. : ОНТИ, 1936. 281 с.
13. Баскаков С. И. Основы электродинамики. М. : Сов. радио, 1973. 248 с.
14. Федоров Н. Н. Основы электродинамики. М. : Высш. шк., 1980. 400 с.
15. Галицкий В. М., Ермаченко В. М. Макроскопическая электродинамика. М. : Высш. шк., 1988. 159 с.
16. Измайлов С. В. Курс электродинамики. М. ; Л. : Гос. учеб.-пед. изд.-во, 1962. 320 с.
17. Матвеев А. Н. Электричество и магнетизм. М. : Высш. шк., 1983. 464 с.
18. Новожилков Ю. В., Яппа Ю. А. Электродинамика. М. : Наука, 1978. 352 с.



17. Пановский В., Филипс М. Классическая электродинамика. М. : Физматгиз, 1963. 432 с.
20. Семенов Н. А. Техническая электродинамика. М. : Связь, 1973. 480 с.
21. Терлецкий Я. П., Рыбаков Ю. П. Электродинамика. М. : Высш. шк., 1990. 352 с.
22. Зисман Г. А., Тодес О. М. Курс общей физики. Т. 2. Электричество и магнетизм. М. : Наука, 1972. 367 с.
23. Сивухин Д. В. Общий курс физики. Т. 3. Электричество. М. : Физматлит, 2004. 655 с.
24. Бредов М. М., Румянцев В. В., Топтыгин И. Н. Классическая электродинамика. М. : Наука, 1985. 400 с.
25. Рязанов М. И. Электродинамика конденсированного вещества. М. : Наука, 1984. 304 с.
26. Ландау Л. Д., Лившиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. М. : Наука, 1982. 624.
27. Вайнштейн Л. А., Вакман Д. Е. Разделение частот в теории колебаний и волн. М. : Наука, 1983. 288 с.
28. Ахиезер А. И., Ахиезер И. А. Электромагнетизм и электромагнитные волны. М. : Высш. шк., 1985. 504 с.
29. Островский Л. А., Потапов А. И. Введение в теорию модулированных волн. М. : Физматлит, 2003. 400 с.
30. Карпман В. И. Нелинейные волны в диспергирующих средах. М. : Наука, 1973. 175 с.
31. Бхатнагар П. Нелинейные волны в одномерных дисперсных средах. М. : Мир, 1983. 136 с.
32. Давидович М. В. О плотности электромагнитной энергии и ее скорости в среде с аномальной положительной дисперсией // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32, вып. 22. С. 53–63.
33. Umov N. A. Ableitung der Bewegungsgleichungen der Energie in kontinuierlichen Körpern. Zeitschrift für Mathematik und Physik. 1874. Slomilch. Vol. (Bd.) 19. H. 5 (Умов Н. А. Избранные сочинения. М. ; Л., 1950).
34. Рухадзе А. А., Силян В. П. Электродинамика сред с пространственной дисперсией // УФН. 1961. Т. 74, № 2. С. 223–267.
35. Агранович В. М., Гинзбург В. Л. Кристаллоптика с учетом пространственной дисперсии и теория экситонов. М. : Наука, 1965.
36. Агранович В. М., Гарштейн Ю. Н. Пространственная дисперсия и отрицательное преломление света // УФН. 2006. Т. 176, № 10. С. 1052–1068.
37. Minkowski H. Die Grundgleichungen für die electromagnetischen Vorgänge in bewegten Körpern // Nachrichten von der Königlichen Gesellschaft der Wissenschaften und der Georg-Augustin-Universität zu Göttingen. 1908. P. 53–111.
38. Abraham M. Zur Electrodynamik bewegter Körper // Rendiconti Circolo Matematico di Palermo. 1909. Vol. 28. P. 1–28.
39. Гинзбург В. Л. О законах сохранения энергии и импульса при излучении электромагнитных волн (фотонов) в среде и о тензоре энергии-импульса в макроскопической электродинамике // УФН. 1973. Т. 110, вып. 2. С. 309–319.
40. Скобельцын Д. В. О тензоре импульс-энергии электромагнитного поля // УФН. 1973. Т. 110, вып. 2. С. 253–292.
41. Гинзбург В. Л., Угаров В. А. Несколько замечаний о силах и тензоре энергии-импульса в макроскопической электродинамике // УФН. 1976. Т. 118, вып. 1. С. 175–188.
42. Brevik I. Electromagnetic energy-momentum tensor within material media. II. Discussion on various tensor forms // Mat. Phys. Medd. Dan. Vid. Selsc. 1970. Vol. 37, № 13. P. 1–79.
43. Groot S. R. de, Suttorp L. G. The relativistic energy-momentum tensor in polarized media. VII. Discussion of the results in connexion with previous work // Physica. 1968. Vol. 39. P. 84–93.
44. Groom C. P. de, Samtorn J. G. Электродинамика. М. : Наука, 1982. 530 с.
45. Скобельцын Д. В. Парадоксы квантовой теории эффектов Вавилова–Черенкова и Допплера // УФН. 1977. Т. 122, вып. 2. С. 295
46. Гинзбург В. Л. Замечания к статье Д. В. Скобельцына «Парадоксы квантовой теории эффектов Вавилова–Черенкова и Допплера» // УФН 1977. Т. 122, № 6. С. 325.
47. Brevik I. Electromagnetic energy-momentum tensor within material media. I. Minkovski tensor // Mat. Phys. Medd. Dan. Vid. Selsc. 1970. Vol. 37, № 11. P. 1–52.
48. Brevik I. Electromagnetic energy-momentum tensor within material media // Mat. Phys. Medd. Dan. Vid. Selsc. 1970. Vol. 37, № 11. P. 1–52.
49. Leonhardt U. Momentum in an uncertain light // Nature. 2006. Vol. 444. P. 823–824.
50. Robert N. Pfeifer, Timo A. Nieminen, Norman R. Heckenberg, and Halina Rubinsztein-Dunlop // Rev. Mod. Phys. 2007. Vol. 79. P. 197.
51. Obukhov Yu. N. Electromagnetic energy and momentum in moving media // Annalen der Physik. 2008. № 8. P. 1–22.
52. Hinds E. A., Barnett S. M. Momentum exchange between light and single atom: Abraham or Minkowski // Phys Rev Lett. 2009. Vol. 102 (5). P. 050403.
53. Marklund M. Radiation transport in diffractive media // J. Phys. A, Math. Gen. 2005. Vol. 38, №19. P. 4265–4273.
54. Garrison J. C., Chiao R. Y. Canonical and kinetic forms of the electromagnetic momentum in ad hoc quantization scheme for a dispersive dielectric // Phys. Rev. A. 2004. Vol. 70, № 5. P. 053826.
55. Leonhardt U. Energy-momentum balance in quantum dielectrics // Phys. Rev. A. 2006. Vol. 73. P. 032108.
56. Макаров В. П., Рухадзе А. А. Сила, действующая на вещество в электромагнитном поле // УФН. 2009. Т. 179, № 9. С. 995–1027.
57. Walker G. B., Lahoz D. G., Walker G. Measurement of the Abraham Force in a Barium Titanate Specimen // Can. J. Phys. 1975. Vol. 53. P. 2577.
58. Walker G. B., Lahoz D. G. Experimental observation of Abraham force in a dielectric // Nature. 1975. Vol. 253. P. 339.
59. Davidovich M. V. On conservation laws for electromagnetic field energy and momentum in media and for plane wave diffraction on conducting medium plate // Modeling in Applied Electromagnetics and Electronics. Saratov University Press, 2009. Iss. 9. P. 13–25.
60. Давидович М. В. О законах сохранения энергии и импульса электромагнитного поля в среде и при



- дифракции плоской волны на проводящей пластине // Изв. Саратов. ун-та. Новая сер. 2009. Сер. Физика. Т. 9, вып. 2. С. 65–89.
61. Давидович М. В. О законах сохранения энергии и импульса электромагнитного поля в среде и при дифракции на проводящей пластине // УФН. 2010. Т. 180, № 6. С. 623–638.
62. Давидович М. В. О плотности электромагнитной энергии и ее скорости в среде с дисперсией, обусловленной проводимостью // ЖТФ. 2010. Т. 80, вып. 5. С. 40–44.
63. Петров Б. М. Прикладная электродинамика вращающихся тел. М. : Горячая линия – Телеком, 2009. 288 с.
64. Graglia R. D., Uslenghi P. L. E., Zich R. E. Dispersion relations for bianisotropic materials and its symmetry properties // IEEE Trans. 1991. Vol. AP-39, № 1. P. 83–90.
65. Виноградов А. П. К вопросу о форме материальных уравнений электродинамики // УФН. 2002. Т. 172, № 3. С. 363–370.
66. Гайтлер В. Квантовая теория излучения. М. : Изд-во Иностран. лит., 1956. 492 с.
67. Веселаго В. Г. Перенос энергии, импульса и массы при распространении электромагнитной волны в среде с отрицательным преломлением // УФН. 2009. Т. 179, № 5. С. 689–694.
68. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория поля. М. : Наука, 1973. 504 с.
69. Мёллер К. Теория относительности. М. : Атомиздат, 1975. 400 с.
70. Давидович М. В. Законы сохранения и плотности энергии-импульса электромагнитного поля. Saarbruken, Germany. : Изд-во LAP LAMBERT Academic Publishing GmbH, 2012. 140 с.

УДК 539.194; 539.196.3

ИК СПЕКТРЫ ЦИКЛОГЕКСАНОЛА И СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МОЛЕКУЛЫ

Л. М. Бабков, Н. А. Давыдова*, Е. А. Моисейкина

Саратовский государственный университет

E-mail: babkov@sgu.ru

*Институт физики НАН Украины, Киев

E-mail: davydova@iop.kiev.ua



В диапазоне $600\text{--}3600\text{ см}^{-1}$ в широком интервале температур, в различных фазовых состояниях (пластическая фаза I, кристаллические фазы II и III) измерены ИК спектры циклогексанола. Методом теории функционала плотности (B3LYP) в базисе 6-31G(d) построены структурно-динамические модели конформеров молекулы циклогексанола, различающихся ориентацией гидроксильной группы относительно углеродного кольца, и молекулы циклогексана: рассчитаны энергии, структуры, дипольные моменты, поляризуемости, частоты нормальных колебаний в гармоническом приближении и распределение интенсивностей в ИК их спектрах. Установлены спектрально-структурные признаки конформеров. На основе сравнения теоретических и измеренных спектров дана их предварительная интерпретация с учетом многокомпонентности конформационного состава образца.

Ключевые слова: циклогексанол, молекула, конформер, молекулярное моделирование, метод функционала плотности, структура, электрооптические параметры, механические параметры, нормальные колебания, ИК спектр, частота, интенсивность.

IR Spectra of Cyclohexanol, Structural-Dynamic Models of Molecule

L. M. Babkov, N. A. Davydova, E. A. Moisejkina

In wide temperature range IR spectra of cyclohexanol in different phase state (plastic phase, crystal phases II, III) have been measured in range $600\text{--}3600\text{ см}^{-1}$. Using density functional method B3LYP/6-31G

structural – dynamic models of conformers of cyclohexanol molecule, which differs from each other by orientation of hydroxyl group relatively carbonic ring and cyclohexan, have been constructed. The energy, structure, dipole moments, polarizabilities and the frequencies of the normal modes in harmonic approximation and IR intensities have been calculated. Characteristic OH-group vibrations frequencies allowed to identify defined conformers realized in a sample have been determined. Interpretation of the measured spectra has been performed on the basis of the correspondence between theoretical and measured spectra. Conclusion about probable conformational structure has been performed.

Key words: cyclohexanol, molecule, conformer, molecular modeling, density functional method, structure, electro-optical parameters, mechanical parameters, normal modes, IR spectrum, frequencies, intensity.

Введение

Одной из фундаментальных задач квантовой физики молекулярных систем и физической химии является изучение пространственной структуры соединений, и установление ее взаимосвязи с их химическими и физическими свойствами. Это актуальная задача в приложении к соединениям, представляющим интерес для их практического использования и для фундаментальной науки.



Циклогексанол ($C_6H_{11}OH$) принадлежит к числу таких соединений. Он давно является объектом всесторонних научных исследований [1–9]. Его используют в пищевой промышленности при производстве пищевых добавок, в химической – в качестве растворителя масел, восков, полимеров, красителей, матирующего средства для химических волокон, в фармацевтической – в качестве интермедиата в производстве лекарственных препаратов; в производстве пестицидов, пластификаторов, циклогексиламина; он – стабилизатор эмульсий, смазочных масел, кремов, противовспениватель, гомогенизирующее средство, например, в дезинфицирующих препаратах и т. д.

Циклогексанол обладает полиморфизмом [3, 4, 8]: он образует несколько стабильных при определенных внешних условиях кристаллических структур с различным конформационным составом молекул. Молекула циклогексанола обладает конформационной мобильностью [5–8] и реализуется в виде четырех конформеров, различающихся ориентацией гидроксильной группы [8]. Полиморфизм циклогексанола в значительной степени обусловлен влиянием водородной связи [7, 8]. Перечисленные свойства циклогексанола стимулируют интерес к нему со стороны фундаментальной науки, одной из основных проблем которой является установление связи спектр – структура – свойства с учетом влияния на неё внутри- и межмолекулярных взаимодействий и их особенностей и конформационных переходов. С решением этой проблем в известной степени связаны работы [2, 8, 9]. Её решение в последнее время не обходится без построения структурно-динамических моделей молекулярных систем на основе методов квантовой теории. Это важная и неотъемлемая теоретическая часть исследования, результаты которого позволяют полнее интерпретировать эксперимент и оценить возможности используемых теоретических методов. В этой связи комплексное изучение структуры циклогексанола в различных фазовых состояниях, фазовых переходов между ними, их проявления в колебательных спектрах представляется востребованной и благодарной задачей.

Методом нейтронографии и рентгеноструктурного анализа (РСА) [8] установлено существование нескольких полиморфных модификаций циклогексанола, структуры которых в значительной степени определяются водородной связью и конформацией его молекулы. Конформации молекулы различаются ориентацией гидроксильной группы. В работе [9] проведено моделирование структуры

и спектров двух конформеров циклогексанола и циклогексана для установления колебаний, спектроскопические параметры которых являются спектрально-структурными признаками замещения атома водорода на гидроксильную группу.

Цель проводимых авторами настоящей статьи исследований состоит в теоретическом обосновании экспериментальных данных по структуре циклогексанола [8], ее особенностей и проявления их в колебательных спектрах, полная интерпретация спектров с учетом этих особенностей и свойств на основе методов квантовой теории. Поставленная цель предполагает проведение детального исследования колебательных спектров циклогексанола, основные этапы которого связаны с их измерениями при различных температурах и в разных фазовых состояниях, с моделированием структуры и спектров конформеров и их Н-комплексов и интерпретацию измеренных спектров на основе результатов моделирования.

В предлагаемой статье обсуждаются результаты моделирования структуры и ИК спектров конформеров изолированной молекулы циклогексанола. Это – необходимый этап исследований связанный с конформационным анализом молекулы, с теоретическим обоснованием структуры ее конформеров, с их спектроскопической идентификацией. На основе сравнения результатов измерений и моделирования следует установить спектрально структурные признаки конформеров и провести их анализ. Результаты проведенного анализа позволят сделать предварительные выводы о конформационном составе образца в различных фазовых состояниях и дать предварительную интерпретацию ИК спектров циклогексанола.

Эксперимент и моделирование

ИК спектры циклогексанола при разных температурах, в пластической (I), и кристаллических (II, III) фазах, измерены на Фурье-спектрометре IFS-88 фирмы Bruker.

Измеренные ИК спектры полиморфных модификаций отличаются друг от друга. Причина этого заключена в различии упаковок, на формирование которых существенно влияет водородная связь, и конформационных составов образца. Это положение определило направленность моделирования структуры и колебательных спектров циклогексанола.

Моделирование проведено на основе современного квантово-механического метода теории функционала плотности (ТФП), реализованного в комплексе программ GAUSSIAN'03 для Windows, с использованием функционала B3LYP в базе



6-31G(d) [10–12]. Построены модели конформеров молекулы циклогексанола, различающихся ориентацией гидроксильной группы, и молекулы циклогексана. Минимизированы их энергии, рассчитаны геометрические параметры, дипольные моменты, поляризуемости, частоты нормальных колебаний в гармоническом приближении и их интенсивности в ИК спектрах.

Обсуждение результатов

Строение конформеров циклогексанола, полученное оптимизацией их геометрий, представлено на рис.1. Рассчитанные значения энергии, дипольных моментов (μ_0), их проекций на оси координат (μ_x, μ_y, μ_z) и геометрические параметры конформеров молекулы циклогексанола приведены в табл. 1.

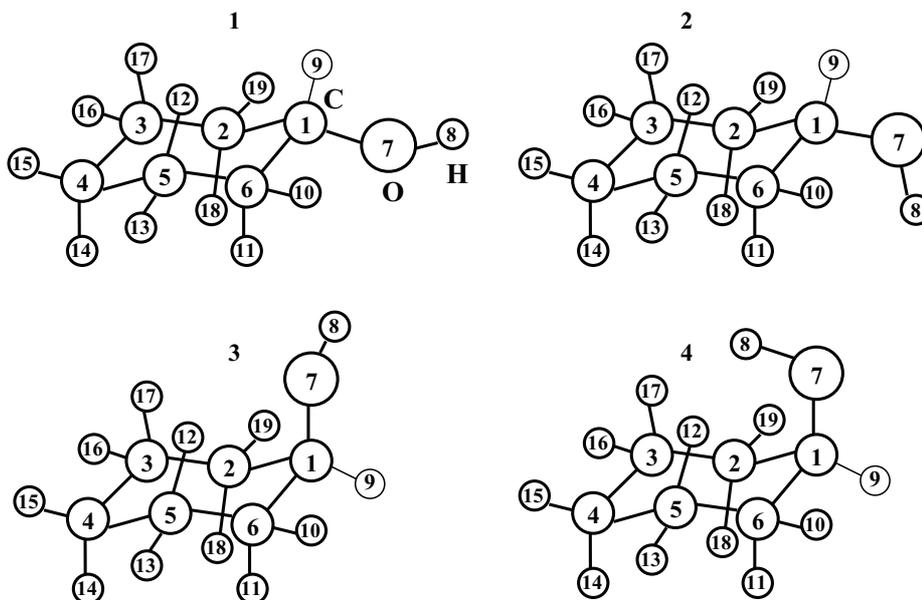


Рис.1. Строение конформеров молекулы циклогексанола

Таблица 1

Рассчитанные параметры конформеров молекулы циклогексанола

Энергия, Hartree		№ конформера			
		1	2	3	4
		-311.090870	-311.091238	-311.090331	-311.088713
Дипольный момент, D	μ_0	1.71	1.91	1.59	1.85
	μ_x	0.72	1.38	0.18	1.77
	μ_y	1.19	0.001	1.16	0.001
	μ_z	1.00	1.31	1.07	0.55
Длины связей, Å	O ₇ -H ₈	0.97	0.97	0.97	0.97
	C ₁ -O ₇	1.43	1.43	1.43	1.43
	C ₁ -C ₂	1.53	1.53	1.54	1.54
	C ₁ -C ₆	1.53	1.53	1.53	1.54
Углы, °	C ₁ -O ₇ -H ₈	108	107	108	108
	H ₉ -C ₁ -O ₇	110	104	109	104
	C ₆ -C ₁ -O ₇	112	112	111	112
	C ₁ -C ₂ -C ₃	112	112	112	112
	C ₂ -C ₁ -C ₆	111	111	111	111
Двугранные углы, °	H ₈ -O ₇ -C ₁ -H ₉	64	180	66	180
	C ₄ -C ₅ -C ₆ -C ₁	55	55	54	55



Молекула не обладает симметрией, неплюское циклогексановое кольцо имеет конформацию «кресло». Его геометрия в конформерах практически одинакова. Конформеры различаются положением гидроксильной группы OH относительно углеродного остова молекулы (экваториальное, для конформеров 1, 2, или

аксиальное, для конформеров 3, 4) и величиной двугранного угла $H_8-O_7-C_1-H_9$, который приблизительно равен 60° для конформеров 1, 3 и 180° – для конформеров 2, 4.

Интерпретация ИК спектров конформеров по коэффициентам форм нормальных колебаний и их интенсивностям дана в табл. 2.

Таблица 2

Рассчитанные частоты фундаментальных колебаний ИК спектров циклогексана и конформеров циклогексанола

№	Циклогексан $\nu, \text{см}^{-1}$	Циклогексанол, $\nu, \text{см}^{-1}$				Циклогексанол Формы
		1	2	3	4	
1	224	161	163	161	159	$\chi(C_5C_6C_1O_7), \chi(O_7C_1C_2C_3), \chi(H_{18}C_2C_1O_7), \chi(C_3C_2C_1H_9), \chi(H_9C_1C_6C_5), \chi(O_7C_1C_6H_{11})$
2	229	230	229	208	216	$\chi(C_1C_2C_3H_{17}), \chi(H_{12}C_5C_6C_1), \chi(C_4C_3C_2C_1), \chi(H_{11}C_6C_5H_{12}), \chi(H_{17}C_3C_2H_{18}), \chi(C_1C_6C_5C_4)$
3		299	297	299	263	$\chi(C_2C_1O_7H_8), \chi(C_6C_1O_7H_8), \chi(H_9C_1O_7H_8)$
4	374	334	333	310	310	$\chi(H_{17}C_3C_4H_{14}), \chi(H_{14}C_4C_5H_{12}), \chi(H_{17}C_3C_4C_5), \chi(H_{17}C_3C_4H_{15})$
5		344	363	387	395	$\chi(C_2C_1O_7H_8), \chi(C_6C_1O_7H_8), \chi(H_9C_1O_7H_8), \chi(H_{19}C_2C_1O_7), \chi(O_7C_1C_6H_{10})$
6	429	406	405			$\chi(H_{19}C_2C_3H_{16}), \chi(H_{10}C_6C_5H_{13}), \chi(H_{10}C_6C_5H_{12})$
				396	396	$\chi(H_{19}C_2C_3H_{17}), \chi(H_{17}C_3C_2H_{18}), \chi(H_{16}C_3C_2H_{18})$
7	431	456	454	494	492	$\chi(H_{16}C_3C_4H_{15}), \chi(H_{15}C_4C_5H_{13}), \chi(H_{16}C_3C_4H_{14}), \chi(H_{13}C_5C_4H_{14}), \chi(H_{16}C_3C_4C_5)$
8	521	476	469	484	487	$\chi(H_{10}C_6C_1C_2), \chi(C_6C_1C_2H_{19}), \chi(C_6C_1C_2H_{18}), \chi(C_2C_1C_6H_{11})$
9	788	558	557			$\chi(C_2C_3C_4H_{15}), \chi(C_6C_5C_4H_{15}), \chi(C_1C_6C_5H_{13}), \chi(C_1C_2C_3H_{16})$
				671	657	$\chi(H_{16}C_3C_4C_5), \chi(H_{17}C_3C_4C_5), \chi(C_2C_1O_7H_8), \chi(H_{19}C_2C_1O_7)$
10	788				770	$Q(C_2C_1), Q(C_1C_6), Q(C_3C_2), Q(C_6C_5), \chi(H_{17}C_3C_4H_{15})$
				778		$\chi(H_{17}C_3C_4H_{14}), \chi(H_{16}C_3C_4H_{14}), \chi(H_{17}C_3C_4H_{15})$
		787	783			$\chi(H_{17}C_3C_2H_{18}), \chi(H_{11}C_6C_5H_{12}), \chi(H_{11}C_6C_5H_{13}), \chi(H_{16}C_3C_2H_{18})$
11	797	790	788	786	770	$\chi(H_{12}C_5C_4H_{14}), \chi(H_{17}C_3C_4H_{14}), \chi(H_1C_2C_3H_{16}), \chi(H_{16}C_3C_4H_{14})$
12	857 859	842	840			$Q(C_3C_4), Q(C_4C_5), \chi(H_{17}C_3C_4H_{14}), \chi(H_{14}C_4C_5H_{12})$
				835	832	$Q(C_3C_4), Q(C_4C_5), \chi(H_{17}C_3C_2H_{18}), \chi(H_{11}C_6C_5H_{12})$
				859	857	$Q(C_3C_2), Q(C_6C_5), \chi(H_9C_1O_7H_8), Q(C_3C_4), Q(C_5C_4)$
13	912	887	885	868	860	$\chi(H_{15}C_4C_5H_{12}), \chi(H_{17}C_3C_4H_{15}), \chi(H_{15}C_4C_5H_{13}), \chi(H_{17}C_3C_4H_{14}), \chi(H_{16}C_3C_4H_{15})$
14	914	890	891	938	932	$\chi(H_{11}C_6C_5H_{12}), \chi(H_{18}C_2C_3H_{17}), \chi(H_{11}C_6C_5H_{13}), \chi(H_{17}C_3C_2H_{19}), \chi(H_{10}C_6C_5H_{12}), \chi(H_{16}C_3C_2H_{18})$
15		928	924			$\chi(H_{19}C_2C_3H_{16}), \chi(H_{10}C_6C_5H_{13}), \chi(H_{17}C_3C_2H_{19}), \chi(H_{10}C_6C_5H_{12})$
16		975	977			$Q(C_1O_7), \chi(H_{18}C_2C_1H_9), \chi(H_{11}C_6C_1H_9), \chi(H_{17}C_3C_4C_5)$
				977	976	$Q(C_1O_7), \chi(H_{13}C_5C_4H_{15}), \chi(H_{16}C_3C_4H_{15}), \chi(H_{16}C_3C_4H_{14})$
17	1027	1024	1021			$Q(C_3C_2), Q(C_6C_5), \beta(C_2C_3H_{16}), \beta(C_6C_5H_{13}), \chi(H_{16}C_3C_4C_5)$
				1020	1018	$\chi(H_{18}C_2C_1C_6), \chi(H_{17}C_3C_4C_5), \chi(H_{18}C_2C_1H_9), \chi(H_{16}C_3C_2C_1)$



№	Циклогексан v, см ⁻¹	Циклогексанол, v, см ⁻¹				Циклогексанол Формы
		1	2	3	4	
18	1027				1027	$\chi(\text{H}_9\text{C}_1\text{O}_7\text{H}_8)$, $\text{Q}(\text{C}_3\text{C}_4)$, $\text{Q}(\text{C}_5\text{C}_4)$, $\text{Q}(\text{C}_2\text{C}_1)$, $\text{Q}(\text{C}_1\text{C}_6)$, $\beta(\text{C}_3\text{C}_4\text{H}_{15})$
				1029		$\chi(\text{C}_2\text{C}_1\text{C}_6\text{H}_{11})$, $\chi(\text{H}_{12}\text{C}_5\text{C}_4\text{C}_3)$, $\beta(\text{C}_3\text{C}_4\text{H}_{15})$, $\chi(\text{H}_9\text{C}_1\text{C}_6\text{H}_{11})$, $\chi(\text{C}_1\text{C}_6\text{C}_5\text{H}_{13})$
		1043				$\text{Q}(\text{C}_1\text{C}_2)$, $\beta(\text{C}_4\text{C}_5\text{H}_{13})$, $\text{Q}(\text{C}_6\text{C}_1)$, $\beta(\text{C}_4\text{C}_3\text{H}_{16})$, $\beta(\text{C}_1\text{O}_7\text{H}_8)$, $\chi(\text{C}_1\text{C}_6\text{C}_5\text{H}_{13})$
			1054			$\beta(\text{C}_4\text{C}_3\text{H}_{16})$, $\beta(\text{C}_4\text{C}_5\text{H}_{13})$, $\chi(\text{H}_9\text{C}_1\text{O}_7\text{H}_8)$, $\beta(\text{C}_3\text{C}_4\text{H}_{14})$, $\beta(\text{C}_5\text{C}_4\text{H}_{14})$, $\text{Q}(\text{C}_3\text{C}_4)$
19	1034			1035	1030	$\text{Q}(\text{C}_3\text{C}_2)$, $\text{Q}(\text{C}_6\text{C}_5)$, $\chi(\text{H}_{16}\text{C}_3\text{C}_2\text{C}_{19})$, $\chi(\text{H}_{10}\text{C}_6\text{C}_5\text{C}_{13})$, $\text{Q}(\text{C}_1\text{C}_7)$, $\beta(\text{C}_1\text{C}_2\text{H}_{19})$
		1073	1077			$\beta(\text{C}_2\text{C}_3\text{H}_{17})$, $\beta(\text{C}_3\text{C}_2\text{H}_{18})$, $\beta(\text{C}_3\text{C}_2\text{H}_{19})$, $\beta(\text{C}_1\text{C}_2\text{H}_{18})$, $\chi(\text{H}_9\text{C}_1\text{O}_7\text{H}_8)$
20	1067	1082	1089	1073	1071	$\text{Q}(\text{C}_3\text{C}_4)$, $\text{Q}(\text{C}_5\text{C}_4)$, $\text{Q}(\text{C}_3\text{C}_2)$, $\text{Q}(\text{C}_6\text{C}_5)$, $\beta(\text{C}_1\text{C}_2\text{H}_{18})$, $\beta(\text{C}_5\text{C}_4\text{H}_{15})$
21	1090*	1094	1074			$\text{Q}(\text{C}_1\text{O}_7)$, $\beta(\text{C}_1\text{O}_7\text{H}_8)$, $\chi(\text{H}_{18}\text{C}_2\text{C}_1\text{C}_6)$, $\chi(\text{C}_2\text{C}_1\text{C}_6\text{H}_{11})$, $\chi(\text{H}_{17}\text{C}_3\text{C}_2\text{H}_{19})$
				1121	1126	$\beta(\text{C}_1\text{C}_2\text{H}_{19})$, $\beta(\text{C}_1\text{O}_7\text{H}_8)$, $\chi(\text{H}_{16}\text{C}_3\text{C}_2\text{H}_{19})$, $\chi(\text{H}_{19}\text{C}_2\text{C}_1\text{H}_9)$, $\chi(\text{H}_{10}\text{C}_6\text{C}_5\text{H}_{13})$
22	1123	1149	1135	1158	1133	$\chi(\text{H}_{16}\text{C}_3\text{C}_4\text{H}_{15})$, $\chi(\text{H}_{17}\text{C}_3\text{C}_4\text{H}_{15})$, $\chi(\text{H}_{16}\text{C}_3\text{C}_4\text{H}_{14})$
23	1177	1175	1198	1131	1152	$\chi(\text{H}_{15}\text{C}_4\text{C}_5\text{H}_{13})$, $\chi(\text{H}_{16}\text{C}_3\text{C}_4\text{H}_{15})$, $\chi(\text{H}_{15}\text{C}_4\text{C}_5\text{H}_{12})$, $\beta(\text{C}_2\text{C}_3\text{H}_{16})$, $\beta(\text{C}_6\text{C}_5\text{H}_{13})$
24	1280	1248	1226	1242	1228	$\beta(\text{C}_1\text{C}_7\text{H}_8)$, $\chi(\text{H}_{11}\text{C}_6\text{C}_1\text{H}_9)$, $\chi(\text{H}_{18}\text{C}_2\text{C}_1\text{H}_9)$, $\chi(\text{H}_{19}\text{C}_2\text{C}_1\text{H}_9)$
25	1281	1272	1272	1294	1283	$\chi(\text{H}_{10}\text{C}_6\text{C}_5\text{H}_{13})$, $\chi(\text{H}_{16}\text{C}_3\text{C}_2\text{H}_{19})$, $\beta(\text{C}_4\text{C}_5\text{H}_{13})$, $\beta(\text{C}_4\text{C}_3\text{H}_{16})$
26	1258	1279	1280	1282	1282	$\beta(\text{C}_5\text{C}_4\text{H}_{14})$, $\beta(\text{C}_3\text{C}_4\text{H}_{14})$, $\beta(\text{C}_5\text{C}_4\text{H}_{15})$, $\beta(\text{C}_3\text{C}_4\text{H}_{15})$, $\beta(\text{C}_3\text{C}_2\text{H}_{19})$
27	1286	1292	1310	1266	1295	$\beta(\text{C}_1\text{O}_7\text{H}_8)$, $\beta(\text{C}_1\text{C}_2\text{H}_{18})$, $\beta(\text{C}_1\text{C}_2\text{H}_{19})$, $\chi(\text{H}_9\text{C}_1\text{C}_6\text{H}_{10})$
28	1344	1335	1328	1352	1337	$\beta(\text{C}_1\text{C}_6\text{H}_{10})$, $\beta(\text{C}_1\text{C}_2\text{H}_{19})$, $\chi(\text{H}_9\text{C}_1\text{C}_2\text{H}_{19})$, $\chi(\text{H}_9\text{C}_1\text{C}_6\text{H}_{10})$, $\beta(\text{C}_5\text{C}_6\text{H}_{10})$, $\chi(\text{H}_9\text{C}_1\text{O}_7\text{H}_8)$
29	1374	1346			1350	$\chi(\text{H}_{18}\text{C}_2\text{C}_1\text{H}_9)$, $\beta(\text{C}_1\text{C}_2\text{H}_{18})$, $\chi(\text{H}_{16}\text{C}_3\text{C}_2\text{H}_{18})$, $\beta(\text{C}_3\text{C}_2\text{H}_{18})$, $\beta(\text{C}_2\text{C}_3\text{H}_{16})$
			1385	1390		$\beta(\text{C}_1\text{C}_6\text{H}_{10})$, $\beta(\text{C}_5\text{C}_6\text{H}_{10})$, $\beta(\text{C}_1\text{C}_6\text{H}_{11})$, $\beta(\text{C}_5\text{C}_6\text{H}_{11})$, $\chi(\text{C}_2\text{C}_1\text{C}_6\text{H}_{11})$
30	1379	1363	1363	1350	1385	$\chi(\text{H}_{17}\text{C}_3\text{C}_4\text{H}_{15})$, $\beta(\text{C}_3\text{C}_4\text{H}_{15})$, $\beta(\text{C}_5\text{C}_4\text{H}_{15})$, $\chi(\text{H}_{15}\text{C}_4\text{C}_5\text{H}_{12})$, $\chi(\text{H}_{15}\text{C}_4\text{C}_5\text{H}_{12})$
31	1379	1377	1374	1380	1373	$\beta(\text{C}_3\text{C}_4\text{H}_{14})$, $\beta(\text{C}_5\text{C}_4\text{H}_{14})$, $\chi(\text{H}_{17}\text{C}_3\text{C}_4\text{H}_{14})$, $\chi(\text{H}_{12}\text{C}_5\text{C}_4\text{H}_{14})$
32	1383	1380	1375	1377	1381	$\beta(\text{C}_2\text{C}_3\text{H}_{16})$, $\beta(\text{C}_6\text{C}_5\text{H}_{13})$, $\beta(\text{C}_4\text{C}_3\text{H}_{16})$, $\beta(\text{C}_4\text{C}_5\text{H}_{13})$
33	1384	1397	1381	1399	1385	$\chi(\text{H}_9\text{C}_1\text{C}_2\text{H}_{19})$, $\chi(\text{H}_9\text{C}_1\text{C}_2\text{C}_3)$, $\beta(\text{C}_2\text{C}_1\text{H}_9)$, $\chi(\text{H}_9\text{C}_1\text{O}_7\text{H}_8)$, $\beta(\text{C}_6\text{C}_1\text{H}_9)$
34	1489	1436	1425	1427	1423	$\chi(\text{H}_{10}\text{C}_6\text{C}_1\text{H}_9)$, $\chi(\text{C}_5\text{C}_6\text{C}_1\text{H}_9)$, $\beta(\text{C}_2\text{C}_1\text{H}_9)$, $\beta(\text{H}_9\text{C}_1\text{O}_7)$, $\chi(\text{H}_9\text{C}_1\text{C}_2\text{H}_{19})$
35	1489	1490	1488	1482	1481	$\alpha(\text{H}_{11}\text{C}_6\text{H}_{10})$, $\alpha(\text{H}_{18}\text{C}_2\text{H}_{19})$, $\chi(\text{H}_{10}\text{C}_6\text{C}_5\text{H}_{12})$, $\chi(\text{H}_{16}\text{C}_3\text{C}_2\text{H}_{18})$, $\chi(\text{H}_{11}\text{C}_6\text{C}_5\text{H}_{13})$
36	1496	1494	1493	1491	1487	$\alpha(\text{H}_{14}\text{C}_4\text{H}_{15})$, $\alpha(\text{H}_{18}\text{C}_2\text{H}_{19})$, $\chi(\text{H}_{16}\text{C}_3\text{C}_4\text{H}_{14})$, $\chi(\text{H}_{14}\text{C}_4\text{C}_5\text{H}_{13})$
37	1496	1496	1495	1494	1501	$\alpha(\text{H}_{17}\text{C}_3\text{H}_{16})$, $\alpha(\text{H}_{13}\text{C}_5\text{H}_{12})$, $\chi(\text{H}_{17}\text{C}_3\text{C}_4\text{H}_{15})$, $\chi(\text{H}_{18}\text{C}_2\text{C}_3\text{H}_{17})$, $\chi(\text{H}_{16}\text{C}_3\text{C}_4\text{H}_{14})$
38	1499	1501	1500	1499	1503	$\alpha(\text{H}_{12}\text{C}_5\text{H}_{13})$, $\alpha(\text{H}_{17}\text{C}_3\text{H}_{16})$, $\chi(\text{H}_{19}\text{C}_2\text{C}_3\text{H}_{17})$
39	1516	1517	1515	1513	1517	$\alpha(\text{H}_{14}\text{C}_4\text{H}_{15})$, $\alpha(\text{H}_{19}\text{C}_2\text{H}_{18})$, $\alpha(\text{H}_{11}\text{C}_6\text{H}_{10})$, $\alpha(\text{H}_{13}\text{C}_5\text{H}_{12})$, $\alpha(\text{H}_{17}\text{C}_3\text{H}_{16})$
40	2865	2804	2897	2829	2884	$\text{q}(\text{C}_1\text{H}_9)$
41	2866	2869	2850	2886	2879	$\text{q}(\text{C}_6\text{H}_{10})$, $\text{q}(\text{C}_6\text{H}_{11})$
42	2868	2872	2870	2864	2860	$\text{q}(\text{C}_3\text{H}_{17})$, $\text{q}(\text{C}_4\text{H}_{14})$, $\text{q}(\text{C}_5\text{H}_{12})$
43	2871	2874	2875	2892	2862	$\text{q}(\text{C}_5\text{H}_{12})$, $\text{q}(\text{C}_4\text{H}_{14})$, $\text{q}(\text{C}_3\text{H}_{17})$
44	2871	2878	2879	2896	2875	$\text{q}(\text{C}_4\text{H}_{14})$, $\text{q}(\text{C}_4\text{H}_{15})$, $\text{q}(\text{C}_5\text{H}_{12})$, $\text{q}(\text{C}_3\text{H}_{17})$
45	2875	2889	2930	2868	2934	$\text{q}(\text{C}_2\text{H}_{18})$, $\text{q}(\text{C}_2\text{H}_{19})$
46	2913	2910	2856	2929	2920	$\text{q}(\text{C}_6\text{H}_{11})$, $\text{q}(\text{C}_6\text{H}_{10})$, $\text{q}(\text{C}_5\text{H}_{13})$
47	2913	2919	2919	2917	2919	$\text{q}(\text{C}_4\text{H}_{15})$, $\text{q}(\text{C}_4\text{H}_{14})$, $\text{q}(\text{C}_5\text{H}_{13})$
48	2916	2922	2920	2932	2920	$\text{q}(\text{C}_3\text{H}_{16})$, $\text{q}(\text{C}_5\text{H}_{13})$
49	2916	2927	2925	2941	2925	$\text{q}(\text{C}_5\text{H}_{13})$, $\text{q}(\text{C}_3\text{H}_{16})$, $\text{q}(\text{C}_4\text{H}_{14})$
50	2916	2936	2935	2902	2936	$\text{q}(\text{C}_2\text{H}_{19})$, $\text{q}(\text{C}_2\text{H}_{18})$
51		3548	3536	3553	3561	$\text{q}(\text{O}_7\text{H}_8)$

*Данной частоте в спектре циклогексана соответствуют колебания Q(CC), χ (HCCH). № – номер колебания.



В области $800\text{--}1500\text{ см}^{-1}$, в которой проявляются валентные и деформационные колебания циклогексанового кольца и связей С–О, теоретические спектры сдвинуты относительно экспериментальных в высокочастотную сторону на 1,5%. В области валентных колебаний связей С–Н и О–Н ($2800\text{--}3600\text{ см}^{-1}$) сдвиг составляет 5% и обусловлен в основном ограниченностью гармонического приближения и в меньшей степени выбранными квантово-механическим методом и базисом. Этот сдвиг устранен масштабированием частот. Однако для валентного колебания связи О–Н проведенного масштабирования недостаточно: центр тяжести полосы этого колебания в измеренных спектрах остается сдвинутым по отношению к рассчитанной полосе приблизительно на 300 см^{-1} в длинноволновую сторону. Причиной этого расхождения является ограниченность модели изолированной молекулы.

На рис. 2 приведены теоретические спектры циклогексана и конформеров циклогексанола. Замена атома водорода в молекуле циклогексана на гидроксильную группу приводит к сдвигу ($\Delta\nu$) частот ν_{12} , ν_{13} (область $600\text{--}1000\text{ см}^{-1}$), соответствующих валентным колебаниям $Q(C_3C_4)$, $Q(C_4C_5)$

и неплоским деформационным колебаниям кольца, в сторону низких частот. Для конформера 1 $\Delta\nu_{12} = 15\text{ см}^{-1}$, $\Delta\nu_{13} = 25\text{ см}^{-1}$; для конформера 2 $\Delta\nu_{12} = 17\text{ см}^{-1}$, $\Delta\nu_{13} = 27\text{ см}^{-1}$; для конформера 3 $\Delta\nu_{12} = 0\text{ см}^{-1}$, $\Delta\nu_{13} = 44\text{ см}^{-1}$; для конформера 4 $\Delta\nu_{12} = 2\text{ см}^{-1}$, $\Delta\nu_{13} = 52\text{ см}^{-1}$. При переходе от циклогексана к циклогексанолу наблюдается увеличение интенсивностей колебаний ν_{10} , ν_{11} , соответствующих валентным и неплоским деформационным колебаниям кольца. В спектрах конформеров циклогексанола появляется дополнительный интенсивный пик на частоте ν_{16} , соответствующий колебаниям $Q(C_1O_7)$, $\chi(H_{18}C_2C_1H_9)$, $\chi(H_{13}C_5C_4H_{15})$. Частота ν_9 колебаний $\chi(C_2C_3C_4H_{15})$, $\chi(H_{16}C_3C_4C_5)$, $\chi(H_{17}C_3C_4C_5)$, $\chi(C_6C_5C_4H_{15})$ в конформерах 3, 4 и конформерах 1, 2 отличается на величину порядка 100 см^{-1} . Интенсивность колебания ν_{16} ($Q(C_1O_7)$) в ИК спектрах конформеров 3, 4 выше, чем в ИК спектрах конформеров 1, 2. Колебания ν_{14} , ν_{15} для конформеров различаются формами неплоских деформационных колебаний углеродных атомов кольца. Колебания ν_9 , ν_{16} , ν_{14} , ν_{15} являются характерными спектральными признаками для определения положения гидроксильной группы относительно углеродного кольца молекулы.

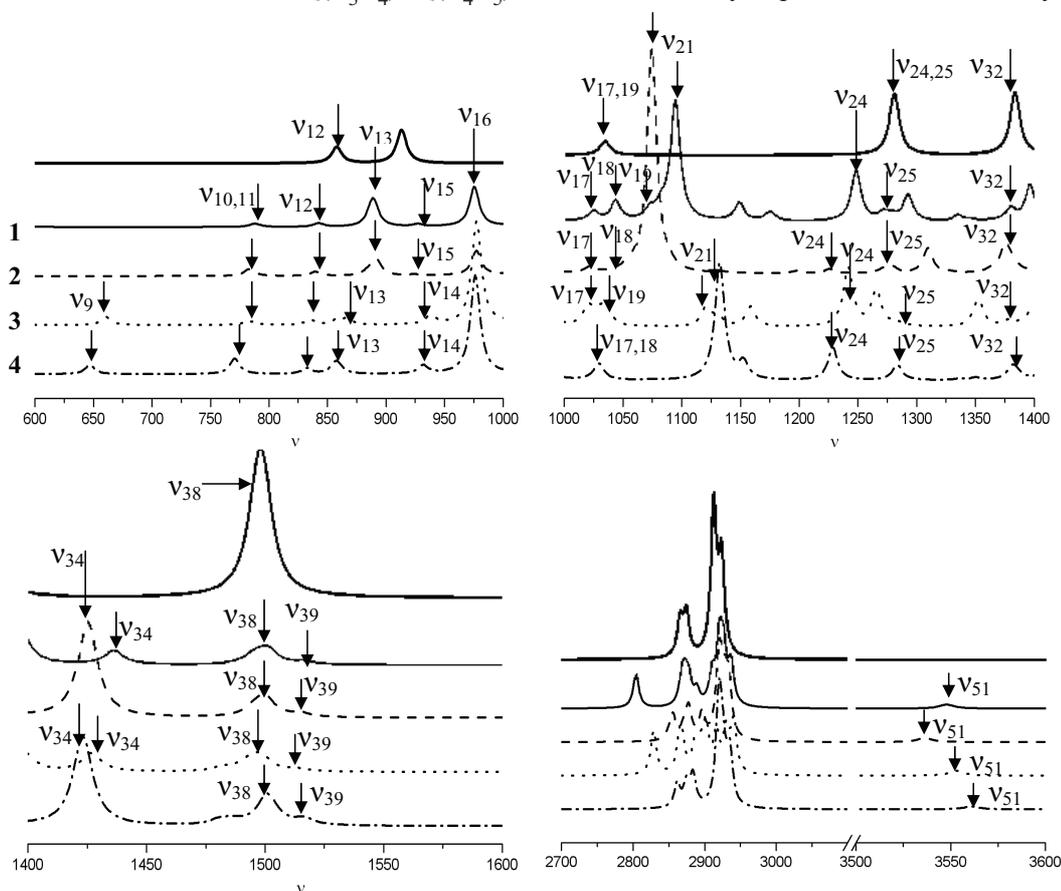


Рис. 2. Теоретические спектры молекулы циклогексана и конформеров циклогексанола (1–4)



В области $1000\text{--}1400\text{ см}^{-1}$ частоты колебаний ν_{17} , ν_{18} , ν_{19} в ИК спектре циклогексана близки, а для конформеров существенно различны. При этом вид спектрального контура в этой области частот различен для конформеров 1, 3 и 2, 4. Установленный факт позволяет определить колебания ν_{17} , ν_{18} , ν_{19} как спектрально-структурные признаки конформеров, различающихся двугранными углами $\text{H}_8\text{--O}_7\text{--C}_1\text{--H}_9$. Влияние ОН-группы сводится к появлению интенсивного пика, соответствующего плоскому деформационному колебанию $\beta(\text{C}_1\text{O}_7\text{H}_8)$, с частотой ν_{21} , которого нет в спектре циклогексана. Частоты ν_{24} , ν_{25} , близкие в спектре циклогексана, расталкиваются в спектрах конформеров циклогексанола.

В области $1400\text{--}1600\text{ см}^{-1}$ частота ν_{38} плоских деформационных колебаний $\beta(\text{C}_2\text{C}_3\text{H}_{16})$, $\beta(\text{C}_6\text{C}_5\text{H}_{13})$, $\beta(\text{C}_4\text{C}_3\text{H}_{16})$, $\beta(\text{C}_4\text{C}_5\text{H}_{13})$ практически не смещается в спектрах различных конформеров. Спектрально-структурным признаком идентификации конформеров по величине двугранного угла $\text{H}_8\text{--O}_7\text{--C}_1\text{--H}_9$ может считаться неплоское колебание ν_{34} , делокализованное по координатам $\chi(\text{H}_{10}\text{C}_6\text{C}_1\text{H}_9)$, $\chi(\text{C}_5\text{C}_6\text{C}_1\text{H}_9)$, $\beta(\text{C}_2\text{C}_1\text{H}_9)$, $\beta(\text{H}_9\text{C}_1\text{O}_7)$, $\chi(\text{H}_9\text{C}_1\text{C}_2\text{H}_{19})$. В спектрах конформеров 2, 4 колебание ν_{34} смещено в сторону низких частот по сравнению с конформерами 1, 3 не больше чем на 10 см^{-1} и более интенсивно.

Наличие гидроксильной группы влияет на колебания $\nu(\text{CH})$ в области $2800\text{--}3100\text{ см}^{-1}$. Наиболее чувствительными оказываются колебания ближайших к ней фрагментов циклогексанового кольца. Рассмотрим в качестве примера валентное колебание $\nu(\text{C}_1\text{H}_9)$ с частотой ν_{40} . Разброс частот этого колебания для различных конформеров составляет 90 см^{-1} . Валентные колебания $\nu(\text{C}_4\text{H}_{14})$, $\nu(\text{C}_4\text{H}_{15})$, $\nu(\text{C}_3\text{H}_{17})$, $\nu(\text{C}_3\text{H}_{16})$, $\nu(\text{C}_5\text{H}_{13})$, $\nu(\text{C}_5\text{H}_{12})$ удаленных фрагментов чувствуют влияние ОН-группы в меньшей степени: разброс по частотам ν_{44} , ν_{47} находится в пределах от 2 до 20 см^{-1} , а $\nu_{42} \leq 12\text{ см}^{-1}$, $\nu_{49} \leq 16\text{ см}^{-1}$.

На рис. 3 представлены теоретические спектры конформеров и экспериментальные спектры циклогексанола в различных фазовых состояниях: пластичная фаза I, кристаллические фазы II, III.

Из анализа спектров в области $600\text{--}1000\text{ см}^{-1}$ можно сделать предположение о реализации в кристаллических фазах II и III конформеров 1, 2, так как лучшее согласие частот ν_{12} , ν_{14} с экспериментальными частотами 846 и 894 см^{-1} получено для них. В спектре фазы II имеет характерный пик на частоте 767 см^{-1} , которого не наблюдается в

спектре фазы III, и два спектрально различимых пика с максимумами 685 и 705 см^{-1} , которые объединены в общий контур с центром тяжести полосы на частоте 694 см^{-1} в спектре фазы III.

В области $1000\text{--}1400\text{ см}^{-1}$ полоса с частотой ν_{22} конформера 4 не ложится на измеренные полосы кристаллических фаз. Колебание ν_{21} конформера 1 соответствует полосе с максимумом 1092 см^{-1} в экспериментальном спектре кристаллической фазы II. Колебания ν_{21} конформера 2 и ν_{22} , ν_{23} конформера 1 близки к экспериментальным полосам с пиками 1080 , 1148 и 1175 см^{-1} в спектрах фаз II, III и могут им соответствовать.

Анализ спектров в области $1400\text{--}1600\text{ см}^{-1}$ позволил выделить в экспериментальном спектре характерный для фазы II пик на частоте 1517 см^{-1} ножничного колебания $\alpha(\text{HCH})$. Экспериментальный спектр в этой области имеет более сложную структуру по сравнению с теоретическими спектрами конформеров.

В результате анализа ИК спектров конформеров циклогексанола в области $2800\text{--}3600\text{ см}^{-1}$ установлено, что наилучшее согласие с экспериментальными спектрами кристаллических фаз II, III по частотам и интенсивностям валентных колебаний $\nu(\text{CH})$ $\nu_{40}\text{--}\nu_{43}$ достигнуто для конформера 1. Экспериментальный спектр пластической фазы имеет более сглаженный контур, что позволяет предположить существование в данной фазе конформеров различного строения.

Анализ высокочастотной области ИК спектров, где проявляются валентные колебания связей О–Н показал, что результаты моделирования циклогексанола в приближении изолированной молекулы не могут адекватно описать эту область. Рассчитанные частоты ν_{51} валентных колебаний связей О–Н конформеров находятся в интервале $3500\text{--}3600\text{ см}^{-1}$, а центр тяжести полосы измеренного спектра соответствует 3200 см^{-1} , т.е. сдвиг частотных положений полос составляет свыше 300 см^{-1} . Этот сдвиг является одним из главных признаков образования в образце водородных связей. Аномально большие интенсивность, ширина и сложная форма соответствующей полосы в измеренном спектре – еще один признак образования в образце комплексов с водородной связью. Для теоретического описания спектра в данной области необходим выход за рамки модели изолированной молекулы. Этот выход определяет следующий этап исследований структуры и спектров циклогексанола, анализ результатов которого выходит за рамки данной статьи.

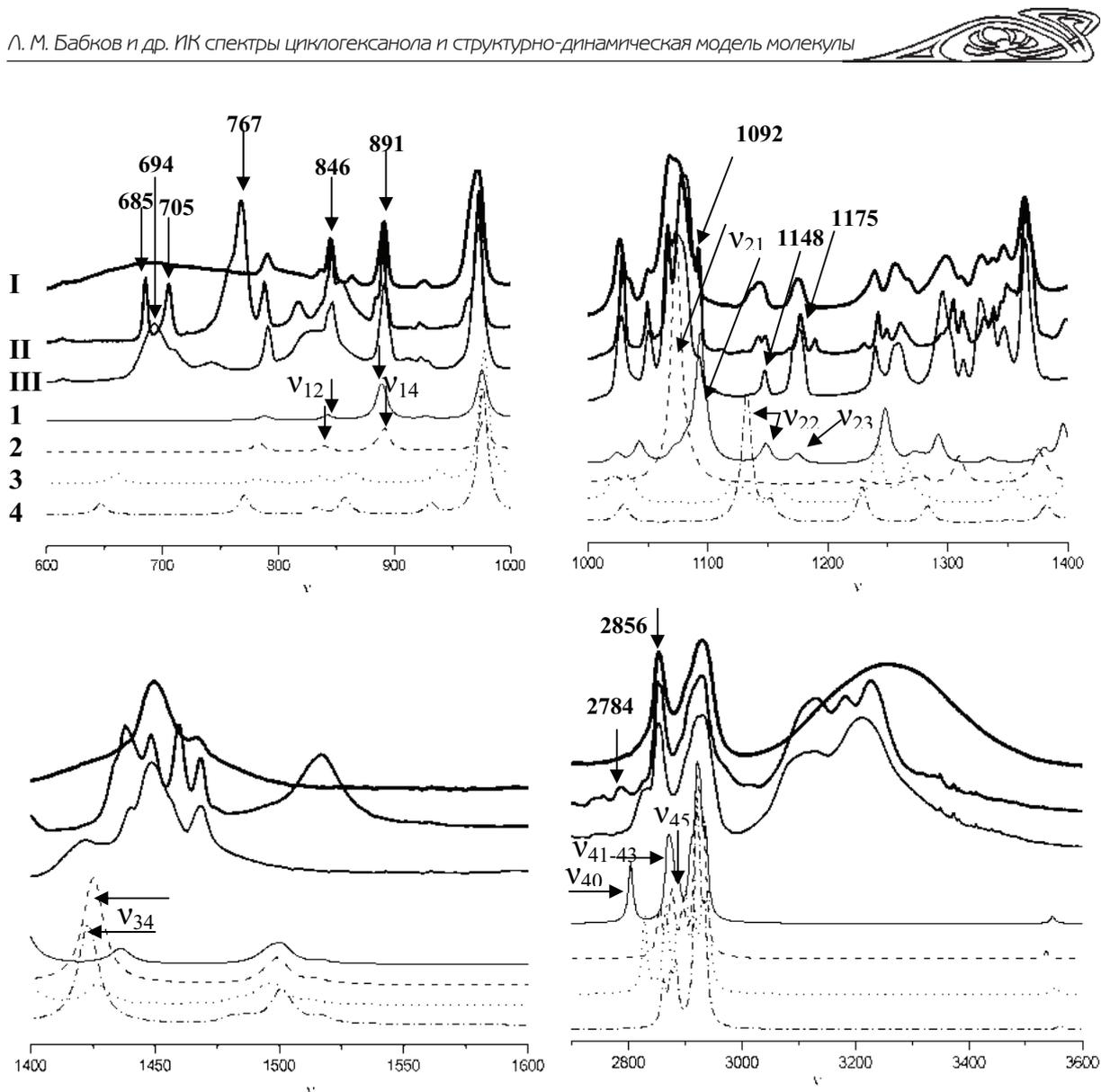


Рис. 3. ИК спектры циклогексанола: I – пластическая фаза; II, III – кристаллические фазы (эксперимент); 1–4 конформеры (теория)

Заключение

На основе результатов построения структурно-динамических моделей конформеров молекулы циклогексанола методом ТФП с использованием функционала B3LYP и базиса 6-31G (d) установлено их строение и вычислены геометрические параметры. Молекула не обладает симметрией, ее неплоское кольцо имеет конформацию «кресло».

Определены спектрально-структурные признаки (частоты) позволяющие различать конформеры различного строения. По колебаниям ν_9 , ν_{16} , ν_{14} , ν_{15} можно установить аксиальное или экваториальное положение гидроксильной группы относительно углеродного кольца молекулы. По колебаниям $\nu_{17} - \nu_{19}$, ν_{34} – геометрическое положение атома водорода гидроксильной группы в двугранном угле $H_8-O_7-C_1-H_9$.

На основе анализа экспериментальных спектров циклогексанола в различных полиморфных модификациях, и теоретических спектров его конформеров, сделано заключение о реализации в кристаллических фазах II, III конформеров 1, 2. В фазе II преобладает конформер 1. Пластическая фаза представляет собой смесь конформеров различного строения.

Сдвиг рассчитанного ИК спектра относительно экспериментального в высокочастотную сторону обусловлен точностью расчета, определяемой выбранными квантово-механическим методом, базисом и гармоническим приближением.

Большие расхождения по частотам и интенсивностям валентных колебаний гидроксильных групп конформеров рассчитанных и измеренных ИК спектров обусловлены ограниченностью мо-



дели изолированной молекулы. Для адекватного теоретического описания спектра в данной области и уточнения его интерпретации необходимо выйти за её рамки: учесть влияние водородной связи на структуру и колебательные спектры исследуемого образца.

Список литературы

1. *Kelley K. K.* Cyclohexanol and the third law of thermodynamics // *J. Amer. Chem. Soc.* 1929. Vol. 51. P. 1400–1406.
2. *Neelakantan R.* Raman spectra of cyclohexanol // *Proc. Mathematical Sciences.* 1963. Vol. 57. P. 94–102.
3. *Green J. R., Griffith W. T.* Phase transformations in solid cyclohexanol // *J. Phys. Chem. Solids.* 1965. Vol. 26. P. 631–637.
4. *Adachi K., Suga H., Seki S.* Phase changes in crystalline and glassy-crystalline cyclohexanol // *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 1968. Vol. 41. P. 1073–1087.
5. *Wunderlich B.* The detection of conformational disorder by thermal analysis // *Pure & Appl. Chem.* 1989. Vol. 61, № 8. P. 1347–1351.
6. *Inscore F., Gift A., Maksymiuk P., Farquharson S.* Characterization of chemical warfare G-agent hydrolysis products by surface – enhanced Raman spectroscopy // *SPIE.* 2004. Vol. 5585. P. 46–52.
7. *Bonnet A., Chisholm J., Sam Motherwell W.D., Jones W.* Hydrogen bonding preference of equatorial versus axial hydroxyl groups in pyran and cyclohexane rings in organic crystals // *Cryst. Eng. Comm.* 2005. Vol. 7, № 9. P. 71–75.
8. *Ibberson R. M., Parsons S., Allan D. R., Bell T.* Polymorphism in cyclohexanol // *Acta Cryst.* 2008. Vol. 64. P. 573–582.
9. *Элькин П. М., Шальнова Т. А., Гордеев И. И.* Структурно-динамические модели конформеров циклогексанола // *Прикаспийский журнал : управление и высокие технологии.* 2010. Т. 11, № 3. С. 41–45.
10. *Кон В.* Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности // *Успехи физ. наук.* 2002. Т. 172, № 3. С. 336–348.
11. *Попл Дж. А.* Квантово-химические модели // *Успехи физ. наук.* 2002. Т. 172, № 3. С. 349–356.
12. *Frisch J., Trucks G. W., Schlegel H. B. et al.* Gaussian 03, Revision B.03 / Gaussian Inc. Pittsburgh, 2003. 302 p.

УДК 621.382:621.391.822

ОСНОВНЫЕ ВИДЫ ШУМОВ В ЭЛЕКТРОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРАХ

К. А. Гребенюк

Саратовский государственный университет
E-mail: Konstantinag@yandex.ru

Проведен анализ основных подходов к классификации внутренних электрических шумов в электронных полупроводниковых приборах. Представлены классификации электрических шумов по каждому из выделенных признаков.

Ключевые слова: тепловой шум, фликкер-шум, гауссовский шум, белый шум, частотный шум.

Main Types of Noises in Electronic Semiconductor Devices

К. А. Grebenyuk

Main approaches to classification of internal electric noises in electronic semiconductor devices have been analyzed. According to each approach classification of electric noises has been given.

Key words: thermal noise, flicker noise, Gaussian noise, white noise, frequency noise.

Проблема классификации электрических шумов

Электрическими шумами называют беспорядочные изменения тока и напряжения в электронных приборах. Именно электрические шумы определяют в электронике пределы точности измерений, а также минимальные величины сигналов, которые могут быть обработаны [1].

В научной литературе встречаются десятки названий видов электрических шумов. Чтобы ориентироваться в таком многообразии видов необходимо в каждом случае уметь четко определить, по какому признаку проводится классификация. Однако из-за неоднозначности терминологии сделать это не всегда просто, поэтому актуальной задачей является проведение обзора основных подходов к классификации электрических шумов.

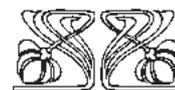
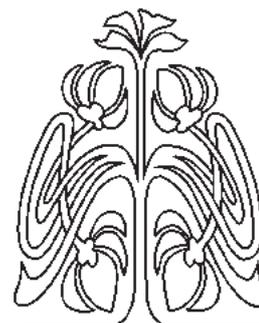
Целью данной работы стали выявление и анализ основных подходов к классификации внутренних электрических шумов в электронных полупроводниковых приборах. С этой целью был проведен анализ работ [1–20], в результате которого было выделено четыре основных подхода, применяемых к классификации шумов в полупроводниках. Сформулируем сущность каждого из этих подходов.

Классификация по физической природе и механизму возникновения

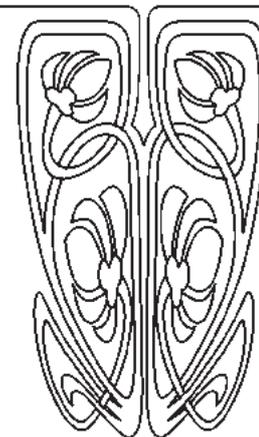
С точки зрения физической природы выделяют [1–5]: тепловой шум (шум Джонсона [3]); дробовой шум; фликкер-шум (шум мерцания [4], избыточный шум [3, 4], шум типа $1/f$).

Тепловой шум обусловлен хаотическим движением носителей тока и присутствует в любом элементе при ненулевой абсолютной температуре. Тепловой шум является неуменьшаемым видом шума [3].

Дробовой шум наблюдается при дрейфе носителей тока под действием приложенного к полупроводнику электрического поля и обусловлен дискретностью электрического заряда, а также хао-



МЕТОДИЧЕСКИЙ
ОТДЕЛ





тичностью процессов генерации-рекомбинации основных носителей заряда в полупроводнике [3, 4].

Фликкер-шум наблюдается при прохождении через полупроводник постоянного тока, обусловлен флуктуациями плотности носителей тока [2] и может значительно превышать уровень теплового и дробового шума [4].

В работе [2, с. 10] высказывается мнение, что названия «дробовой шум» и «фликкер-шум» «... были введены на более или менее эвристической основе без должной связи с физическими причинами, порождающими шум» и предлагается деление на шум генерации-рекомбинации, диффузионный шум и модуляционный шум как в большей степени соответствующее физическим процессам, происходящим внутри полупроводника.

Классификация по поведению спектральной плотности и плотности вероятности

На основе спектрального и вероятностного анализа выделяют белый/цветной шум, узкополосный/широкополосный шум, гауссовский шум, розовый шум.

Белый шум – это шум, в спектре которого энергия равномерно распределена по всем частотам, как в спектре белого света [6]. Гауссовским называется шум, который имеет нулевое среднее значение и гауссову плотность вероятности [7].

Термин «белый шум» относится к распределению энергии, а термин «гауссовский шум» – к распределению плотности вероятности. Например, тепловой шум является еще и гауссовским белым шумом, а дробовой шум является белым в области нижних частот [2].

Розовым шумом называется шум, спектральная плотность которого описывается законом вида $1/f$ (f -частота) [3].

Шум со спектром вида $1/f$ называется еще фликкер-шумом, но если термин «розовый шум» относится только к виду спектра, то термин «фликкер-шум» относится также к физической природе шума.

Классификация с точки зрения теории случайных процессов

Шумы являются случайными процессами, и к ним применяется классификация случайных процессов. В рассмотренной литературе чаще всего упоминается стационарность и эргодичность шумов. Многие шумы в полупроводниковых материалах и приборах (тепловой, дробовой, генерации-рекомбинации, диффузионный и другие) можно рассматривать как стационарные и эргоди-

ческие процессы [1]. Но есть и исключения. Например, фликкер-шум не является стационарным процессом [1].

Классификация по внешнему проявлению

В работах по снижению шумов генераторов электрических сигналов [8–20] три рассмотренных выше способа классификации применяются редко. Вместо этого используется классификация электрических шумов по внешнему проявлению с выделением амплитудного, частотного и фазового шумов, под которыми подразумевают, соответственно, беспорядочные изменения амплитуды, частоты и фазы сигнала. Поскольку любому изменению частоты сопутствует изменение фазы, часто наряду с амплитудным рассматривают только частотный или только фазовый шум [8].

Выводы

Проведенный анализ показал, что в научной литературе существуют четыре основных подхода к классификации электрических шумов в полупроводниках:

- 1) классификация по физической природе и механизму возникновения;
- 2) классификация по поведению спектральной плотности и плотности вероятности;
- 3) классификация с точки зрения теории случайных процессов;
- 4) классификация по внешнему проявлению.

В случаях, когда предметом исследования являются сами шумы и причины их возникновения, используют классификации по первым трем признакам. В случаях, когда предметом исследования является снижение уровня шумов в электронных приборах, используют классификацию шумов по внешнему проявлению.

Список литературы

1. Ван-дер-Зил А. Шум. Источники, описание, измерение. М. : Сов. радио, 1973. 229 с.
2. Ван-дер-Зил А. Флуктуационные явления в полупроводниках. М. : Изд-во иностр. лит., 1961. 232 с.
3. Хоровиц П., Хилл У. Искусство схемотехники. М. : Мир, 2003. 704 с.
4. Ван-дер-Зил А. Флуктуации в радиотехнике и физике. М. ; Л. : Госэнергоиздат, 1958. 296 с.
5. Шумы в электронных приборах / под ред. Л. Д. Смуглина, Г. А. Хауса. М. ; Л. : Энергия, 1964. 484 с.
6. Хорстхемке В., Лефевр Р. Индуцированные шумом переходы : теория и применение в физике, химии и биологии. М. : Мир, 1987. 400 с.
7. Хованова Н. А., Хованов И. А. Методы анализа временных рядов. Саратов : Изд-во Гос. учеб.-науч. центра «Колледж», 2001. 120 с.



8. Корнилов С. А., Савинский В. А., Уман С. Д. Шумы клистронных генераторов малой мощности. М. : Сов. радио, 1972.
9. Шумовые свойства ламп обратной волны со скрещенными полями / А. А. Игнатъев, М. Н. Куликов, В. С. Стальмахов, А. С. Шаповалов. Саратов : Изд-во Саратов. ун-та, 1983. 92 с.
10. Бычков С. И., Буренин Н. И., Сафаров Р. Т. Стабилизация частоты генераторов СВЧ. М. : Сов. радио, 1962. 376 с.
11. Голант М. Б., Бобровский Ю. Л. Генераторы СВЧ малой мощности : Вопросы оптимизации параметров. М. : Сов. радио, 1977. 336 с.
12. Гольдман С. Гармонический анализ, модуляция и шумы. М. : Изд-во иностр. лит-ры, 1951. 408 с.
13. Букингом М. Шумы в электронных приборах и системах. М. : Мир, 1986. 398 с.
14. Гусев А. П., Каплун З. Ф. Экспериментальное исследование высокочастотных кварцевых генераторов // Электронная техника. Сер. 1. Электроника СВЧ. 1989. Вып. 9. С. 14–17.
15. Зырин С. С., Котов А. С. Высокостабильный сверхмалошумящий транзисторный СВЧ-генератор // Электронная техника. Сер. 1. Электроника СВЧ. 1991. Вып. 7. С. 26–30.
16. Гвоздев Б. И., Ештокин В. Н., Зырин С. С., Пелевин А. И. Частотные шумы твердотельных генераторов в режимах комбинированной параметрической и электрической стабилизации частоты // Электронная техника. Сер. 1. Электроника СВЧ. 1980. Вып. 4. С. 24–28.
17. Зырин С. С., Мишулин Л. Е., Котов А. С., Карпенко В. П., Котовщиков С. Г. Малошумящий СВЧ-генератор с компенсацией неустойчивости частоты с помощью цифрового устройства // Электронная техника. Сер. 1. Электроника СВЧ. 1989. Вып. 4. С. 6–9.
18. Ри-Бак-Сон. Исследование низкочастотного автогенератора СВЧ // Электронная техника. Сер. 1. Электроника СВЧ. 1983. Вып. 5. С. 26–27.
19. Минаев М. И. Автоматическая подстройка частоты мощных генераторов СВЧ с внешней дополнительной обратной связью // Электронная техника. Сер. 1. Электроника СВЧ. 1983. Вып. 4. С. 52–53.
20. Иванов Е. Н., Царякин Д. П. Малошумящий автогенератор 8-мм диапазона // Электронная техника. Сер. 1. Электроника СВЧ. 1991. Вып. 7. С. 17–18.



ХРОНИКА

УДК 535.1:372.853+1.113

КРУГЛЫЙ СТОЛ

«Человек и свет в естественно-научной и художественной картине мира»

Модератор: Медведев Борис Абрамович

доцент кафедры общей физики СГУ, канд. физ.-мат. наук

E-mail: bmedvedev@yandex.ru

Представлена работа круглого стола «Человек и свет в естественно-научной и художественной картине мира» на секции по истории, методологии и философии оптического образования XV Международной школы для молодых ученых и студентов по оптике, лазерной физике и биофотонике, прошедшей в Саратове 27–30 сентября 2011 года.

Ключевые слова: оптическое образование, методология, философия.

Round Table «Man and Light in Natural and Art Treatment of the Universe»

Moderator Boris. A. Medvedev

Represented work of Round Table «Man and light in natural and treatment of the universe» on Workshop – History, Methodology and Philosophy of the Optical Education of the XV International School for Young Scientists and Students on Optics, Laser Physics and Biophotonics, which was of September 27–30, 2011, Saratov, Russia.

Key words: optical education, methodology, philosophy.

Участники:

Заведующий кафедрой геометрии Саратовского государственного университета (СГУ), профессор, д-р физ.-мат. наук **Розен Виктор Владимирович;**

Профессор кафедры оптики и биофотоники СГУ, д-р физ.-мат. наук **Рябухо Владимир Петрович;**

Профессор кафедры «Математика и моделирование» Саратовского государственного технического университета (СГТУ), д-р физ.-мат. наук **Паршков Олег Михайлович;**

Профессор кафедры философии СГТУ, д-р филос. наук **Дуплинская Юлия Михайловна;**

Профессор кафедры физики полупроводников СГУ, д-р физ.-мат. наук **Роках Александр Григорьевич;**

Профессор кафедры оптики и биофотоники СГУ, д-р физ.-мат. наук **Кочубей Вячеслав Иванович;**

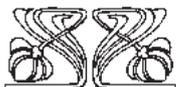
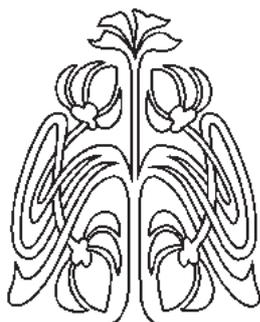
Доцент кафедры геометрии СГУ, канд. физ.-мат. наук **Шмельфениг Владимир Петрович;**

Аспирант кафедры оптики и биофотоники СГУ, **Савонин Сергей Александрович.**

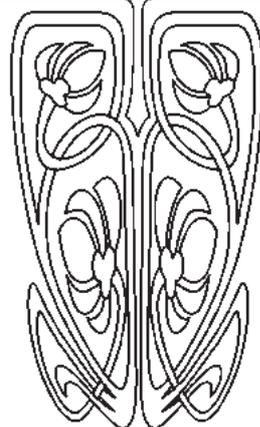
Б. А. Медведев

XXI ВЕК: ПРОБЛЕМАТИКА ПРОСВЕЩЕНИЯ В РАБОТЕ НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

XXI век: техногенная цивилизация на наших глазах превращается в миф прогресса и благополучия. Глобальный духовный кризис, подвергая угрозе макроэкономические и геополитические интересы субъектов мирового сообщества, бросает вызов всем си-



ПРИЛОЖЕНИЯ





стемам современного образования. В связи с этим фундаментальная проблема университетского образования в области естественных наук состоит уже не только в формировании профессионала, но и в воспитании гражданина – подготовке специалистов с развитым чувством ответственности за результаты научных исследований, с культурой потребностей и нравственно ориентированным, общественным поведением. Актуальность проблемы – в поиске идей, методологии и систем образования, способных противостоять духовной деградации человечества.

Но возможна ли конвергенция процессов образования и воспитания в рамках Высшей школы? В позитивном ответе на этот вопрос актуально обратиться к ранним российским образовательным традициям и представлениям о просвещении. По В. Далю: «науки образуют ум и знания, но не всегда нрав и сердце. Просвещение – свет науки и разума, согреваемый чистой нравственностью». Но есть ли место этому идеалу Просвещения в современном мире?

Исторически проблематика Просвещения, начиная с XVIII века, не перестаёт быть актуальной, определяя своим содержанием степень совершенности человечества на каждом из последующих этапов его развития. Ключевым моментам анализа и критики Просвещения были посвящены известные работы Канта, Фуко, Хоркхаймера и Адорно. Символично, что, по мнению М. Фуко, «...современная философия есть попытка найти ответ на вопрос, так неосторожно брошенный два века назад: что такое Просвещение?». По оценке Просвещения, данной Хоркхаймером и Адорно, «то, что не желает соответствовать мерилу исчислимости и выгоды, считается Просвещением подозрительным». Соглашаясь с этим, можно констатировать: символ Просвещения превратился в товарную марку, бренд высокотехнологичной цивилизации. Человечество отступило еще дальше от своего совершенства, даже по сравнению с XVIII веком. Глобальный духовный кризис настолько поразила современную цивилизацию, что, если выразиться словами Луи де Бройля, «проблема заключается в том, как нам пережить свои собственные открытия»? Но каким образом можно «переместить» Просвещение из плоскости социума без морали в пространство с осями не только власти и знания, но и этики? Нам представляется, что вопросы Просвещения в XXI веке должны ставиться, прежде всего, в контексте гамлетовского вопроса, обращенного к нашей цивилизации. С актуализацией нравственного

характера Просвещения и проблемы гуманизации высшего образования миссия Просвещения в XXI веке полагается в обращении к совести человека как нравственному инстинкту, к совести, толкуемой В. Далем как «невольная любовь к добру и истине».

Миссия Просвещения в XXI веке представляется в инициировании дискуссии под знаком смысла жизни – дискуссии по предельным вопросам человеческого бытия, восходящего в гносеологии к метафизике нравственных понятий «Кто мы?..» и «Куда мы идем?».

В соответствие с этой миссией Просвещение, по мнению автора, должно следовать следующим принципам.

1. *Принцип Просвещения языком искусства.* Рациональность сужает наше представление о реальности, выраженной только в виде логических структур. Нередко логика не имеет никакого отношения к жизни. «Прекрасное выше всякой логической категории» (А. Ф. Лосев). По этой причине художественное познание ближе к постижению истины. Просвещение языком искусства – в средстве выражения мысли через образ, способный донести истину до нравственного чувства. «Красота спасет мир» (Ф. М. Достоевский).

2. *Принцип неопределенности в познании.* Будущее время притягательно для креативной личности в силу индетерминированности его событий. Индетерминизм физики микро- и макромира и принципиальная неточность, присущая гуманитарным наукам, сближают естественнонаучное и художественное познание. Природа ищет выхода из лабиринта своих собственных законов, и в этом – её непрерываемое творчество. Бытие не только противится завершенности, но и его образам в нашем мышлении. Чем ближе мы в поисках к истине, тем больше она маскируется. Быть может, и потому,

*...что, близясь к чаемому страстно,
Наш ум к такой нисходит глубине,
Что память вслед за ним идти не властна.*
(Данте)

Постулируем: чем ближе к сущности, тем дальше она от дефиниций.

3. *Принцип культуры познания:* если креативность есть свобода давать бытие, то она есть риск. В условиях глобального духовного кризиса креативность есть риск стихии необузданных открытий. И здесь актуален вопрос о мере познания. В этом контексте великое «Познай самого себя» отбрасывает тень соблазна лишиться жизни её тайны. В безудержности познания – необу-



зданность человеческих страстей. У Протагора «человек есть мера всех вещей...», но не предполагает ли это применительно к познанию бытия требование некоторой сдержанности, умеренности человека в его исследованиях? Здесь вместе с сентенцией Сократа «ничего сверх меры» вспоминается и другое: «может ли мерить вещи тот, у кого нет мерки даже для себя?» (Плиний Старший). Но если метафизическое по своей природе – нравственное сознание, т.е. совесть есть моральное самоограничение, то разве это не должно касаться как мышления, так и самого познания? Постулируем: культура познания – в мере его самоограничения. И если принцип культуры познания в своих крайних проявлениях либо возвышает познание до искусства созерцания, либо низводит его до уровня логических абстракций, то не включается ли тем самым ментальность Востока и Запада в процессы познания единой картины мира?

4. *Принцип сохранения в Просвещении феномена культурной памяти.* Суть Просвещения как искусства – в одухотворении, или в творческом изменении протяженности человеческой души. Просвещение – в дополнении «Я» - концепции, отнесенной к психологии креативной личности, принятием тезиса: ««Я» – расширяющаяся вселенная, как интериоризация космоса в соответствии с представлением Плотина, согласно которому если мир мог стать еще большим, чем он есть, то и тогда, у души хватило бы сил на все, потому что и тогда он весь содержался бы во всей душе»¹. Просвещение одухотворяет прошлое и будущее время. Возьмём же в кавычки слова Прошлое и Будущее: они не имеют к природе никакого отношения. Разбегающаяся вселенная притягивается к «Я». Но не является ли тогда заблуждением приписывать прошлому времени пассивность? Разве память не требовательна? Разве она не вызывает? Мышление обязано припоминанию, как память – сердцу. Мышление, по Хайдеггеру, есть благодарность и, следовательно, ответственность перед былым и грядущим. Рассматривая феномен культурной памяти в контексте интерпретации категории присутствия М. Хайдеггера, можно говорить о присутствии отсутствующих как о сопричастности прошлого

и будущего к настоящему. Мы все в соавторстве с ушедшими и с теми, кто придёт. «Мы – воздухоплаватель ума» (Ф. Ницше).

Представленные принципы Просвещения не могут претендовать на полноту. Тем не менее, они, по мнению автора, вписываются в программы гуманитаризации естественно-научного знания. Конкретно: проект программы гуманитаризации физического образования на физическом факультете университета реализуется нами расширением формата образовательного государственного стандарта дисциплины «История и методология физики» за счет введения нового лекционного курса «Физика в хронике мировой культуры»². Содержание лекций, наряду с хронологией открытий в области физики и достижений в области мировой культуры, включало в себя постановку вопросов о развитии физической науки и этических основаниях научного знания, о глобальных проблемах цивилизации и общечеловеческих ценностях, декларируемых ЮНЕСКО.

Образовательно-информационные технологии обеспечивались постоянным использованием мультимедийной техники и проведением наряду с лекционными занятиями интерактивных форм обучения, включающих обсуждение студенческих рефератов и презентаций на темы из циклов: «Гуманистический аспект жизни и творчества великих отечественных и зарубежных физиков», «Жизнь и творчество великих художников, скульпторов, архитекторов, композиторов, писателей и поэтов».

Реализация представленного выше проекта гуманитаризации физического образования, по нашему мнению, будет способствовать: формированию общекультурных компетенций студентов, восстановлению органического единства образования и воспитания в учебном процессе, противостоянию процессам коммерциализации духовной жизни общества, аксиологическому подходу к физической науке.

И в заключение: позитивный ответ на гамлетовский вопрос, обращенный к техногенной цивилизации на пороге антропологической катастрофы, заключается для каждого человека, для гражданина только в одном – «в мужестве быть» (по Паулю Тиллиху), в мужестве, говоря словами

¹ Медведев Б. А. Философские проблемы образования ума и сердца // Национальная философия в контексте современных глобальных процессов : материалы междунар. науч. конф. Минск, 16–17 декабря 2010 / НАН Беларуси, Ин-т философии. Минск, 2011. С. 592–594.

² Медведев Б. А. «Физика в хронике мировой культуры» – новый курс для бакалавров физического факультета классического университета // Инновационные процессы в современном педагогическом образовании и риски : сб. науч. тр. Восьмой Междунар. заочной науч.-метод. конф. Саратов, 2012. С. 179–185.



М. Фуко, «работы с нашими собственными пределами – терпеливого труда, придающего форму нетерпению свободы». Обращаясь к представлениям в «Исповеди» Августина о настоящем прошлом и настоящем будущем времени, можно сказать: Просвещение – в мужестве переживания человеком настоящего прошлого как памяти и в мужестве преодоления настоящего будущего как апокалиптического ожидания.

Отождествляя для выпускников *Alma mater* смысл жизни с творчеством, можно сказать: Просвещение есть страсть утверждения нашего существования под знаком смысла жизни, доказательства нашего присутствия как события, которое может быть только проявлением любви и творчества. «Где нет любви, там нет и истины» (Л. Фейербах).

А. Г. Роках
О ГУМАНИТАРНОМ БАЗИСЕ
ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК
И ОБРАЗОВАНИЯ

В этом докладе мы проводим водораздел между естественными и гуманитарными науками по линии внешний – внутренний мир человека. Как известно, естественные науки используют в качестве своего инструментария натурный эксперимент и математику. Гуманитарные науки пользуются формальной логикой (которая необходима и в естественных науках) и мысленное моделирование, включая и мысленный эксперимент. Количественные соотношения мало используются в гуманитарных науках, под которыми я понимаю в первую очередь философию.

Это коррелирует с тем обстоятельством, что во внутреннем мире человека практически не известны количественные соотношения, что хорошо понимают, в частности, в религии, которая всегда обращена к внутреннему миру человека и почти не апеллирует к цифрам.

Итак, в гуманитарных науках в качестве основного инструмента используется формальная логика, что достаточно хорошо видно на примере философии, использующей только качественные рассуждения. Как пример, вспомним апорию древнегреческого философа Зенона «Ахиллес и черепаха», согласно которой самый быстрый из людей не догонит самого медленного животного, дожившего до современности как неразрешимый парадокс, тем не менее, легко преодолеваемый в естествознании (механика). В самом деле, стрела догоняет свою добычу, снаряд или ракета сбивает самолет. Конструктивный подход естествознания

и техники освобождает не только от ненужных словопрений, но и выводит из своего рода познавательного тупика.

Переходим непосредственно к теме статьи. Основательный набор специфических инструментов, используемый в естественных науках, не освобождает их от применения формальной логики, которая со времен Евклида используется также в математике и которая возникла как аппарат для разрешения противоречий. Особенно велика роль формальной логики в обучении, где наряду с погружением в научную специфику предмета присутствует и элемент популяризации, т.е. использование неспецифической, «общечеловеческой» аргументации.

Задумаемся, однако, является ли формальная логика обязательной при обращении к внутреннему миру человека? Думается, что нет. Особенно за пределами поля обучения. Об этом говорит погружение в глубины бессознательного с помощью медитации, гипноза и т. п. Равно как и феномен интуиции. Там, по-видимому, действуют пралогические формы, связанные с непосредственным видением, непосредственным, не рассуждающим усмотрением сущности. Впрочем, вопрос требует более детального анализа, чем это можно сделать в короткой заметке. Отметим только, что для науки характерен рациональный подход, а психика опирается и на иррациональный фактор, проявляющийся, в частности, в феномене интуиции, из которой черпает свои достижения рациональная наука.

В. В. Розен
ОТ МЕХАНИСТИЧЕСКОЙ КАРТИНЫ МИРА
К ПАРАДИГМЕ ЦЕЛОСТНОСТИ

Сложившаяся к концу XIX века *механистическая картина мира (механицизм)* уподобляла вселенную гигантской детерминированной машине, в которой все происходящие в ней явления представляют собой цепь причин и следствий. Концепция детерминизма (однозначной связи между причиной и следствием) базируется на общепризнанном философском *принципе причинности*: всё происходящее в мире имеет свою причину и приводит к определенному результату. Детерминизм не оставляет места случаю: не существует случайности, которая не может быть понята как необходимость.

Крушение механистической картины мира происходило постепенно. Начало этому было положено работами в области электромагнетизма и связано с именами М. Фарадея и Дж. Максвелла.



Какова же природа электромагнетизма? Фарадей и Максвелл вначале пытались все электромагнитные явления свести к механическим напряжениям в гипотетической среде – эфире, который, как тогда считалось, «заполняет» всё пространство. Несмотря на настойчивые попытки, такая механическая трактовка не увенчалась успехом. Постепенно они пришли к понятию *поля*, совершенно новому для того времени элементу физической реальности.

Электромагнитное поле представляет собой особую форму материи, не подчиняющуюся законам механики. Суммарно это проявляется в следующем.

1. Механические взаимодействия подчиняются уравнениям Ньютона, электромагнитные – уравнениям Максвелла.

2. Если в классической физике взаимодействие тел происходит без участия среды, то в теории электромагнетизма именно среда является носителем процессов, передающих взаимодействие.

3. *Концепция дальнего действия*, господствующая в миропонимании со времён Ньютона, сменилась *концепцией ближнего действия*. Взамен «мгновенного действия силы через пустоту и без посредников» пришло понимание действия силы через среду, происходящее не мгновенно, а с конечной скоростью.

Идеи Фарадея и Максвелла подготовили почву для крушения механистической картины мира. Это, в свою очередь, явилось своеобразной прелюдией к обнаружению свойств микромира, законы которого разительно отличаются от действующих в макромире.

Квантовая теория привела к новому взгляду на материю, состоящему в том, что субатомные частицы – это не отдельно взятые «крупницы вещества», а агенты энергетического взаимодействия с другими частицами. Каждая частица принимает участие в своеобразном «танце» – постоянных перемещениях, столкновениях, взаимопревращениях и иных взаимодействиях с другими частицами, причём все эти процессы сопровождаются пульсирующим обменом энергии. Поэтому невозможно понять свойства одной отдельно взятой частицы, изолировав её от остального мира. В рамках такого подхода вся вселенная рассматривается как подвижная сеть взаимосвязанных событий.

Итак, существовавшее до начала XX века представление о вселенной как детерминированной машине, подчинённой логике причины и следствия, сменилось картиной взаимосвязанного динамического целого, где не только свойства

целого определяются свойствами частей, но и свойства каждой части зависят от целого (так называемая *парадигма целостности*).

Л. Я. Солодовниченко, О. В. Шимельфениг
СИНТЕЗ СВЕТА, ЦВЕТА, МУЗЫКИ И ПОЭЗИИ
В ТВОРЧЕСТВЕ АВАНГАРДА XX ВЕКА

Вселенная представляется мне большой симфонией; люди как ноты...

М. К. Чюрленис

XX век стал временем интеграции различных областей научного знания и искусства. Одним из проявлений такой интеграции явилась светомузыка (цветомузыка), формирование которой началось многими столетиями ранее и привело к грандиозным открытиям современности. В течение XVII–XIX веков над проблемой синтеза звука и света работали физики и психологи, изобретатели и конструкторы, художники и музыканты.

В древнегреческом искусстве проблема синтеза света и звука была разрешена в театре, где драматическое действие, пение, движение, а также эффекты освещения подчинялись ритмо-пространственной организации. Мало того, философская мысль Греции оставила некоторые формулировки на эту тему. Так, Аристотель (384–322 гг. до н. э.) писал в трактате «О душе»: «Цвета по приятности их соответствия могут соотноситься между собой подобно музыкальным созвучиям и быть взаимно пропорциональными».

Существенные дополнения в развитие проблемы вносит эпоха Возрождения: время гениальных изысканий как художественных, так и естественно-научных. В конце XVI века в Милане, по свидетельству очевидцев, была изобретена музыка цвета. Д. Арчимбальдо, живописец и музыкант, проигрывая своим ученикам определенные тональности, одновременно показывал разноцветные карточки, соответствующие, по его мнению, звучанию данного конкретного лада. Маловероятно, чтобы Арчимбальдо имел в виду новое искусство, но, тем не менее, его теория обучения живописи через звук явилась прообразом цветомузыки.

В начале XVIII века Ньютон искал связь между солнечным спектром и музыкальной октавой, сопоставляя длины разноцветных участков спектра и частоту колебаний звуков гаммы. По Ньютону, нота «до» – красная, «ре» – фиолетовая, «ми» – синяя, «фа» – голубая, «соль» – зеленая, «ля» – желтая, «си» – оранжевая. Ясно, что ученый подходил к проблеме чисто механически, но он дал точное установление высоты, или температуру



цветового ряда. Таким образом, XVII век стал веком научного подхода к светомузыке. Дальнейшее развитие светомузыки было связано с именами: А. Кирхера, который изобрел первый в мире проекционный аппарат, включающий и источник света, и диапозитив, и оптическую систему, и экран; Л. Б. Кастеля, выдвинувшего идею цветовой музыки как независимого искусства (XVIII век) и написавшего работу «Клавесин для глаз».

Со второй половины XIX века проблема синтеза зрительного и слухового восприятия заинтересовала и психологов, изучавших явление так называемого цветного слуха у ряда музыкантов. С конца XIX века начинается светомузыкальное концертное выступление в европейских странах и США, где в 1877 году американец Б. Бишоп поместил на фисгармонию небольшой экран из матового стекла, на который через разноцветные фильтры падал свет. Английский художник и изобретатель А. Римингтон выдвинул идею музыки цвета, построив цветовой орган в 1893 году. В своих исследованиях Римингтон опирался на физическую параллель между звуком и цветом, но не отвергал и свободу выбора, экспериментирование, полагая, что каждый исполнитель может думать по-своему. Одновременно с Римингтоном начал свои исследования в Австралии А. Б. Гектор, а в США – Т. Вилфред, которого интересовала музыка цвета без звукового сопровождения как самостоятельный вид художественного творчества.

В России основоположниками светомузыкального искусства являются композиторы А. Н. Скрябин (1872–1915) и Н. А. Римский-Корсаков (1844–1908). Скрябин создает первое в музыкальном искусстве произведение – симфоническую поэму «Прометей» (1909–1910), в которой партия цвета выступает на равных с инструментальными партиями и выписана на отдельном нотном стане музыкальной партитуры. В русском искусстве начала века образ огня часто ассоциируется с заревом, красным цветом, приобретает значение приближающегося буйства стихии, символа мирового пожара («заревое в красной пыли» Блока, «гимн огню» Бальмонта, «пламенное чудо» Ходасевича). Поэма Скрябина может быть соотнесена с рядом художественных явлений XX века, но и на этом фоне ее выделяет необычайная грандиозность и возвышенность образов.

Таким же авангардным художественным явлением было творчество В. Я. Брюсова. Его роль в русском символизме и вообще в русском модернизме очень значительна. Он пользовался

большим авторитетом как среди сверстников-символистов, так и среди акмеистов (Николай Гумилёв, Зенкевич, Мандельштам) и футуристов (Пастернак, Шершеневич и др.), повлияв на творчество целого поколения. Брюсов также экспериментировал и в области музыкальной архитектуры стиха (сонаты «Обряд ночи», «Возвращение»; симфонии «Патетическая», «Мы – дети Севера»).

В ряду выдающихся явлений авангарда XX века стоит творчество гениального литовского композитора-художника, «поэта звёздных ритмов» М. К. Чюрлёниса, который также обладал цветным слухом. Он синтезировал в своём творчестве свет, цвет, музыку и поэзию, явившись не только основоположником литовской музыки (первая литовская опера «Юрате», первые симфонические, камерные, органые и фортепианные произведения связаны с его именем; он, так же, как в России Чайковский, Римский-Корсаков, является выдающимся собирателем литовских народных песен). Он является автором графических работ (техника флуорофорты – травлёное стекло, иголка), основоположником музыкальной живописи, передавая музыкальный ряд в цветовых образах, его картины носят музыкальные названия («Прелюд», «Фуга», «Соната весны», «Соната моря» и т.д.), передавая цветом даже структуру музыкального произведения. Перу Чюрлёниса принадлежат поэтические фрагменты, напоминающие стихотворения в прозе.

Этот авангардный трэнд в культуре блестяще продолжил наш современник, «просветитель космического века», член-корреспондент Академии наук Татарстана, профессор, доктор философских наук Булат Махмутович Галеев (1940–2009) – пионер светомузыки, автор большинства технических и художественных проектов, лучший эксперт в области светомузыки в России. Все знают, что его земляк Д. И. Менделеев, уроженец Казанской губернии, создал периодическую систему химических элементов, увековечившую его имя. Но мало кому известно, что руководителем студенческого конструкторского бюро «Прометей» Б. М. Галеевым создана своя «периодическая система», только на этот раз речь идет о «системе искусств». Конечно, она, быть может, не такая точная, как у Менделеева, но и сама эстетика относится к разряду не самых точных наук. Однако, судя по реакции ученых разных стран, предложенная Галеевым систематизация достаточно убедительна и, главное, продуктивна. Он защитил уникальную диссертацию



по синестезии – межчувственной ассоциации. Казанский коллектив «Прометей» с 1962 года прошел путь от самостоятельного студенческого бюро до научно-исследовательского института экспериментальной эстетики Казанского государственного технического университета им. А. Н. Туполева и Академии наук Республики Татарстан. Имя «Прометей», ставшее казанским брендом, неразрывно связано с его бессменным руководителем – Б. М. Галеевым, его видеоинсталляции демонстрировались на крупнейших фестивалях экспериментального искусства, а светомузыкальные кинофильмы – признанная классика авангардного кино («Светомузыка» («Маленький триптих») на музыку Г. Свиридова, «Прометей» на музыку А. Скрябина, «Вечное движение» с использованием музыки Э. Вареза и др.).

Вся эта выдающаяся плеяда творцов авангарда дала новый мощный импульс интеграционным процессам не только в художественном, но и в научном познании XX века.

Ю. М. Дуплинская

**«ОСТЫВАНИЕ РЕАЛЬНОСТИ»
В АСПЕКТЕ СЕМИОТИКИ**

Современная наука (как, впрочем, и вся современная культура) вовлечена в лавинообразно нарастающий процесс, который Э. Гуссерль охарактеризовал как *сокрытие смысла в процессе подмены смысла методом*. Или *подмены смысла техникой*, что почти то же самое: понятие «метод» в известном смысле аналогично понятию «техника», если технику понимать в широком смысле слова как всякий стандартизированный способ достижения результата; повторяемость, не опосредствованную рефлексией. Повсюду в современной культуре вопросы «зачем», «что» и «почему» подменяются одним вопросом – вопросом «как»: как это сделать? Подробнее эту тему развивает Х. Ортега-и-Гассет: подмена смысла методом тотальным образом охватывает все сферы современного общества. Здесь и работник материального производства, который знает, как производить те или иные операции, но не видит конечного продукта своего труда. Здесь и солдат, которому достаточно держать в фокусе внимания лишь технологии убийства («как»), но при этом можно не видеть результата – убитых людей. Здесь, добавим мы, и современный студент, который знает, как скомбинировать вполне качественный текст на основе электронных носителей информации, ухитряясь при этом со-

хранять полную неосведомленность по поводу идей, содержащихся в этом тексте.

Аналогичные процессы совершаются и в современном естествознании вообще и в фундаментальной физике в особенности. Ответы на вопрос: «что есть это» (к примеру, электромагнитное или гравитационное поле; поле сильного или слабого взаимодействия и т. д.) – фактически подменяются, опять же, вопросом, как вычислить изменение некоторых параметров объекта в зависимости от изменения других его параметров. К «физической реальности» вполне применимо такое философское понятие, как *превращенная форма*. «Физическая реальность», по сути дела, является превращенной формой методов нахождения групп симметрий в системах уравнений. Иными словами, «что» здесь чаще всего является лишь превращенной формой «как».

Дальнейшее развитие эта тема получает в концепции «hot»-знаков («горячие знаки») и «cool»-знаков («холодные знаки») Маклюэна, Рисмена и Бодрийара. Забавная параллель! Космология ведет речь об остывании физической Вселенной в процессе ее эволюции после Большого взрыва, а семиотика ведет речь об остывании знаковых систем. А поскольку физические теории тоже являются разновидностью знаковых систем, то можно вести речь об «остывании физической реальности» с точки зрения семиотики.

Итак, в чем заключается различие между «hot» (горячими) и «cool» (холодными) знаками? Если «hot»-знак отсылает к предметно выраженному значению (референциальная стадия знака), то в «cool»-знаках заданы только правила перехода от одной системы знаков к другой системе. Знак здесь имеет чисто реляционное значение. Сегодня нас всюду обступают «cool»-знаки. Проще всего различие между «hot» и «cool» в знаковой сфере можно пояснить на примере эволюции денежных знаков. Примером «hot»-знака могут быть деньги в форме золотых монет, т. е. денежный знак, у которого в наличии не только меновая, но и потребительная стоимость. Примером «cool»-знака могут быть бумажные деньги, значение которых сводится только к меновой стоимости, т. е. к способности обмениваться на другие знаки. Остывание семиотической вселенной можно проиллюстрировать, в частности, на примере эволюции денег: от монет к бумажным деньгам, а от них – к различным формам безналичного расчета.

В современной фундаментальной физике новые теории создаются, как правило, при помо-



щи «cool», а не «hot»-знаков. Чаще всего, вместо предметно выраженного значения, здесь заданы только правила преобразования одних знаков в другие; одних уравнений в другие уравнения. Не напрашивается ли здесь аналогия с безналичным расчетом в обращении денежных знаков, сопровождающимся неизбежной инфляцией, в данном случае – знания?

О. М. Паршков

СВЕТ И ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА XX ВЕКА

Всем нам хорошо известно, как изучение свойств света привело в начале XX века к революционным преобразованиям физической науки, к открытию законов квантовой механики, управляющей жизнью микромира. Имена творцов-первооткрывателей квантовой теории – Эйнштейна, Гейзенберга, Шредингера, Бора, Дирака – вошли в летопись истории физики. Своё прошлогоднее сообщение на нашей секции я посвятил роли света в формировании воззрений этих великих учёных. В 30-х годах XX века период создания квантовой теории, как тогда казалось, был завершён созданием Дираком релятивистской теории электрона.

Но свет не был бы светом, если не поставил бы новые загадки. Оказалось, что главная компонента спектра водорода представляет собой не дублет, как предсказывала теория Дирака, а триплет. Это обстоятельство было подтверждено экспериментами Лэмба. Эксперименты Раби показали, что магнитный момент электрона отличается от предсказываемого релятивистской теорией Дирака. Это и ряд других соображений потребовали кардинальных изменений в описании релятивистских явлений квантовой физики.

Решение очередной проблемы, поставленной светом, привело к созданию новой релятивистской квантовой теории, названной квантовой электродинамикой. Основоположниками КЭД – так сокращённо именуется эта теория, стали Швингер, Фейнман и Томанага, получившие за свой вклад в науку Нобелевские премии.

До 60-х годов XX века учение о свойствах света развивалось сравнительно спокойно. Всё изменилось в 1960 годы, когда, следуя идеям, сформулированным создателями лазера (Басов, Прохоров, Таунс), Мейман запустил в действие первый лазер. Это был рубиновый лазер. Затем Джаван – гелий неоновый лазер. Изобретение лазера, которое на первый взгляд представляет собой чисто технологическое достижение, оказало огромное влияние на фундаментальную физиче-

скую науку. Стало возможным экспериментально изучать эффекты типа эффекта Эйнштейна – Подольского – Розена, вокруг которых в начале века вели споры основатели квантовой теории. Оказалось, что объяснение этих эффектов не столь просто, как казалось ранее. Возник новый раздел фундаментальной физики – квантовая оптика. Эксперимент Ханбери – Брауна – Твисса; Глаубер, Ареки – квантовая теория когерентности, Мандел – демонстрация перепутанных состояний, Кимбл – сжатый свет... Это только некоторые этапы развития физической науки, порождённые исследованием света в конце XX века. И есть все основания считать, что в XX веке свет только начал открывать свойства Вселенной и продолжит это в XXI веке.

В. И. Кочубей

ПРОЦЕССЫ ПЕРЕДАЧИ ЭНЕРГИИ ВОЗБУЖДЕНИЯ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В СИСТЕМЕ ДОНОР – АКЦЕПТОР

Вопросы, связанные с обнаружением в образце процессов передачи энергии, когда один тип молекул или дефектов кристалла поглощает свет, а излучает совсем другой, рассматриваются уже более ста лет. Схематически такой процесс можно описать уравнением $D^* + A = D + A^*$. Здесь звездочкой обозначается возбужденное состояние донора (D) или акцептора (A). Классически, при изложении процессов передачи энергии, в учебном процессе упоминают только о двух механизмах: излучательной передаче, когда донор излучает, а акцептор поглощает квант света, и безизлучательной индуктивно-резонансной передаче, при которой донор передает энергию возбуждения за счет кулоновского взаимодействия с акцептором. Это существенно сужает понятие о передаче энергии в такой системе.

Рассмотрим возможные механизмы передачи. В первую очередь, классический индуктивно-резонансный механизм, который относительно хорошо описан в теории Фёстера. При этом в гамильтониане взаимодействия между донором и акцептором рассматривают только кулоновский член, пренебрегая обменным взаимодействием. Теория учитывает условие резонанса, т. е. наличие перекрытия спектров излучения донора и поглощения акцептора. Рассматриваются ориентационные эффекты, а также зависимость эффективности передачи энергии от расстояния между донором и акцептором. Перенос происходит на расстояниях в десятки ангстрем. Однако данная теория, несмотря на ее повсеместное использо-



вание, носит настолько приближенный характер, что не позволяет количественно описать процесс переноса энергии. Несколько лучше описывает данные процессы теория, развитая Декстером, который учел оба члена гамильтониана взаимодействия, однако полученные уравнения настолько сложны, что в научной литературе по-прежнему излагают перенос энергии с точки зрения теории Фёстера. Если же учесть только обменный член гамильтониана, что сделано также Декстером, то получается совсем другой механизм переноса – обменно-резонансный перенос энергии. При этом донор и акцептор на краткий срок как бы обмениваются электронами, в результате чего энергия передается акцептору. Физически это можно представить как перекрытие электронных облаков донора и акцептора. Такое взаимодействие значительно менее вероятно, так как происходит на расстояниях между донором и акцептором порядка единиц ангстрем, однако вполне может происходить в комплексах макромолекула-краситель. На этом многообразии процессов переноса энергии не заканчивается, так как описанные процессы рассматривают только резонанс между уровнями донора и акцептора. При этом энергия возбуждения передается полностью. Однако существуют процессы дробной передачи, при которой акцептору передается только часть энергии, остальная расходуется донором на излучательные или безизлучательные процессы. Теория таких процессов разрабатывается, однако также не может описать количественно передачи энергии.

Таким образом, обнаруживается, что в настоящее время нет развитой теории, описывающей количественно передачу энергии возбуждения в системе *донор – акцептор*. Но и на этом перечень возможных механизмов не заканчивается. Возможны, например, процессы, когда донор в возбужденном состоянии генерирует экситон, перемещающийся по объекту и передающий энергию акцептору, аннигилируя при этом. Возможны также фононные и солитонные механизмы передачи энергии. Однако всегда встает вопрос: не носит ли передача энергии излучательный характер? При расстояниях *донор – акцептор*, составляющих единицы-десятки ангстрем, и представлении излучения сферически симметричной волны донором вероятность перепоглощения света акцептором весьма велика. К сожалению, ответить на этот вопрос с использованием серийных спектральных приборов часто невозможно. Достоверным признаком наличия безизлучательной передачи является только увеличение скорости затухания

люминесценции при импульсном возбуждении. Однако для большинства люминофоров время затухания меньше предела измерения временных параметров прибором.

Таким образом, обнаружить наличие передачи энергии достаточно просто, в то время как определение механизма данного процесса – сложная задача, как экспериментально, так и теоретически.

С. А. Савонин, В. П. Рябухо **ГОЛОГРАФИЧЕСКАЯ ВСЕЛЕННАЯ**

Один из самых знаменитых диалогов Платона – «Аллегория пещеры». В этой аллегории люди прикованы цепями в пещере так, что они могут видеть лишь тени, которые отбрасывает на стены огонь. Для этих людей тени представляют всё, что существует – для них нет реальности, состоящей из чего-либо иного кроме неясных теней. Мы все изначально являемся узниками, а весь окружающий мир – наша пещера. Подобно тому, как некоторые люди могут из пещеры вырваться на солнце, другие могут подняться к свету истинной реальности. И действительность может быть лишь «тенью на стене»!

Физической «тенью на стене» XX века служит знаменитый «парадокс Эйнштейна – Подольского – Розена», в котором «сцепленные» частицы ведут себя строго взаимосвязанно, так что изменение состояния одной приводит к мгновенной перемене в состоянии другой. И главное – расстояние между ними не играет абсолютно никакой роли. Одной из попыток метафизической интерпретации данного парадокса можно рассматривать теорию голографической вселенной, основные положения которой были сформулированы еще Дэвидом Бомом, соратником Альберта Эйнштейна.

1. Размышляя над парадоксом Эйнштейна – Подольского – Розена, Бом пришел к выводу, что элементарные частицы взаимодействуют между собой не потому, что существует какой-то исключительный механизм обмена информацией со скоростью, превышающей скорость света, а потому, что их разделённость есть иллюзия. На более глубоком уровне реальности такие частицы – не отдельные объекты, а фактически продолжения чего-то более фундаментального. Раздельными мы видим эти частицы только потому, что способны наблюдать лишь один аспект реально существующего мира (*David Bohm. Wholeness and the Implicate Order. Routledge, 1980. 240 p.*)



По Д. Бому элементарные частицы – не отдельные «части», а грани более глубокого единства, которое, в конечном итоге, голографично и невидимо напрямую, подобно объекту, изображение которого записано на голограмме. Поскольку всё в физической реальности содержится в этом «фантоме», то вселенная сама по себе есть голограмма. Если разделение частиц – это иллюзия, то, следовательно, на более глубоком уровне все предметы в мире бесконечно взаимосвязаны.

Но может ли вся информация, содержащаяся в материальных телах, на самом деле быть представлена их «тенью»? И будет ли это представление однозначным? Фактически способ, посредством которого принципы голографии входят в голографическую теорию вселенной, является весьма тонким. Пространство-время более не является непрерывным континуумом, и на размерах, определяемых постоянной Планка, должно представлять собой совокупность микрозон – квантов пространства-времени. Вселенная в рамках этой теории является трехмерным объектом, представляющим собой внешнюю границу четырехмерного пространства.

2. Продолжая разработку голографической теории, Крейг Хоган – директор Центра астрофизических исследований в лаборатории Ферми, пришел к следующему выводу: чтобы количество информации, заключенной во Вселенной, равнялось её информационной емкости, размеры кванта пространства должны быть равными 10^{-16} м. Этот «шум» на поверхности пространства-времени современная техника способна зарегистрировать – на протяжении длительного времени интерференционный детектор GEO600 (Ганновер, Германия) фиксировал шумы в диапазоне от 300 до 1500 Гц, мешающие его работе. Согласно гипотезе Крейга Хогана, GEO600 обнаружил голографический шум от квантовых колебаний пространства-времени, зафиксировал флуктуации вакуума, происходящие на границах квантов пространства, из которых и состоит наша Вселенная (*David. B. Kelley. Optical detection development for the Hogan quantum holographic noise experiment. Massachusetts Institute of Technology, 2010. 35 p.*)

Однажды посторонние шумы, выведившие из себя исследователей в Bell Laboratory в ходе экспериментов 1964 года, уже стали предвестником глобальной перемены научной парадигмы: так было обнаружено реликтовое излучение, утвердившее гипотезу о Большом Взрыве. Возможно, та же история повторяется годы спустя.

Б. А. Медведев ВМЕСТО ЗАКЛЮЧЕНИЯ

Истина возникает из фактов, но она и опережает факты, и кое-что к ним прибавляет, а эти факты вновь создают или открывают истину... и так до бесконечности.

У. Джемс

1. Прикладной и фундаментальный аспекты исследований механизмов переноса энергии в донорно-акцепторных парах (доклад В. И. Кочубея) представляет большой интерес – как для развития новых оптических технологий, имеющих целью создание источников света с управляемым спектральным составом, так и для создания гибридных наноструктур на основе полупроводниковых квантовых точек для эффективной генерации синглетного кислорода тетрапиррольными молекулами, которые могут использоваться в качестве новых поколений фотосенсибилизаторов для фотодинамической терапии онкологических заболеваний. В целом результаты исследований излучательного и безизлучательного переноса энергии эффективно используются в биохимии, молекулярной биологии, биотехнологии и медицине, определяя междисциплинарный характер коммуникаций аспирантов и молодых ученых. Соответственно в образовательных и исследовательских программах кафедр и факультетов происходит стирание традиционных границ, что объективно является признаком инновационных процессов в жизни классического университета.

2. Без художественного воспитания, без гуманитарного базиса естественно-научного познания, начало формирования которого относится к временам пифагорейского союза, платоновской академии и Ликейя Аристотеля, появление блестящей плеяды великих физиков и философов поздних эпох представляется, на наш взгляд, маловероятным. Но возможна ли в XXI веке подготовка исследователей, не страдающих интеллектуальным дальтонизмом, ориентирующихся в огромных потоках информации, способных «учиться, одновременно разучиваясь», по Хайдеггеру, и адаптирующихся к ускоряющейся смене высоких технологий? Развитие междисциплинарного мышления, как никогда, по сравнению с прошедшими веками, представляется фундаментальной проблемой современного университета. В связи с этим вопрос:



«Является ли формальная логика обязательной при обращении к внутреннему миру человека?», прозвучавший в выступлении А. Г. Рокаха, это вопрос познания экзистенциального «Я», вопрос о расширении границ рационального мышления, вопрос о развитии креативности будущих выпускников университета в области «дальних пределов человеческой психики» по А. Маслоу.

3. Возможна ли конвергенция интегративных процессов в искусстве с процессами в естественно-научном познании? Позитивному ответу на этот вопрос в области синтеза света, цвета и музыки посвящен доклад О. В. Шимельфенига и Л. Я. Солодовниченко. В действительности картина мира не может быть естественно-научной или художественной. Она может быть только их единством – миром эмоционального интеллекта, для которого размышление есть лишь метаморфоза переживания. Приведем высказывание М. Маклюэна: «Художник – это человек, который в любой области, будь то научной или гуманитарной, уже сейчас сознает последствия своих действий и нового знания. Это человек с интегральным сознанием. Видимо, только увлеченный своим делом художник способен к встрече с актуальностью настоящего».

4. Не происходит ли инфляция физического знания с потерей его наглядности, так близко принимаемой Эйнштейном и оппонировавшим в свое время всем сторонникам квантовой механики? Не происходит ли «остывание» физической реальности в контексте семиотики? Эти дискуссионные вопросы, инициируемые выступлением Ю. М. Дуплинской, резонансны высказыванию Карла Прибрама: «Физика не интересуется то, является ли свет квантом или волной, распространяется ли он в виде частиц или электромагнитных волн, или в форме того и другого. Он заботится о том, чтобы как можно полнее количественно описать результаты своих наблюдений, и соответственно этому выбирает инструменты для своего описания». Действительно, щель между «обозначаемым» и «обозначающим» расширяется и согласно Маклюэну «... технологии суть способы перевода одного рода знания в другой». Но разве не являются «горячими» знаками образы голографической вселенной Д. Бома и голографической модели мозга К. Прибрама? В контексте семиотики историческое развитие физического знания представляется, скорее, волнообразным с перио-

дической заменой «горячих знаков холодными», как «немезисом креативности», по М. Маклюэну.

5. Возможному изменению физической парадигмы, связанной с устоявшимися представлениями о пространстве и переходу к концепции голографической вселенной Д. Бома, был посвящен доклад В. П. Рябухо и С. Савонина. Доклад начинается с фрагмента аллегорического платоновского диалога о Пещере, форма и содержание которого напоминают высказывание Эдгара Аллана По о чувстве прекрасного как о критерии истины. Подвергая сомнению наши консервативные представления о причинно-следственных связях, о локальности, о пространстве и времени, Дэвид Бом дает не только оригинальную интерпретацию квантовой механики, но и вводит концепцию голономного движения, присущего всей вселенной. И хотя мы сталкиваемся с трудностями физического осмысления квантования пространства и метафизическими масштабами планковской длины и длительности, ощущается некоторая замороженность еще неоткрытой тайной: «...чем-то великим и трудноуловимым кажется топос – т. е. место-пространство», по Аристотелю.

6. В докладе В. В. Розена представлено развитие физического знания от смены концепции дальнего действия концепцией ближнего действия, от детерминизма Декарта, Ньютона и Лапласа к индетерминизму в квантовой механике Шредингера и Гейзенберга и, наконец, переход к парадигме целостности, согласно которой «невозможно познать свойства одной отдельно взятой частицы, изолировав её от остального мира». И здесь мы вновь обращаемся к Д. Бому с его холистическим принципом несепарабельного движения вселенной в силу квантовых корреляций всех её систем.

7. Размышлениям о природе света и его использовании для решения фундаментальных физических проблем был посвящен доклад О. М. Паршкова. Позволим себе немного расширить заключительную часть его выступления. В 1935 году в статье с символическим названием «Можно ли считать квантово-механическое описание физической реальности полным?» был сформулирован парадокс Эйнштейна – Подольского – Розена.

Но спустя десятилетия результат исследования этого парадокса оказался противоположным ожиданиям его авторов. Беллом³ были

³ Bell J. S. // Physics. 1964. № 1. P. 195.



сформулированы неравенства, экспериментальная проверка которых А. Аспектом⁴ и позже Гринбергером, Хорном и Цайлингером убедительно свидетельствовала о наличии квантовых корреляций в системе трёх фотонов и, как следствие, о невозможности описания подобной

⁴ Aspect A., Grangier P., Roger G. // Phys. Rev. Lett. 1982. Vol. 49. P. 91.

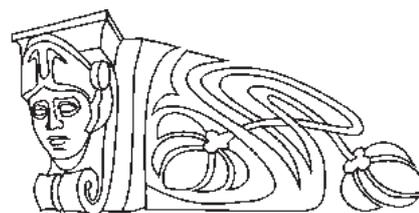
системы в рамках классических представлений, для которых понятия нелокальности и квантовой перепутанности состояний не имеют аналогов. Резюмируя, процитируем нашего коллегу О. М. Паршкова: «...Есть все основания считать, что в XX веке свет только начал открывать свойства Вселенной и продолжит это в XXI веке».

УДК 53(091); 53(092): 537.86

КАФЕДРЕ ЭЛЕКТРОНИКИ, КОЛЕБАНИЙ И ВОЛН САРАТОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА – 60 ЛЕТ

Ю. Д. Жарков, А. А. Короновский,
Ю. И. Лёвин, А. Е. Храмов

Саратовский государственный университет
E-mail: fnp@sgu.ru



В статье приводится краткая история кафедры электроники, колебаний и волн Саратовского университета, которой в этом году исполняется 60 лет. Кафедра электроники, колебаний и волн является одним из ведущих подразделений Саратовского университета, где ведется подготовка специалистов-радиофизиков для электронной промышленности, а также специалистов в области анализа и моделирования нелинейных процессов. Выпускники кафедры – инженеры и ученые – работают как в странах-республиках бывшего Советского Союза, так и по всему миру.

Ключевые слова: кафедра электроники, колебаний и волн, юбилей, персоналия, история, нелинейная динамика.

**Department of Electronics, Oscillations and Waves
of Saratov State University Celebrates Sixtieth Anniversary**

Yu. D. Zharkov, A. A. Koronovskii,
Yu. I. Levin, A. E. Hramov

A brief history of the Department of Electronics, Oscillations and Waves of Saratov State University are presented. This year, the Department of Electronics, Oscillations and Waves celebrates sixtieth anniversary. Department of Electronics Oscillations and Waves is one of the leading departments of Saratov State University training specialists for the electronics industry.

Key words: department of electronics, oscillations and waves, anniversary, personal, history, nonlinear dynamics.

Создание кафедры и ее первые десятилетия

Кафедра электроники (первоначальное название кафедры электроники, колебаний и волн) была организована 1 июня 1952 года. Заведующим

по совместительству был назначен бывший ректор Саратовского государственного университета (СГУ), профессор, доктор физико-математических наук Павел Васильевич Голубков – основатель Саратовской школы радиоэлектроники.

Открытие кафедры электроники, колебаний и волн на физическом факультете СГУ было подготовлено целым рядом взаимосвязанных процессов, событий, явлений. Здесь, прежде всего, следует отметить солидный «электронный» фундамент, который был заложен еще в 30–40-х гг. прошлого столетия трудами профессоров К. А. Леонтьева, П. В. Голубкова, В. И. Калинина и их учеников в области создания и исследований СВЧ генераторов, затем начало «бума» электронной промышленности в Саратове, и, наконец, решение об открытии в СГУ второго физического факультета – радиофака. Все это и привело к созданию в СГУ в 50-е гг. ряда специальных кафедр: радиофизики, электроники, электрорадиотехники, физики вакуума, а также проблемной лаборатории радиоэлектроники. Интересно отметить, что сначала (май 1951 г.) приказом по Главному управлению университетов кафедра общей физики и электроники, а 11 марта 1952 г. был издан приказ:

«Приказ по Главному управлению университетов от 11 марта 1952 года г. Москва, № 11/4504.

1. Организовать с 1 июня 1952 года кафедру электроники.



2. Голубкова П. В. по совместительству назначить заведующим кафедрой».

Петр Васильевич Голубков – заслуженный деятель науки РСФСР, заведующий кафедрой общей физики, профессор, доктор физико-математических наук, директор НИИМФ СГУ, ректор СГУ – вместе с профессором В. И. Калининым был признанным основателем и главой саратовской школы радиопизики и сверхвысокочастотной электроники. Его научные исследования и результаты во многом определили направления и область научных интересов сотрудников кафедры электроники. Достаточно назвать тему докторской диссертации Петра Васильевича: «Некоторые задачи кинематической электронной оптики и проблемы генерирования сверхвысоких частот», защищенной 5 января 1944 г. на ученом совете Ленинградского государственного университета.

Первыми сотрудниками кафедры электроники стали доцент Б. М. Заморозков, доцент В. Н. Шевчик, доцент Ю. Г. Альтшулер, старший преподаватель Ю. П. Радин, старший преподаватель А. М. Алесковский, старший преподаватель А. А. Муравьев, старший лаборант П. В. Можаяев, старший лаборант В. А. Гудошников, аспирант В. С. Стальмахов.

В 1953 г. заведующим кафедрой был утвержден доцент, кандидат физико-математических наук Борис Михайлович Заморозков – директор НИИ механики и физики (НИИМФ) СГУ, декан физического факультета, а с 1958 г. начальник теоретического отдела НИИ «Волна». Под его руководством были разработаны первые лекционные курсы, созданы первые учебные практикумы кафедры, развернуты исследования в области вакуумной СВЧ электроники.

Кафедра обеспечивала чтение курсов лекций: «Физическая электроника», «Электронные и ионные приборы», «Основы электроники СВЧ» и занятия со студентами в одноименных учебных практикумах. В 1953–1954 гг. на кафедру пришли доценты О. В. Карпова, ассистент А. С. Татаренко, ассистент В. С. Андрушкевич, аспирант Ю. Д. Жарков, лаборант А. И. Оленин.

В эти годы на физическом факультете СГУ широким фронтом развернулись теоретические и экспериментальные работы в области электроники сверхвысоких частот, была создана проблемная лаборатория радиоэлектроники (знаменитый «Подвал»). В этот период коллективом кафедры вместе с сотрудниками НИИМФ СГУ были выполнены важные теоретические и экспериментальные работы, которые привели, в

частности, к созданию первых отечественных широкополосных генераторов обратной волны без магнитной фокусировки (В. Н. Шевчик, Н. И. Сеницын, Б. М. Заморозков, Ю. Д. Жарков). Так, в 1957–1964 гг. группой сотрудников кафедры и проблемной лабораторией (Б. М. Заморозков, Ю. Д. Жарков, М. А. Харит, Л. Я. Майофис, Б. С. Дмитриев) был разработан и создан целый ряд оригинальных генераторов с обратной волной с ионной фокусировкой электронного потока в дециметровом, сантиметровом и миллиметровом диапазонах длин волн. Эти приборы были приняты правительственной комиссией с высокой оценкой и рекомендованы к опытно-конструкторской разработке.

В 1958 г. заведующим кафедрой стал Владимир Николаевич Шевчик – впоследствии доктор физико-математических наук, профессор, ректор СГУ, директор и научный руководитель НИИМФ СГУ. Можно смело сказать, что своими успехами саратовская электронная школа во многом обязана В. Н. Шевчику.

В. Н. Шевчиком был заложен фундамент единой аналитической теории лучевых СВЧ электронных приборов, основанный на использовании оригинального метода, известного в литературе как метод последовательных приближений. На протяжении многих лет и до конца жизни он был наряду с профессором П. В. Голубковым и профессором В. И. Калининым ее признанным главой. В 1959 г. выходит монография В. Н. Шевчика «Основы электроники сверхвысоких частот», переведенная затем на ряд иностранных языков. Она была и остается одним из лучших учебных пособий по СВЧ электронике, по ней учились многие электронщики Советского Союза. Эта книга наряду с монографией В. Н. Шевчика «Взаимодействие электронных пучков с электромагнитными волнами» (в ней изложены результаты докторской диссертации В. Н. Шевчика, защищенной в 1963 г.) и монографией «Волновые и колебательные явления в электронных потоках на СВЧ» (авторы – В. Н. Шевчик, А. В. Соболева, Г. Н. Шведов), тоже переведенной на английский язык, дала толчок необычайно большому количеству новых работ. В начале 60-х гг. на кафедру пришла большая группа новых сотрудников: профессор М. А. Григорьев, работники электронной промышленности доцент Г. Л. Соболев, старший преподаватель В. Л. Фишер, только что окончившие университет, ныне заведующий кафедрой, бывший ректор СГУ, член-корр. РАН Д. И. Трубецков, профессор Н. И. Сеницын, доцент Б. Г. Цикин, профессор Ю. А. Зюрюкин.



В 1957–1964 гг. на кафедре был выполнен цикл работ с участием В. Н. Шевчика, Ю. Д. Жаркова, Д. И. Трубецкова, Н. И. Сеницына, аспиранта А. А. Кураева (ныне профессора, заведующего кафедрой БГУИР (Минск), сопредседателя программного комитета конференции «Крымико») по теории дискретного взаимодействия электронов с ВЧ полями применительно к ЛБВ и ЛОВ с периодическими замедляющими системами, а также серия работ Б. Г. Цикина, посвященная аналитической нелинейной теории ЛБВ. На кафедре были проведены широкие теоретические и экспериментальные исследования ЛОВ в различных режимах и диапазонах. Работавшими в то время на кафедре профессорами В. С. Стальмаховым, а также В. Н. Шевчиком, Д. И. Трубецковым и аспирантами ныне профессорами Ю. П. Шараевским и Ю. И. Левиным были проведены работы по развитию теории лучевых приборов М-типа. Результаты нелинейной нестационарной теории этих приборов были позднее отражены в докторской диссертации Д. И. Трубецкова (1978). Своеобразным итогом научных исследований в эти годы стала монография В. Н. Шевчика и Д. И. Трубецкова «Аналитические методы расчета в электронике СВЧ», вышедшая в свет в 1970 г. В ней обобщены и систематизированы результаты теоретических исследований различных электронных приборов СВЧ. Эту монографию без преувеличений можно назвать энциклопедичной, и не случайно она включена в «золотой фонд» научной литературы по электронике. Работы по ЛОВ были обобщены в вышедшей в 1975 г. коллективной монографии под редакцией В. Н. Шевчика и Д. И. Трубецкова «Электроника лампы с обратной волной».

Смелость в уходе от традиционных научных направлений характерна для руководителей и сотрудников кафедры. Так, в конце 60-х гг. по инициативе В. Н. Шевчика на кафедре начались исследования в области акустоэлектроники и акустооптики. Научные группы в НИИМФ, возглавляемые сотрудниками кафедры М. А. Григорьевым, Н. И. Сеницыным и Ю. А. Зюрюкиным, быстро завоевали признание и достигли успеха в разных направлениях акустоэлектроники и акустооптики, в частности велись теоретические и экспериментальные исследования закономерностей возбуждения СВЧ упругих волн и их распространения в кристаллах на частотах от 0.1 до 37 ГГц. В результате были созданы СВЧ акустические линии задержки, в том числе первые в Союзе линии задержки, работающие на частоте 10 ГГц при температуре 300 К;

выполнены экспериментальные исследования температурных зависимостей затухания упругих волн в ряде кристаллов. Впервые в Советском Союзе были поставлены эксперименты по исследованию дифракции света на упругих волнах от 7 до 11 ГГц и разработаны макеты акустооптических модуляторов. В этих работах активное участие принимал доцент кафедры А. В. Толстиков.

В это же время научной группой под руководством Б. Г. Цикина начинаются исследования в области квантовой электроники, связанные с изучением взаимодействия свободных электронов с незамедленными электромагнитными волнами. Было теоретически предсказано существование следующих эффектов: нелинейного усиления незамедленных электромагнитных волн электронным пучком; вынужденного комптоновского рассеяния на нерелятивистском электронном потоке, вынужденного черенковского рассеяния. Эти работы явились одними из первых отечественных публикаций по лазерам на свободных электронах. Ряд фундаментальных результатов получили Б. Г. Цикин и его сотрудники по теории возбуждения волноводов вблизи границы полосы пропускания замедляющих систем.

В 60–90 гг. под руководством профессора В. С. Андрушкевича группой сотрудников НИИМФ, в которую входил и профессор Ю. Г. Гамаюнов, были проведены теоретические исследования по взаимодействию протяженных электронных пучков с высокочастотными полями распределенно-резонансных электродинамических структур миллиметрового диапазона, а также исследования по формированию и транспортировке таких пучков в этом диапазоне. Результатом исследований явились разработки мощных, не имеющих аналогов, ЛОВ-генераторов в коротковолновой части миллиметрового диапазона. Особо следует отметить впервые созданный в нашей стране высокоэффективный мощный пакетированный усилительный клистрон с распределенным взаимодействием (КРВ) с уникальными параметрами в средневолновой области миллиметрового диапазона. Часть полученных результатов по усилительным КРВ была отражена в монографии «Усилительные клистроны с распределенным взаимодействием» (авторы – В. С. Андрушкевич, В. А. Вырский, Ю. Г. Гамаюнов, В. Н. Шевчик). Результаты проведенных теоретических и экспериментальных исследований были обобщены также в докторской диссертации В. С. Андрушкевича (1987).



В 60–90-е гг. группой сотрудников НИИМФ и физического факультета под руководством профессоров Ю. Д. Жаркова и Б. С. Дмитриева были проведены теоретические и экспериментальные исследования, в результате которых был разработан оригинальный метод физического моделирования взаимодействия потоков заряженных частиц с СВЧ-полями, основанный на применении метода электронного зонда. Впервые был создан комплекс средств измерений – электронных зондов – для моделирования, изучения и оперативной оптимизации процессов взаимодействия потоков заряженных частиц с СВЧ-полями в мощных ЭВП СВЧ О-типа и линейных резонансных ускорителях ионов, для оперативного исследования транспортировки интенсивных электронных потоков в магнитных фокусирующих системах, для изучения волн пространственного заряда в электронных потоках, для исследования свойств электродинамических систем.

Новое научное направление – нелинейные колебания и волны, хаос и структуры

В 1981 г. заведующим кафедрой стал ученик и приемник В. Н. Шевчика профессор Дмитрий Иванович Трубецков, в последующие годы заслуженный деятель науки РФ, член-корр. РАН, лауреат премии Президента РФ в области образования, трижды Соросовский профессор, ректор СГУ в 1994–2003 гг. К этому времени Д. И. Трубецков стал широко известным в России и за рубежом крупным специалистом не только в области электроники СВЧ, но и в области нелинейной физики в той ее части, которая связана с теорией колебаний и волн, радиофизикой и СВЧ-электроникой. С 1981 г. начался качественно новый этап в развитии кафедры, связанный с новыми научными направлениями, новыми специализациями, новыми курсами лекций, новыми учебными лабораториями, новыми сотрудниками.

Начиная с 80-х гг. научными группами под руководством Д. И. Трубецкова ведутся теоретические исследования в области ВЧ релятивистской электроники, теоретические и экспериментальные исследования нестационарных явлений в электронике, хаотических колебаний в распределенных радиофизических системах, большое внимание уделяется исследованиям в других актуальных направлениях нелинейной физики.

Широкий спектр теоретических и экспериментальных исследований в области твердотельной электроники и оптоэлектроники был

выполнен группой под руководством профессора Л. И. Каца, работавшего на кафедре с 1984 г. до его кончины в 1992 г. Эти во многом оригинальные и смелые исследования включили широкий круг актуальных вопросов: полупроводниковые СВЧ волноводы, малоинерционные измерители высоких уровней импульсной СВЧ мощности, оптоэлектронные управляемые устройства, методы автоматизации измерения частоты в СВЧ диапазоне. В 1984 г. выходит монография Д. И. Трубецкова и М. И. Рабиновича «Введение в теорию колебаний и волн», получившая гриф учебного пособия для студентов университетов, изданная в Нидерландах на английском языке и переизданная в 1994 и 2000 гг. в России. Эта книга является удачным сочетанием монографии и учебного пособия для студентов и специалистов по радиофизике. Современная теория колебаний и волн представлена в книге явлениями и эффектами, встречающимися во всех областях науки и техники. Книга пользуется заслуженным признанием в Европе и США. В 80-х гг. при участии профессоров Б. П. Безручко, А. П. Четверикова, А. П. и С. П. Кузнецовых, доцентов А. А. Кипчатова, В. Г. Андрушкевича и др. на кафедре появляется новое направление, связанное с развитием и применением методов нелинейной динамики, в том числе в задачах СВЧ-электроники.

Ведущая научная школа – школа Д. И. Трубецкова

Особенностью кафедры является то, что научная и учебная работа базируется на научной школе Д. И. Трубецкова. Школа Д. И. Трубецкова – уникальное явление, широко известное как в Советском Союзе, так и сейчас в России и за рубежом, охватывает не только научную школу в привычном понимании этого слова (начиная с 1995 г. научная школа Д. И. Трубецкова семь раз признавалась победителем конкурсов на звание ведущей научной школы России: 1996–1999, 2000–2002, 2003–2005, 2006–2007 и 2008–2009, 2010–2011, 2012 гг.). Это школа в широком понимании – наука, образование, большая просветительская деятельность. В историческом аспекте можно сказать, что научная школа Д. И. Трубецкова ведет свое происхождение от школы в области СВЧ-электроники, возникшей в Саратовском государственном университете в конце 50-х гг. прошлого века и создателем которой был его учитель – профессор В. Н. Шевчик. Важная традиция научной школы заключается в том, что практически все представители школы читают лекции студентам, ведут практические



и семинарские занятия, читают лекции школьникам. Сам Д. И. Трубецков читал и читает ряд спецкурсов в университетах Москвы, в настоящее время в МИФИ, где он является профессором, С.-Петербурга, Ростова-на-Дону, Самары, а также в университетах Вайоминга (США) и Сеула (Республика Корея).

Школы, конференции и научный семинар кафедры

Научные связи кафедры всегда были весьма обширны. Свидетельством служит успешное проведение большого числа научных семинаров, конференций и школ различного уровня, на которые приезжают специалисты из многих научных центров. Первую такую Зимнюю школу для инженеров по электронике СВЧ и радиофизике кафедра организовала и провела совместно с НИИМФ, ГНПП «Алмаз» и другими электронными предприятиями в 1970 г. С тех пор с интервалом в три года организовано и проведено 15 Зимних школ (последняя в 2012 г.), 7 школ по хаотическим колебаниям в радиофизике и электронике «ХАОС» (последняя в 2011 г.), 19 школ «Нелинейные волны в Саратове для молодых» для школьников города и области. Многие члены программного комитета «Крымико» являются членами программного комитета Саратовской зимней школы по электронике и радиофизике СВЧ.

С первых лет работы кафедры начал действовать научный семинар, который пользуется авторитетом и известностью у электронщиков и радиофизиков в Саратове и других городах страны. Семинар действует и в настоящее время, проведено около 1200 заседаний.

Новые времена, новые задачи и направления исследований

С начала 90-х гг. исследования сотрудников кафедры под руководством Д. И. Трубецкова, его коллег и учеников профессоров А. А. Короновского и А. Е. Храмова все чаще направляются на задачи приложения разработанных методов анализа и диагностики электронно-волновых систем к исследованию нелинейных систем различной природы, анализируются возможности применения методов нелинейной динамики к анализу систем, которые всегда были объектами социальных и общественных наук – человеческое общество, демография, экономические системы. Активная научная и просветительская работа в этом направлении делают научную школу Д. И. Трубецкова одним из неформальных лиде-

ров такого нового научного направления, активно развивающегося в нашей стране, как синергетика. Первым серьезным успехом в этом направлении стало издание первой монографии в России, посвященной применению методов нелинейной динамики к анализу нефизических (социальных, геологических, экономических и др.) систем «Нелинейная динамика в действии. Как идеи нелинейной динамики проникают в экологию, экономику и социальные науки» (авторы Д. И. Трубецков и А. А. Короновский, Саратов, 1995) в соавторстве с профессором А. А. Короновским (монография была переиздана в 2002 г.). Чуть позже в издательстве «Эдиториал УРСС» в серии «Синергетика: от прошлого к будущему» были опубликованы учебники Д. И. Трубецкова «Введение с синергетику. Колебания и волны», «Введение с синергетику. Хаос и структуры» и «Путь в синергетику», последний – в соавторстве с профессорами Б. П. Безручко, А. А. Короновским и А. Е. Храмовым. В 2010 г. в издательстве МГУ вышла коллективная монография под ред. Д. И. Трубецкова и декана ФГП МГУ В. С. Ильина «Математическое моделирование глобальных процессов», которая обобщила исследования, проводимые на кафедре в этом направлении.

Но активно занимаясь общими проблемами нелинейной динамики, проводя исследования в области применения методов, разработанных в теории колебаний и волн, к нефизическим системам, сотрудники кафедры не оставляют исследований в традиционных областях, направленных на изучение систем электронно-волновой природы. Во-первых, это экспериментальные и теоретические исследования таких новых источников сверхвысококачественного излучения, как генераторы на виртуальном катоде, которые привели к созданию под руководством профессоров Д. И. Трубецкова, Ю. А. Калинина, А. Е. Храмова и при участии молодых коллег – доцента В. Н. Егорова, ассистента С. А. Куркина и др. нового класса широкополосных источников шумоподобного хаотического сигнала в СВЧ-диапазоне – низковольтных виркаторов. Продолжаются исследования в области электроники миллиметровых волн, в том числе сложной динамики автоколебательного процесса в перспективном источнике излучения миллиметрового и субмиллиметрового диапазонов – клинотроне (профессор Ю. Г. Гамаюнов, доцент А. В., Толстиков, научный сотрудник Е. В. Патрушева, консультирует работу профессор В. С. Андрушкевич). Во-вторых, это теоретические и численные исследования в об-



ласти вакуумной микроэлектроники (профессор Д. И. Трубецков, доцент А. Г. Рожнев, старший научный сотрудник Д. В. Соколов). В третьих, это теоретическое и экспериментальное рассмотрение различных вопросов классической и хаотической синхронизации как в приборах СВЧ, так и в эталонных моделях теории колебаний и волн, направленных на формирование единой концепции природы явления синхронизации в самых различных системах (как демонстрирующих регулярное, так и хаотическое поведение) (профессора А. А. Короновский, А. Е. Храмов, Б. С. Дмитриев, Ю. Д. Жарков, заведующий лабораторией В. Н. Скороходов, а также большая группа молодых аспирантов, многие из которых сейчас уже стали доцентами, сотрудниками кафедры электроники и других кафедр СГУ – И. С. Ремпен, О. И. Москаленко, А. Е. Филатова, П. В. Попов, А. В. Стародубов, М. К. Куровская и др.). Дмитрий Иванович поддерживал и активно способствовал развитию в рамках научной школы физического эксперимента в области вакуумной электроники и магнитоэлектроники. Так, группой сотрудников (профессора Б. С. Дмитриев, Ю. Д. Жарков и заведующий лабораторией В. Н. Скороходов) выполнен цикл работ по экспериментальным исследованиям сложной динамики в многорезонаторных клистронных автогенераторах с запаздывающей обратной связью. Показано, что эти автогенераторы являются исключительно удобными приборами для экспериментального изучения основных закономерностей детерминированного хаоса (синхронизация за счет полного подавления хаоса, взаимная синхронизация, полная синхронизация, обобщенная синхронизация, подавление гармонических колебаний внешними шумами, генерация хаотических радиоимпульсов, исследование явления когерентного резонанса в распределенных системах СВЧ-диапазона). В группе профессора Ю. П. Шараевского при активном участии сотрудника кафедры доцента, кандидата физико-математических наук С. В. Гришина экспериментально исследуются

нелинейно-динамические явления в магнитоэлектронике. Проводятся исследования и некоторых сугубо математических вопросов нелинейной науки (профессор В. М. Аникин). В последнее время интересы сотрудников кафедры смещаются в сторону исследования способов генерации и усиления сигналов ТГц диапазона как в приборах вакуумной электроники, так и в полупроводниковых наноструктурах.

Многие результаты вышеупомянутых исследований были обобщены в монографиях, подготовленных под руководством Д. И. Трубецкова. Так, в 1996 г. в издательстве ГосУНЦ «Колледж» выходит монография «Лекции по вакуумной СВЧ микроэлектронике» (авторы Д. И. Трубецков, А. Г. Рожнев, Д. В. Соколов), в которой систематизируются результаты исследования процессов в системах, использующих в качестве источников электронов автоэмиссионные катоды. В 2003 и 2004 гг. в издательстве «Физматлит» выходит двухтомная монография «Лекция по сверхвысокочастотной электронике для физиков» (авторы – Д. И. Трубецков, А. Е. Храмов), в которой изложены физические основы современных приборов СВЧ. В 2009 г. в издательстве «Физматлит» под редакцией А. А. Кураева и Д. И. Трубецкова была опубликована двухтомная коллективная монография «Методы теории хаоса и нелинейной динамики в задачах электроники сверхвысоких частот», подготовленная совместно с белорусскими коллегами из БГУИР как результат многолетних совместных исследований и работ в области применения нелинейных методов в электронике СВЧ.

В настоящее время кафедра электроники, колебаний и волн активно развивается, на кафедре много молодежи — аспирантов и молодых сотрудников. У кафедры тесные связи с ведущими предприятиями электронной промышленности — «Алмаз», «Контакт», ОАО «Тантал» (Саратов), «Торий» (Москва), «Исток» (Фрязино) и др., для которых кафедра готовит молодых специалистов.



ИЛЛЮСТРАЦИИ К СТАТЬЕ



Основатели кафедры – П. В. Голубков и Б. М. Заморозков



Многие из них еще не знают, что через полгода будут работать на кафедре электроники. Слева направо: Л. Э. Бахрах, Ю. Г. Альтшуллер, В. Н. Шевчик, Слава Бахрах, А. А. Муравьев, Н. П. Будникова, В. В. Игонин, В. П. Голубков, В. Н. Артемьев, К. А. Развесов, М. А. Григорьев. Май 1952 года



В лаборатории электроники. Доценты Ю. Г. Альтшуллер, В. Н. Шевчик и аспирант В. С. Стальмахов. 1952 год



Первая поездка за рубеж сотрудника кафедры. В. Н. Шевчик в Китае. 1960 год



Аспиранты Д. И. Трубецков и Б. Г. Цикин, инженер Г. Л. Соболев.
1962 год



В учебной лаборатории кафедры. М. А. Григорьев и Р. И. Бурштейн.
1966 год



Декан физического факультета Ю. Д. Жарков. 1969 год



Научный руководитель НИИМФ СГУ, заведующий кафедрой электроники В. Н. Шевчик и директор НИИМФ Р. Ш. Амиров. 1971 год



Сотрудники кафедры электроники у входа в III корпус. Слева направо: Ю. А. Зюрюкин, Д. И. Трубецков, В. С. Андрушкевич, М. А. Григорьев, Ю. Д. Жарков, В. А. Гудошников, Г. С. Соболев. 1972 год



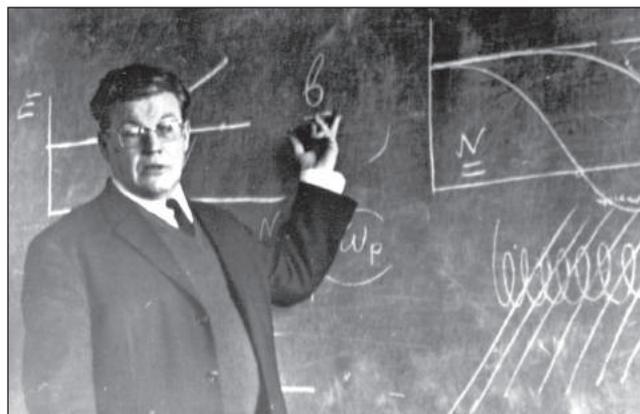
Научная группа Д. И. Трубецкова. Слева направо: сидят – Ю. И. Левин, Ю. П. Шараевский, Д. И. Трубецков, М. В. Гаврилов; стоят – Ю. Захарченко, В. П. Шахин, Е. П. Бочаров. 1975 год



Научный семинар кафедры. Ученый секретарь семинара Д. И. Трубецков, Ю. А. Зюрюкин, Г. Л. Соболев, Ю. Д. Жарков, научный руководитель семинара В. Н. Шевчик, В. А. Исаев, В. С. Андрушкевич. 1971 год



В. Н. Шевчик не согласен. Научный семинар кафедры. Г. А. Багаева, В. Н. Шевчик, Ю. Г. Гамаюнов. 1973 год



На первой Зимней школе-семинаре по радиофизике и электронике. В. Н. Шевчик объясняет работу ЛОВ. 1970 год



Открытие 4-й Зимней школы-семинара по электронике СВЧ. Слева направо: О. М. Радюк, Д. И. Трубецков, А. М. Богомолов, В. П. Степанчук, В. А. Лепилов, В. Г. Федоров, Р. Ш. Амиров. 1978 год



Зимняя школа-семинар по СВЧ-электронике. В центре: чл.-корр. АН СССР Л. А. Вайнштейн и В. Н. Шевчик



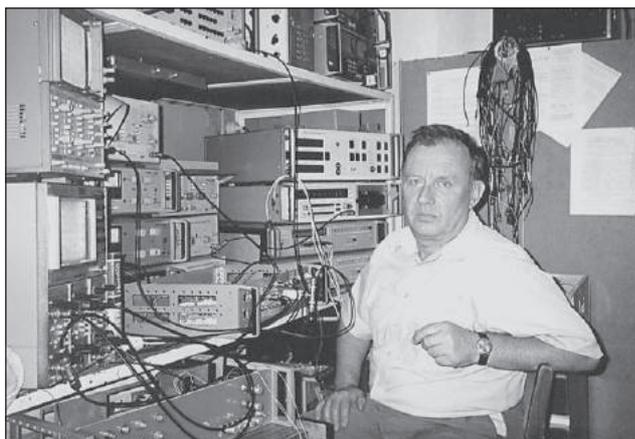
Филиал кафедры на ГНПП «Алмаз» (ныне базовая кафедра проектирования приборов СВЧ). Среди студентов преподаватели филиала. Справа налево сидят: В. А. Лепилов, А. Д. Есин, заведующий филиалом Ю. А. Калинин, Ю. А. Григорьев. 1984 год



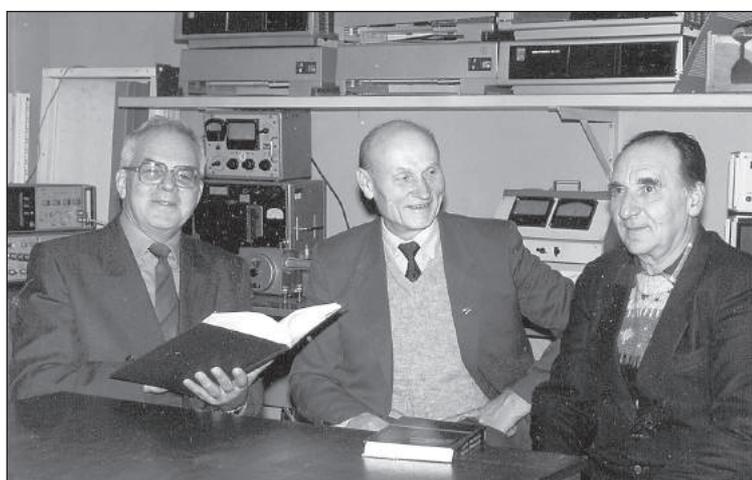
Преподаватели и сотрудники кафедры. 1982 год



В научной лаборатории. Слева направо: профессор Д. И. Трубецков, доценты А. П. Четвериков, М. В. Гаврилов, С. П. Кузнецов. 1989 год.



Профессор кафедры, доктор физико-математических наук
Б. П. Безручко в научной лаборатории. 1996 год.



В год юбилея физического факультета. Профессора кафедры. Слева направо:
Ю. Д. Жарков, М. А. Григорьев, В. С. Андрушкевич. 1995 год



Заведующий кафедрой, ректор СГУ Д. И. Трубетков в ректорском кабинете в V корпусе СГУ. 1997 год



Профессор, чл.-корр. РАН, ректор СГУ Д. И. Трубецков читает лекцию на школе-конференции «Нелинейные дни в Саратове для молодых» (пансионат «Салют», октябрь 2000 года)



Лекцию на школе «Нелинейные дни в Саратове для молодых» читает Сергей Петрович Капица (пансионат «Салют», октябрь 2000 года)



Коллектив кафедры электроники, колебаний и волн (2008 г.): стоят (слева направо): профессор, доктор физико-математических наук А. Е. Храмов, доцент, кандидат физико-математических наук С. В. Гришин, доцент М. И. Перченко, аспирант Р. А. Филатов, заведующий лабораторией В. Н. Скороходов, ведущий инженер М. В. Ханенко, доцент, кандидат физико-математических наук Е. Н. Егоров, профессор, доктор физико-математических наук А. А. Короновский, доцент, кандидат физико-математических наук В. Н. Титов, аспиранты (ныне кандидаты наук) А. Е. Филатова, А. В. Стародубов, аспирант А. В. Муштаков, аспирант (ныне кандидат наук, доцент кафедры физики открытых систем) С. А. Куркин; сидят (слева направо): профессор, доктор физико-математических наук В. М. Аникин, профессор, доктор физико-математических наук Ю. Д. Жарков, профессор, доктор технических наук Ю. А. Калинин, профессор, чл.-корр. РАН Д. И. Трубецков, аспирант (ныне кандидат наук, доцент кафедры физики открытых систем) О. И. Москаленко, доцент, кандидат физико-математических наук И. С. Ремпен, профессор, кандидат физико-математических наук Ю. Г. Гамаюнов, аспирант (ныне кандидат наук) П. В. Попов



СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Бабков Лев Михайлович – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, зав. кафедрой теоретической физики. E-mail: babkov@sgu.ru

Бугоркова Татьяна Васильевна – Федеральное казенное учреждение здравоохранения Российский научно-исследовательский противочумный институт «Микроб», Саратов, старший научный сотрудник. E-mail: rusrap1@microbe.ru

Видяева Надежда Андреевна – Федеральное казенное учреждение здравоохранения Российский научно-исследовательский противочумный институт «Микроб», Саратов, старший научный сотрудник. E-mail: rusrap1@microbe.ru

Гребенюк Константин Александрович – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, кафедра радиотехники и электродинамики, доцент. E-mail: Konstantinag@yandex.ru

Давидович Михаил Владимирович – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, кафедра радиотехники и электродинамики, профессор. E-mail: DavidovichMV@info.sgu.ru

Давыдова Надежда Александровна – Институт физики НАН Украины, Киев, Украина, ведущий научный сотрудник. E-mail: davydova@iop.kiev.ua

Диков Олег Викторович – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, кафедра оптики и биофотоники, аспирант. E-mail: dikov_oleg@list.ru

Ерохин Павел Сергеевич – Федеральное казенное учреждение здравоохранения Российский научно-исследовательский противочумный институт «Микроб», Саратов, младший научный сотрудник. E-mail: rusrap1@microbe.ru

Жарков Юрий Дмитриевич – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, НИИ ЕН СГУ, главный научный сотрудник. E-mail: dmitrievbs@info.sgu.ru

Зайко Юрий Николаевич – Поволжский институт управления им. П. А. Столыпина, кафедра прикладной информатики и информационных технологий в управлении, доцент. E-mail: zymick@rambler.ru

Зиганшина Ольга Дмитриевна – Саратовский государственный технический университет им. Ю. А. Гагарина, кафедра «Информационные системы и технологии», доцент. E-mail: ziganshinaod@front.ru

Левин Юрий Иванович – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, декан факультета нелинейных процессов, зав. кафедрой физики открытых систем. E-mail: levin@nonlin.sgu.ru

Качула Владимир Иванович – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, кафедра оптики и биофотоники, аспирант. E-mail: VladimirVladimir@yandex.ru

Коннов Николай Павлович – Федеральное казенное учреждение здравоохранения Российский научно-исследовательский противочумный институт «Микроб», Саратов, главный научный сотрудник. E-mail: rusrap1@microbe.ru

Короновский Алексей Александрович – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, кафедра физики открытых систем, профессор. E-mail: alkor@nonlin.sgu.ru

Кузнецов Олег Святославович – Федеральное казенное учреждение здравоохранения Российский научно-исследовательский противочумный институт «Микроб», Саратов, научный сотрудник. E-mail: rusrap1@microbe.ru

Лавкин Александр Григорьевич – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, кафедра информационных систем и технологий, профессор. E-mail: tmf@sgu.ru

Медведев Борис Абрамович – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, кафедра общей физики, доцент. E-mail: bmedvedev@yandex.ru

Моисейкина Елена Александровна – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, кафедра теоретической физики, аспирантка. E-mail: babkov@sgu.ru

Неганова Анастасия Юрьевна – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, кафедра оптики и биофотоники, студентка. E-mail: neganovanasty@gmail.com

Нечаев Владимир Владимирович – Саратовский государственный технический университет им. Ю. А. Гагарина, кафедра «Физика», доцент. E-mail: VL-Nechaev@yandex.ru

Осина Наталья Александровна – Федеральное казенное учреждение здравоохранения Российский научно-исследовательский противочумный институт «Микроб», Саратов, заведующий лабораторией молекулярной диагностики. E-mail: rusrap1@microbe.ru

Перепелицына Ольга Александровна – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, кафедра оптики и биофотоники, доцент. E-mail: olga-optics@yandex.ru

Постнов Дмитрий Энгелевич – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, кафедра оптики и биофотоники, профессор. E-mail: postnovdmitry@googlegmail.com

Рябухо Владимир Петрович – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, кафедра оптики и биофотоники, профессор. E-mail: rvp@sgu.ru



Савонин Сергей Александрович – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, кафедра оптики и биофотоники, аспирант. E-mail: savonin@rambler.ru

Ситалиева Рита Сергалиевна – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, кафедра теоретической физики, студентка. E-mail: tmf@sgu.ru

Смолянский Петр Игоревич – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, кафедра теоретической физики, студент. E-mail: tmf@sgu.ru

Смолянский Станислав Александрович – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, кафедра теоретической физики, профессор. E-mail: smol@sgu.ru

Сучкова Наталья Константиновна – Саратовский государственный технический университет им. Ю. А. Гагарина, кафедра

«Информационные системы и технологии», студентка. E-mail: Rinoa_27@mail.ru

Тараканов Александр Викторович – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, кафедра теоретической физики, доцент. E-mail: tmf@sgu.ru

Уткин Денис Валерьевич – Федеральное казенное учреждение здравоохранения Российский научно-исследовательский противочумный институт «Микроб», Саратов, ведущий научный сотрудник. E-mail: rusrap1@microbe.ru

Храмов Александр Евгеньевич – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, кафедры электроники, колебаний и волн, профессор. E-mail: aeh@nonlin.sgu.ru

Чертилин Александр Викторович – Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, кафедра теоретической физики, студент. E-mail: tmf@sgu.ru



INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Babkov Lev Mikhailovich – Saratov State University, head of chair of theoretical physics. E-mail: babkov@sgu.ru

Bugorkova Tatyana Vasil'evna – Russian Research Anti-Plague Institute «Microbe», Saratov, senior researcher. E-mail: rusrapi@microbe.ru

Chertilin Alexander Viktorovich – Saratov State University, chair of theoretical physics, student. E-mail: tmf@sgu.ru

Davidovich Mikhail Vladimirovich – Saratov State University, chair of radio engineering and electrodynamics, professor. E-mail: DavidovichMV@info.sgu.ru

Davydova Nadezda Alexandrovna – Institute of Physics NAS Ukraine, Kiev, senior researcher. E-mail: davydova@iop.kiev.ua

Dikov Oleg Viktorovich – Saratov State University, chair of optics and biophotonics, postgraduate student. E-mail: dikov_oleg@list.ru

Erokhin Pavel Sergeevich – Russian Research Anti-Plague Institute «Microbe», Saratov, junior researcher. E-mail: rusrapi@microbe.ru

Grebnyuk Konstantin Alexandrovich – Saratov State University, chair of radio engineering and electrodynamics, lecturer. E-mail: Konstantinag@yandex.ru

Hramov Alexander Evgenievich – Saratov State University, chair of electronics, oscillations and waves, professor. E-mail: aeh@nonlin.sgu.ru

Kachula Vladimir Ivanovich – Saratov State University, chair of optics and biophotonics, postgraduate student. E-mail: VladimirVladimir@yandex.ru

Konnov Nicolai Pavlovich – Russian Research Anti-Plague Institute «Microbe», Saratov, chief scientific colleague. E-mail: rusrapi@microbe.ru

Koronovskii Alexey Alexandrovich – Saratov State University, chair of physics of open systems, professor. E-mail: alkor@nonlin.sgu.ru

Kuznetsov Oleg Svyatoslavovich – Russian Research Anti-Plague Institute «Microbe», Saratov, scientific employee. E-mail: rusrapi@microbe.ru

Lavkin Alexandr Grigor'evich – Saratov State University, chair of information systems and technologies, professor. E-mail: tmf@sgu.ru

Levin Yuriy Ivanovich – Saratov State University, dean of faculty of nonlinear processes, head of chair of physics of open systems. E-mail: levin@nonlin.sgu.ru

Medvedev Boris Abramovich – Saratov State University, chair of general physics, lecturer. E-mail: bmedvedev@yandex.ru

Moisejkina Elena Alexandrovna – Saratov State University, chair of theoretical physics, postgraduate student. E-mail: babkov@sgu.ru

Nechaev Vladimir Vladimirovich – Saratov State Technical University, chair of physics, lecturer. E-mail: VL-Nechaev@yandex.ru

Neganova Anastasia Yuryevna – Saratov State University, chair of optics and biophotonics, student. E-mail: neganovanasty@gmail.com

Ossina Natalia Aleksandrovna – Russian Research Anti-Plague Institute «Microbe», Saratov, chief of laboratory of molecular diagnostics. E-mail: rusrapi@microbe.ru

Perepelitsyna Olga Alexandrovna – Saratov State University, chair of optics and biophotonics, lecturer. E-mail: olga-optics@yandex.ru

Postnov Dmitry Engelevich – Saratov State University, chair of optics and biophotonics, professor. E-mail: postnovdmitry@googlegmail.com

Ryabukho Vladimir Petrovich – Saratov State University, chair of optics and biophotonics, professor. E-mail: rvp@sgu.ru

Savonin Sergey Alexandrovich – Saratov State University, chair of optics and biophotonics, postgraduate student. E-mail: savonin@rambler.ru

Sitalieva Rita Sergalievna – Saratov State University, chair of theoretical physics, student. E-mail: tmf@sgu.ru

Smolyansky Peter Igorevich – Saratov State University, chair of theoretical physics, student. E-mail: smol@sgu.ru

Smolyansky Stanislav Alexandrovich – Saratov State University, chair of theoretical physics, professor. E-mail: smol@sgu.ru

Suchkova Natalia Konstantinovna – Saratov State Technical University, chair of information systems and technology, student. E-mail: Rinoa_27@mail.ru

Tarakanov Alexander Viktorovich – Saratov State University, chair of theoretical physics, lecturer. E-mail: tmf@sgu.ru

Utkin Denis Veler'evich – Russian Research Anti-Plague Institute «Microbe», Saratov, leading researcher. E-mail: rusrapi@microbe.ru



Vidyaeva Nadezhda Andreevna – Russian Research Anti-Plague Institute «Microbe», Saratov, senior researcher. E-mail: rusrapi@microbe.ru

Zharkov Yuriy Dmitrievich – Saratov State University, Research Institute of Natural Science, senior researcher. E-mail: dmitrievbs@info.sgu.ru

Zayko Yuriy Nikolaevich – Stolypin's Volga Regional Institute of Control, Saratov, chair of applied informatics and information technologies in control, lecturer. E-mail: zyrnick@rambler.ru

Ziganshina Olga Dmitrievna – Saratov State Technical University, chair of information systems and technology, lecturer. E-mail: ziganshinaod@front.ru



Подписка на II полугодие 2012 года

Индекс издания по каталогу ОАО Агентства «Роспечать» 36015,
раздел 39 «Физико-математические науки. Химические науки».
Журнал выходит 2 раза в год.

Подписка оформляется по заявочным письмам
непосредственно в редакции журнала.

Заявки направлять по адресу:

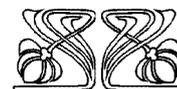
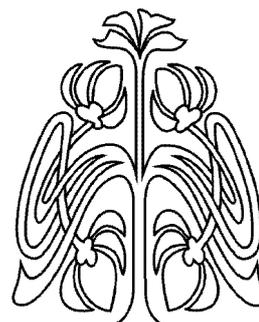
410012, Саратов, Астраханская, 83.

Редакция журнала «Известия Саратовского университета».

Тел. (845-2) 52-26-85, 52-50-04; факс (845-2) 27-85-29;

e-mail: tmf@sgu.ru

Каталожная цена одного выпуска 300 руб.



ПРИЛОЖЕНИЯ

