



ФИЗИКА

УДК 537.8:621.371

ИНТЕГРАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ФОТОННО-КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ВОЛНОВОДОВ

М.В. Давидович, Ю.В. Стефюк

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

Получены интегральные и интегродифференциальные уравнения фотонно-кристаллических волноводов с бесконечными и с конечными квазипериодическими диэлектрическими оболочками. Предварительно рассмотрены уравнения для двумерно-периодического фотонного кристалла как с магнитодиэлектрическими, так и с металлическими включениями. Приведены соответствующие численные результаты.

Ключевые слова: фотонные кристаллы, диэлектрические волноводы, фотонно-кристаллические волноводы, интегральные уравнения, дисперсия.

INTEGRAL EQUATIONS FOR PHOTONIC CRYSTAL FIBERS

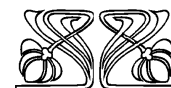
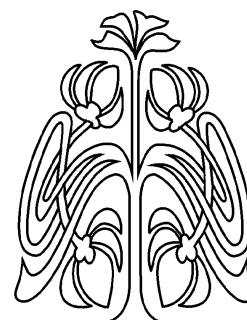
M.V. Davidovich, J.V. Stephuk

The integral and integrodifferential equations for photonic crystal waveguides (fibers) have been obtained both for finite and infinite dimensions of quasiperiodic dielectric coverings. Previously the equations for two-dimensional periodic photonic crystals with magnetodielectric and metallic periodic inclusions have been considered. The corresponding numerical results are presented.

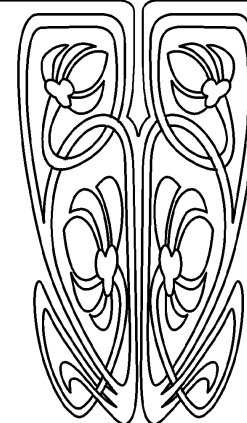
Key words: photonic crystals, dielectric waveguides, photonic crystal fibers, integral equations, dispersion.

Введение

В последнее время широко используются и исследуются волноводы с оболочкой из метаматериалов в виде фотонных кристаллов (ФК) – фотонно-кристаллические волноводы (ФКВ) [1–3]. Имеется несколько типов таких волноводов, один из которых – волновод с полый сердцевинной, соответствующий диэлектрическим волноводам (ДВ) типа «полый канал в диэлектрике» (ПКД) [4–9]. Принцип работы таких ДВ и ФКВ основан на распространении в вакууме (сердцевине или канале) под малыми углами к оболочке при хорошем отражении от нее лучей, соответствующих модам. Указанные волноводы всегда являются многомодовыми с основной модой HE_{11} , вырожденной по поляризации, при этом с ростом частоты угол скольжения уменьшается, модуль коэффициента отражения от оболочки увеличивается, потери падают за счет преимущественного распространения в вакууме, а число распространяющихся мод растет. Все такие моды являются вытекающими, а потери основной и нескольких первых мод обусловлены в основном вытеканием и слабо зависят от потерь в толстой оболочке, в которую они почти не проникают. Для ФКВ предполагается наличие зоны bandgap (полного непропускания) соответствующего двумерно-периодического



НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ





ФК. Если бы полоса основной моды соответствовала этой зоне, а все высшие моды имели более высокочастотные отсечки, то это (с точностью до поляризационной ориентации) означало бы одномодовость ФКВ для моды HE_{11} . Однако возмущение (полая сердцевина) приводит к нарушению зонной структуры бесконечно-периодического ФК и к разрушению зон bandgap (непропускания). Так, в такой зоне может появиться разрешенная полоса (дисперсионная ветвь). Наличие потерь в диэлектрике бесконечного ФК также приводит к разрушению зон bandgap [10], при этом дисперсионные ветви соответствующих прямых и обратных волн соседних зон Бриллюэна смыкаются, а в полосе bandgap возможно распространение волн с большими потерями (для двумерных ФК удобнее говорить о дисперсионных поверхностях). К таким же эффектам приводит и конечность ФК [10], т.е. наличие нескольких или нескольких десятков периодически повторяющихся слоев оболочки, что всегда имеет место в реальных ФКВ. Все указанные эффекты связаны с нарушением периодичности. Так, потери в материале нарушают периодичность из-за затухающего характера волн, а конечный ФК представляет собой, по сути, многополосовой фильтр, заграждение в полосах режекции которого всегда конечно. В конечном ФКВ также возможны и медленные поверхностные моды оболочки. Рассмотренный выше тип ФКВ, когда из сердцевины ФК удаляется материал, можно характеризовать как «акцепторный». Используются также и ФКВ «донорного» типа, когда в удаленную полость помещается другой диэлектрик (обычно оптически более плотный). Для анализа мод в ФКВ часто используют метод сверхрешетки (т.е. двумерно-периодическое продолжение структуры реального ФКВ в поперечных направлениях) в сочетании с методом плоских волн [11]. Указанный подход является приближенным, поскольку не учитывает конечность оболочки. Он, в частности, не позволяет рассчитать потери ФКВ – как связанные с потерями в диэлектрике, так и с вытеканием.

Несколько десятилетий назад были предложены ДВ типа полый канал с многослойной квазипериодической оболочкой, об-

ладающие сходными с ФКВ свойствами [5]. Их анализ возможен, например, на основе метода матриц передачи [8, 9] или на основе методов типа прогонки [9]. Подобные волноводы с многослойной неперриодической оболочкой могут демонстрировать улучшение селекции мод по потерям [8]. Их удобно использовать в миллиметровом, субмиллиметровом и квазиоптическом диапазонах. Для выбора направления линейной поляризации основной волны в таких ДВ используется поляризационная решетка из тонких параллельных металлических проволочек, ориентированных вдоль возбуждающего электрического поля (в КВЧ диапазоне это обычно прямоугольный волновод). Две повернутые на некоторый угол такие решетки представляют собой аттенуатор.

В данной работе предложены интегральные (ИУ) и интегродифференциальные уравнения (ИДУ) для ФКВ с неограниченной и ограниченной оболочками и приведен ряд численных результатов. Рассмотрение ведется на основе функций Грина (ФГ) двумерно-периодически расположенных источников (2-D периодических ФГ), а также на основе квазипериодических ФГ [10]. Как частный случай, указанные уравнения применимы для многослойных ДВ класса ПКД.

1. Функция Грина 2-D ФК и интегральные уравнения

Рассмотрим бесконечный однородный и изотропный магнитодиэлектрик с диэлектрической проницаемостью ε и магнитной проницаемостью μ , в который периодически в плоскости (x, y) внедрены одинаковые металлические и/или магнитодиэлектрические объекты, однородные по оси z . Зависимость волн в такой структуре будем искать в виде $\exp(j\omega t - j\gamma z)$, где $\gamma = k_z$ соответствует z -компоненте волнового вектора \vec{k} . Пусть металлические объекты в ячейке периодичности с номером 0 характеризуются совокупной двумерной областью с площадью поперечного сечения $\Sigma_M \in S_0$ (и совокупным ограничивающим контуром L_M), расположенной в элементарной ячейке S_0 . Область Σ_M может быть многосвязной. Принадлежность объекта к металлическому типу означает выполнение



на его поверхности импедансного граничного условия $\vec{v} \times \vec{E} = Z(\vec{v} \times (\vec{v} \times \vec{H}))$, где Z – поверхностный импеданс, а \vec{v} – внешняя нормаль в области Σ_M к контуру L_M . Принадлежность объекта к магнитодиэлектрическому типу означает, что он электродинамически эквивалентен объемным электрическим и магнитным токам поляризации с плотностями соответственно

$$\begin{aligned}\vec{J}_p^e(\vec{r}) &= j\omega\varepsilon_0(\varepsilon(\vec{r}) - \varepsilon I)\vec{E}(\vec{r}), \\ \vec{J}_p^m(\vec{r}) &= j\omega\mu_0(\mu(\vec{r}) - \mu I)\vec{H}(\vec{r}),\end{aligned}$$

расположенными в области $S_D \in S_0$. Здесь ε, μ – тензоры макроскопических диэлектрической и магнитной проницаемостей соответствующих периодических включений, I – единичный тензор.

Периодическое внедрение означает трансляционную симметрию, т.е. наличие прими-

тивных трансляционных векторов \vec{a}_i (периодов решетки) и векторов периода $\vec{p} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 = A\vec{n}$. Здесь \vec{n} – вектор сдвига (нумерации) ячеек с целочисленными координатами $n_i, i = 1, 2$, а A – трансляционная матрица (составленная из векторов-столбцов \vec{a}_i). ФК разбивается на ячейки S_N , нумеруемые вектором \vec{n} или мультииндексом $N = (n_1, n_2)$ с одинаковыми площадями $|S_N|$ поверхностей, для которых имеет место соотношение $|S_N| = |S_0| = |\vec{a}_1 \times \vec{a}_2| = S_0$.

Для решения подобных задач наиболее удобен метод функций Грина (ФГ) периодически расположенных источников [10, 12–16], приводящий к ИУ в одной (обычно в нулевой) ячейке S_0 , а точнее в области S_D и на контуре L_M . Такая скалярная ФГ имеет вид [10]

$$\begin{aligned}\tilde{G}(\vec{k}_0\sqrt{\varepsilon\mu}, \vec{k}_\perp, \vec{r} - \vec{r}') &= \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{\vec{n}} \frac{\exp(\pm j(\vec{k}_\perp + g\vec{n})(\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp) - jk_z(z - z'))}{(\vec{k}_\perp + g\vec{n})^2 + k_z^2 - k_0^2\varepsilon\mu} dk_z = \\ &= \frac{-j}{2S_0} \sum_{\vec{n}} \frac{\exp\left(\pm j(\vec{k}_\perp + g\vec{n})(\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp) - j\sqrt{k_0^2\varepsilon\mu - (\vec{k}_\perp + g\vec{n})^2}|z - z'|\right)}{\sqrt{k_0^2\varepsilon\mu - (\vec{k}_\perp + g\vec{n})^2}}.\end{aligned}\quad (1)$$

Здесь $k_0 = \omega/c$ – волновое число, трехмерное суммирование осуществляется по вектору \vec{n} (мультииндексу N) в бесконечных пределах $-\infty < n_i < \infty$, $g = 2\pi A^{-1}$ – тензор обратной решетки, \vec{k}_\perp – приведенный волновой вектор, связанный с вектором фазовых сдвигов на ячейку: $\vec{\varphi} = A\vec{k}_\perp$. Соответ-

ственно $\vec{k}_\perp = A^{-1}\vec{\varphi}$. В формуле (1) можно брать любой знак, поскольку в бесконечной периодической среде прямые и обратные волны неразличимы. Будем брать знак «минус». Если векторы \vec{a}_i ортогональны и направлены соответственно по осям x, y , то матрица A становится диагональной, а вид ФГ (1) упрощается:

$$\begin{aligned}\tilde{G}(\vec{k}_0\sqrt{\varepsilon\mu}, \vec{k}, \vec{r}) &= \frac{1}{2\pi a_1 a_2} \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} \sum_{n_2=-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-j(k_1 + g_1 n_1)x - j(k_2 + g_2 n_2)y - jk_3 z)}{(k_1 + g_1 n_1)^2 + (k_2 + g_2 n_2)^2 + k_3^2 - k_0^2\varepsilon\mu} dk_3 = \\ &= \frac{-j}{2a_1 a_2} \sum_{n_1=-\infty}^{\infty} \sum_{n_2=-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left(-j(k_1 + g_1 n_1)x - j(k_2 + g_2 n_2)y - j\sqrt{k_0^2\varepsilon\mu - (k_1 + g_1 n_1)^2 - (k_2 + g_2 n_2)^2}|z|\right)}{\sqrt{k_0^2\varepsilon\mu - (k_1 + g_1 n_1)^2 - (k_2 + g_2 n_2)^2}}.\end{aligned}\quad (2)$$



Здесь $\vec{g} = (2\pi/a_1)\vec{x}_0 + (2\pi/a_2)\vec{y}_0$ – вектор обратной решетки. Индексы 1 и 2 будем сопоставлять x и y , если векторы \vec{a}_1, \vec{a}_2 коллинеарны орт-векторам \vec{x}_0, \vec{y}_0 . ИУ и ИДУ для различных включений с ФГ трехмерно-периодической (3-D), двумерно-периодической (2-D) и одномерно-периодической (1-D) ФГ сформулированы в работе [10]. Электромагнитное поле создается источниками в виде плотности поверхностного электрического

тока \vec{J}_τ на металлических поверхностях и токами поляризации во включениях. Приведенные ФГ (1), (2) пригодны для любых зависимостей полей от z . Если же использовать экспоненциальную зависимость полей и тока с волновым числом $k_z = \gamma$, то интегрирование по z' выполняется элементарно, при этом в ИУ и ИДУ появляется множитель $\exp(-j\gamma z)$. Он, в частности, появляется в зависимости электрических и магнитных вектор-потенциалов:

$$\vec{A}^e(\vec{r}) = \oint_{L_M} \vec{G}(k_0\sqrt{\varepsilon\mu}, \vec{k}, \vec{r} - \vec{r}') \vec{J}_\tau(\vec{r}') dl' dz' + j\omega\varepsilon_0 \int_V \vec{G}(k_0\sqrt{\varepsilon\mu}, \vec{k}, \vec{r} - \vec{r}') [\varepsilon(\vec{r}') - \varepsilon] \vec{E}(\vec{r}') d^3\vec{r}', \quad (3)$$

$$\vec{A}^m(\vec{r}) = j\omega\mu_0 \int_V \vec{G}(k_0\sqrt{\varepsilon\mu}, \vec{k}, \vec{r} - \vec{r}') [\mu(\vec{r}') - \mu] \vec{H}(\vec{r}') d^3\vec{r}', \quad (4)$$

через которые стандартно выражаются поля. В зависимости (3) и (4) входят полные поля волновода, при этом плотность тока \vec{J}_τ определена на поверхности цилиндра с конту-

ром L_M . Сокращая на указанный экспоненциальный множитель, получим парные гиперсингулярные ИУ для электрического и магнитного поля, а также и тока:

$$\vec{E}(\vec{r}_\perp) = [(\nabla_\perp - j\gamma\vec{z}_0) \otimes (\nabla_\perp - j\gamma\vec{z}_0) + k_0^2\varepsilon\mu] \left\{ \int_{S_D} \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp) \kappa_\varepsilon(\vec{r}'_\perp) \vec{E}(\vec{r}'_\perp) dx' dy' + \right. \\ \left. + (j\omega\varepsilon_0\varepsilon)^{-1} \oint_{L_M} \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp) \vec{J}_\tau(\vec{r}'_\perp) dl' \right\} - j\omega\mu_0 (\nabla_\perp - j\gamma\vec{z}_0) \times \int_{S_D} \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp) \kappa_\mu(\vec{r}'_\perp) \vec{H}(\vec{r}'_\perp) dx' dy', \quad (5)$$

$$\vec{H}(\vec{r}_\perp) = j\omega\varepsilon_0 (\nabla_\perp - j\gamma\vec{z}_0) \times \int_{S_D} \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp) \kappa_\varepsilon(\vec{r}'_\perp) \vec{E}(\vec{r}'_\perp) dx' dy' + \\ + [(\nabla_\perp - j\gamma\vec{z}_0) \otimes (\nabla_\perp - j\gamma\vec{z}_0) + k_0^2\varepsilon\mu] \int_{S_D} \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp) \kappa_\mu(\vec{r}'_\perp) \vec{H}(\vec{r}'_\perp) dx' dy'. \quad (6)$$

В приведенных уравнениях величина $\chi_{\varepsilon\mu} = \sqrt{k_0^2\varepsilon\mu - \gamma^2}$ представляет собой поперечное волновое число в основе, тензоры $\kappa_\varepsilon(\vec{r}_\perp) = \varepsilon(\vec{r}_\perp)/\varepsilon - I$ и $\kappa_\mu(\vec{r}_\perp) = \mu(\vec{r}_\perp)/\mu - I$

соответствуют восприимчивостям включений соответственно для магнитоэлектрической основы, \otimes – символ тензорного (диадного) произведения векторов, 2-D ФГ $\ddot{G}_{\varepsilon\mu}$ имеет вид

$$\ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_0|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp) = \frac{1}{S_0} \sum_{\vec{n}} \frac{\exp(\pm j(\vec{k}_\perp + g\vec{n})(\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp))}{(\vec{k}_\perp + g\vec{n})^2 + \gamma^2 - k_0^2\varepsilon\mu} = \sum_{\vec{n}} G_{\varepsilon\mu}^{(2)}(\chi_0|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp - \vec{p}) \exp(-j\vec{n} \cdot \vec{\varphi}). \quad (7)$$

Здесь введена двумерная скалярная ФГ [17], выражающаяся через функцию Ганкеля второго рода индекса 0:

$$G_{\varepsilon\mu}^{(2)}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_\perp) = -(j/4)H_0^{(2)}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_\perp). \quad (8)$$

Решать ИУ (5) и (6) следует одновременно. При этом, задавая k_1 и k_2 , из решения можно определить дисперсию $\gamma = \gamma(k_0)$. Объемно-поверхностные уравнения (5), (6) являются наиболее общими для продольных



волн в 2-D ФК, при этом они решаются в «двумерном объеме» – на поверхности S_0 и на «одномерной поверхности» – контуре L_M . Обычно желательно сформулировать уравнения только относительно электрического или магнитного поля. Для приведенных ИУ это можно сделать, выразив \vec{E} и \vec{H} из уравнений Максвелла и подставив их под интегралы соответственно в уравнения (6) и (5). При этом получаются ИДУ. Для идеально проводящих включений с замкнутым контуром контурный интеграл можно преобразовать, выделив внеинтегральный член. Однако в высокочастотных диапазонах металлические включения обладают заметным импедансом. Вводя соотношение $\vec{J}_\tau = \sigma \vec{E}_\tau$, мы не рассматриваем поля внутри контура L_M , при этом учитывается как касательная к контуру в его плоскости компонента поля, так и E_z . В квазиоптическом и оптическом диапазоне следует учитывать электрофизические свойства металлов [18], при этом металл становится подобен плазме с соответствующими диэлектрическими свойствами, а контурный интеграл превращается в соответствующий

$$\vec{E}(\vec{r}_\perp) = [(\nabla_\perp - j\gamma\vec{z}_0) \otimes (\nabla_\perp - j\gamma\vec{z}_0) + k_0^2 \varepsilon \mu] \int_{S_D} \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp|) \kappa_\varepsilon(\vec{r}'_\perp) \vec{E}(\vec{r}'_\perp) dx' dy', \quad (9)$$

$$\vec{H}(\vec{r}_\perp) = j \frac{(\nabla_\perp - j\gamma\vec{z}_0) \times \vec{E}(\vec{r}_\perp)}{\omega \mu_0 \mu} = j \omega \varepsilon_0 (\nabla_\perp - j\gamma\vec{z}_0) \times \int_{S_D} \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp|) \kappa_\varepsilon(\vec{r}'_\perp) \vec{E}(\vec{r}'_\perp) dx' dy'. \quad (10)$$

Общий интеграл соотношения (10) показывает, что электрическое поле равно интегралу в правой части (10), умноженному на k_0^2 плюс градиент некой произвольной функции: $(\nabla_\perp - j\gamma\vec{z}_0)F(\vec{r}_\perp)$. Если взять эту функцию в виде дивергенции от указанного интеграла

$$F(\vec{r}_\perp) = (\nabla_\perp - j\gamma\vec{z}_0) \times \int_{S_D} \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp|) \kappa_\varepsilon(\vec{r}'_\perp) \vec{E}(\vec{r}'_\perp) dx' dy',$$

$$\vec{H}(\vec{r}_\perp) = (\nabla_\perp - j\gamma\vec{z}_0) \times \int_{S_D} \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp|) \kappa_\varepsilon(\vec{r}'_\perp) \varepsilon^{-1}(\vec{r}'_\perp) (\nabla_\perp - j\gamma\vec{z}_0) \times \vec{H}(\vec{r}'_\perp) d^2 r', \quad (12)$$

интеграл по поперечному сечению Σ . Металлические включения в ФК оптического диапазона практически не используются, как не используется и магнитная основа, т.е. обычно $\mu = 1$. Магнитные включения, например, ферритовые, используются, но реже и в основном для управления магнитным полем дисперсионными свойствами. Таким образом, ФКВ обычно представляет собой диэлектрическую основу, в которую периодически в поперечных направлениях включены диэлектрические цилиндрические тела или полости. Заметим, что полость представляет собой дефицит тока поляризации основы, т.е. ИУ (5), (6) в этом случае описывают такие ФК, для которых решение ищется только в полости, при этом $\kappa_\varepsilon(\vec{r}_\perp) = (\varepsilon^{-1} - 1)I$, $\kappa_\mu(\vec{r}_\perp) = (\mu^{-1} - 1)I$. Часто полости заполняются другим диэлектриком, например, одноосным нематическим жидким кристаллом, что позволяет электрически управлять дисперсией [19]. В случае конечных ФК следует использовать ФГ вакуума ($\varepsilon = \mu = 1$). Далее будем рассматривать наиболее характерный для ФКВ случай $\mu = 1$, $\mu = I$. В результате выражения (5) и (6) можно записать в виде

то уравнения (9) и (10) совпадут. Используя известное векторное тождество и уравнение для ФГ, уравнение (9) можно переписать так:

$$\varepsilon(\vec{r}_\perp) \vec{E}(\vec{r}_\perp) = (\nabla_\perp - j\gamma\vec{z}_0) \times (\nabla_\perp - j\gamma\vec{z}_0) \times \int_{S_D} \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp|) \kappa_\varepsilon(\vec{r}'_\perp) \vec{E}(\vec{r}'_\perp) dx' dy'. \quad (11)$$

Удобно использовать также ИДУ для магнитного поля:



получающееся из уравнения (10) путем использования уравнения Максвелла в области S_D в виде $j\omega\vec{E}(\vec{r}'_{\perp}) = \varepsilon^{-1}(\vec{r}'_{\perp})(\nabla_{\perp} - j\gamma\vec{z}_0) \times \vec{H}(\vec{r}'_{\perp})$. Подстановкой этого соотношения в уравнения (9) или (11) получим ИДУ для магнитного поля. Такие уравнения использовать неудобно. Следует заметить, что ИУ (9) приводит к большому числу эквивалентных ИДУ для электрического поля, нагруженных контурными интегралами по контуру L_D области S_D и имеющих пониженную сингулярность ядер. Такие преобразования можно выполнить несколькими способами. Один из них – перенос однократный или двукратный

$$\begin{aligned} \nabla_{\perp}\nabla_{\perp} \cdot \int_{S_D} \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_{\perp} - \vec{r}'_{\perp}|) \kappa_{\varepsilon}(\vec{r}'_{\perp}) \vec{E}(\vec{r}'_{\perp}) dx' dy' &= \nabla_{\perp} \int_{S_D} \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_{\perp} - \vec{r}'_{\perp}|) \nabla'_{\perp} \cdot (\kappa_{\varepsilon}(\vec{r}'_{\perp}) \vec{E}(\vec{r}'_{\perp})) dx' dy' - \\ - \nabla_{\perp} \oint_{L_D} \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_{\perp} - \vec{r}'_{\perp}|) \vec{\nu}(\vec{r}'_{\perp}) \cdot (\kappa_{\varepsilon}(\vec{r}'_{\perp}) \vec{E}(\vec{r}'_{\perp})) dl' &= \int_{S_D} \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_{\perp} - \vec{r}'_{\perp}|) \nabla'_{\perp} \nabla'_{\perp} \cdot (\kappa_{\varepsilon}(\vec{r}'_{\perp}) \vec{E}(\vec{r}'_{\perp})) dx' dy' - (13) \\ - \nabla_{\perp} \oint_{L_D} \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_{\perp} - \vec{r}'_{\perp}|) \vec{\nu}(\vec{r}'_{\perp}) \cdot (\kappa_{\varepsilon}(\vec{r}'_{\perp}) \vec{E}(\vec{r}'_{\perp})) dl' &- \oint_{L_D} \vec{\nu}(\vec{r}'_{\perp}) \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_{\perp} - \vec{r}'_{\perp}|) \nabla'_{\perp} \cdot (\kappa_{\varepsilon}(\vec{r}'_{\perp}) \vec{E}(\vec{r}'_{\perp})) dl'. \end{aligned}$$

Здесь использована теорема о дивергенции (Гаусса) и теорема о градиенте. В уравнениях типа (12) следует использовать теорему о роторе. При двойном переносе ядро имеет слабую логарифмическую сингулярность, однако использовать подобные ИДУ проблематично из-за алгоритмических сложностей при вычислении контурных интегралов, особенно если область имеет сложную конфигурацию. Альтернативные методы получения ИДУ основываются на лемме Лоренца, формулах Стрэттона–Чу и формулах Грина. Понижение сингулярности возможно и путем непосредственного интегрирования по координатам точки наблюдения [20].

Другой подход основан на получении сингулярных ИУ. Пользуясь значениями функции Ганкеля при малых аргументах, особенность ядра в (13) представим в виде $\ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}R) \sim (2\pi)^{-1} \ln(2/(\gamma_0 k_0 \sqrt{\varepsilon\mu}R))$, где $\gamma_0 = 1.7810724$, $R = |\vec{r}_{\perp} - \vec{r}'_{\perp}|$. Поэтому можно записать $\ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}R) = \Phi(R) + \delta\ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}R)$, где

действия указанных операторов с ФГ на подинтегральную функцию. Именно функция $\ddot{G}_{\varepsilon\mu}$ логарифмически сингулярная. Действуя на нее оператором $\nabla_{\perp} \otimes \nabla_{\perp} \equiv (\text{grad})(\text{div}) \equiv \nabla_{\perp}\nabla_{\perp} \cdot$, получаем гиперсингулярное ядро с неинтегрируемой особенностью типа $|\vec{r}_{\perp} - \vec{r}'_{\perp}|^{-2}$. Поскольку $\nabla_{\perp} \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_{\perp} - \vec{r}'_{\perp}|) = -\nabla'_{\perp} \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_{\perp} - \vec{r}'_{\perp}|)$, где штрих у оператора набла означает дифференцирование по точке истока, то подобный перенос с использованием векторных интегральных теорем имеет вид

$\Phi(R) = -(2\pi)^{-1} \ln(R)$ – логарифмический потенциал, а $\delta\ddot{G}_{\varepsilon\mu}$ – функция регулярная. Для логарифмического потенциала обычным образом с использованием формулы Остроградского доказывается свойство дифференцирования его распределения с плотностью ρ [21]. Рассмотрим объемный двумерный потенциал

$$V(\vec{r}_{\perp}) = \int_{S_D} \rho(\vec{r}'_{\perp}) \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_{\perp} - \vec{r}'_{\perp}|) dx' dy'. \quad (14)$$

Очевидно, у него существуют первые производные. Окружим точку \vec{r}_{\perp} кругом S_{δ} радиуса δ . Очевидно, в области $S_D - S_{\delta}$ существуют все вторые производные потенциала (4). В области S_{δ} представим функцию $\ddot{G}_{\varepsilon\mu}$ указанным выше образом. Стягивая S_{δ} в точку и пользуясь теоремой о среднем [21], получим:



$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial x^2} V(\vec{r}_\perp) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\partial^2}{\partial y^2} V(\vec{r}_\perp) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{S_\delta} \rho(\vec{r}'_\perp) \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp) dx' dy' = -\frac{\rho(\vec{r}_\perp)}{2}. \quad (15)$$

Запишем уравнение (9) относительно поперечной и продольной частей поля:

$$\begin{aligned} \vec{E}_\perp(\vec{r}_\perp) = & -\frac{1}{2}(\kappa_\varepsilon(\vec{r}'_\perp)\vec{E}(\vec{r}'_\perp))_\perp + k_0^2 \varepsilon\mu \int_{S_D} \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp) (\kappa_\varepsilon(\vec{r}'_\perp)\vec{E}(\vec{r}'_\perp))_\perp dx' dy' + \\ & + \int_{S_D} ((\kappa_\varepsilon(\vec{r}'_\perp)\vec{E}(\vec{r}'_\perp)) \cdot \nabla_\perp) \nabla_\perp \delta \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp) dx' dy' + p.v. \int_{S_D} ((\kappa_\varepsilon(\vec{r}'_\perp)\vec{E}(\vec{r}'_\perp)) \cdot \nabla_\perp) \nabla_\perp \Phi(|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp|) dx' dy' - \\ & - j\gamma \int_{S_D} \nabla_\perp \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp) (\kappa_\varepsilon(\vec{r}'_\perp)\vec{E}(\vec{r}'_\perp))_z dx' dy', \quad (16) \\ E_z(\vec{r}_\perp) = & -j\gamma \int_{S_D} \nabla_\perp \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp) \cdot (\kappa_\varepsilon(\vec{r}'_\perp)\vec{E}(\vec{r}'_\perp)) dx' dy' + \\ & + (k_0^2 \varepsilon\mu - \gamma^2) \int_{S_D} \ddot{G}_{\varepsilon\mu}(\chi_{\varepsilon\mu}|\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp) (\kappa_\varepsilon(\vec{r}'_\perp)\vec{E}(\vec{r}'_\perp))_z dx' dy'. \end{aligned}$$

Здесь *p.v.* означает главное значение интеграла, получаемое при выкалывании δ -окрестности точки наблюдения. Все рассмотренные уравнения упрощаются для изотропных включений, для которых $\kappa_\varepsilon(\vec{r}'_\perp)$ скаляры, а также для однородных сред, для которых $\kappa_\varepsilon(\vec{r}'_\perp)$ – константы. При совпадении обоих случаев величина κ_ε может быть вынесена за знак интеграла.

2. Дисперсионные уравнения бесконечного 2-D ФК

Далее для простоты будем рассматривать ИУ и ИДУ только для электрического поля в ФК без магнитных и металлических включений. Дисперсионное уравнение (ДУ) для собственных волн определяет зависимость $F(k_0, \vec{k}_\perp, \gamma) = 0$ или $k_0 = f(\vec{k}_\perp, \gamma)$. Указанные функции зависят также от параметров, определяющих конфигурацию ФК. Для получения ДУ следует решать приведенные уравнения в области S_D . Введем обычным образом гильбертово пространство вектор-функций в области S_D со скалярным произведением

$$\begin{aligned} \langle \vec{F}_1, \vec{F}_2 \rangle_{S_D} &= \int_{S_D} \vec{F}_1^*(\vec{r}_\perp) \cdot \vec{F}_2(\vec{r}_\perp) dx dy, \\ \vec{F}_1, \vec{F}_2 &\in S_D. \end{aligned} \quad (17)$$

Пусть $\vec{E}(\vec{r}_\perp)$ – некоторая функция из указанного пространства. Пусть $\vec{E}_{S_D}(\vec{r}_\perp)$ – функция, получаемая при подстановке $\vec{E}(\vec{r}_\perp)$ в правые части приведенных выше уравнений, например, в (9) или (16), т.е. результат действия соответствующего интегрального или интегродифференциального оператора. Построим билинейный функционал

$$\begin{aligned} \Lambda(\vec{F}(\vec{r}_\perp), \vec{E}(\vec{r}_\perp), k_0, \vec{k}_\perp, \gamma) &= \\ &= \langle \vec{F}(\vec{r}_\perp), \vec{E}(\vec{r}_\perp) - \vec{E}_{S_D}(\vec{r}_\perp) \rangle, \end{aligned} \quad (18)$$

зависящий от параметров $k_0, \vec{k}_\perp, \gamma$. Его стационарное значение 0 достигается на точном решении задачи $\vec{E}_0(\vec{r}_\perp)$. При подстановке в уравнение (12) точного решения ДУ принимает вид

$$\Lambda(\vec{F}(\vec{r}_\perp), \vec{E}_0(\vec{r}_\perp), k_0, \vec{k}_\perp, \gamma) = 0. \quad (19)$$

Для приближенного получения указанного решения пробную и весовую функции необходимо представить в виде разложения по полной системе функций $\vec{u}_m(\vec{r}_\perp)$ рассмотренного пространства соответственно с коэффициентами α_m и β_m , а затем наложить условия экстремума $(\partial / \partial \beta_m^*) \Lambda = 0$, $m = 1, 2, \dots, M$ (здесь Λ – квадратичная форма, со-



ответствующая уравнению (19) при учете M функций). Тогда ДУ (19) приближенно имеет вид равенства нулю соответствующего определителя. При вычислении матричных элементов следует учитывать сингулярности ядер, которые во всех приведенных соотношениях являются интегрируемыми. В частности, при использовании ИУ (9) действие одного из операторов можно перенести на функцию \vec{F} . Если потребовать, чтобы нормальная компонента этой функции обращалась в нуль на контуре L_D , контурные интегралы не возникают. В этом смысле билинейный функционал удобнее, чем квадратичный, для которого $\vec{F} = \vec{E}$, и контурные интегралы при использовании ИУ (9) обычно появляются. В качестве базисов удобно использовать непрерывно-дифференцируемые двумерные векторные конечные элементы (КЭ), при этом достаточно легко аналитически определяются диагональные матричные элементы. Итак, считаем, что точное решение \vec{E}_0 и точное значение k_0 при заданных значениях \vec{k}_\perp и γ определены. Если бесконечный 2-D ФК имеет диэлектрические потери, величины \vec{k}_\perp и γ становятся комплексными. В этом случае положим $\vec{k}_\perp = 0$, т.е. будем искать комплексные значения $\gamma = \gamma' - j\gamma''$ при $\gamma', \gamma'' > 0$ и периодических полях в поперечных направлениях. В случае комплексных γ удобно задавать γ' и γ'' и для них искать k_0 . Если такое значение не найдено (не существует), следует изменить γ'' и продолжить процесс. Можно также искать γ , задавая k_0 . Поиск комплексных корней определителя большой размерности представляет собой сложную задачу, при этом возникают сложности классификации корней и мод. Поэтому более удобно использовать итерационные методы для одновременного нахождения корней функционалов и определения соответствующих им полей из ИУ.

3. Интегральные уравнения неограниченного квазипериодического ФКВ

Пусть бесконечный 2-D ФКВ представляет собой дефект ФК в виде акцепторных или донорных включений в одной или нескольких соседних ячейках, центр которых мы расположим в начале координат. В качестве акцепторного включения может, например, выступать полая сердцевина, а в качестве донорного – включение с проницаемостью $\tilde{\varepsilon}(\vec{r}_\perp)$, обычно (но не обязательно) оптически более плотного, чем ε . В частности, $\tilde{\varepsilon}(\vec{r}_\perp) = I$ соответствует акцепторному включению. Пусть указанная область занимает двумерный объем S_W , который состоит из минимального целого количества ячеек ФК, покрывающих неоднородность. Естественно, в ФКВ следует рассматривать лишь волны вдоль оси z , т.е. полагать $\vec{k}_\perp = 0$. При этом на больших расстояниях от неоднородности в поперечном направлении волна либо вытекает, либо носит поверхностный характер и экспоненциально затухает. В первом случае γ всегда комплексное, даже при отсутствии потерь в диэлектрике. Соответственно неоднородность приводит к тому, что полное поле $\vec{E}(\vec{r}_\perp)$ отличается от решения $\vec{E}_0(\vec{r}_\perp)$ на величину $\Delta\vec{E}(\vec{r}_\perp)$, т.е. $\vec{E}(\vec{r}_\perp) = \vec{E}_0(\vec{r}_\perp) + \Delta\vec{E}(\vec{r}_\perp)$, так же, как и изменяется постоянная распространения $\tilde{\gamma} = \gamma + \Delta\gamma$ при данном волновом числе k_0 . Соответственно для поправки $\Delta\vec{E}(\vec{r}_\perp)$ следует получить уравнение. Если волна поверхностная, то поле $\Delta\vec{E}(\vec{r}_\perp)$ затухает в поперечном направлении. Пусть S_0 – область, вне которой полем $\Delta\vec{E}(\vec{r}_\perp)$ можно пренебречь. Она включает в себя область неоднородности, а вне ее поле можно считать периодическим. В этом случае сформулировать уравнения наиболее просто. Неоднородность приводит к дополнительному току поляризации $\Delta\vec{J}_p(\vec{r}_\perp) = j\omega\varepsilon_0\delta\varepsilon\vec{E}(\vec{r}_\perp)$, $\delta\varepsilon = (\tilde{\varepsilon}(\vec{r}_\perp) - \varepsilon(\vec{r}_\perp)) / \varepsilon$. Этот ток отличен от нуля только в области S_W и только там в



ней, где $\delta\varepsilon \neq 0$. Все приведенные выше ИУ для собственных продольных волн ФК можно записать в виде

$$\begin{aligned} \bar{E}_0(\bar{r}_\perp) &= \\ &= \int_{S_D} \tilde{K}(\bar{r}_\perp, \bar{r}'_\perp, k_0, \gamma) \kappa_\varepsilon(\bar{r}'_\perp) \bar{E}_0(\bar{r}'_\perp) dx' dy', \end{aligned} \quad (20)$$

где $\tilde{K}(\bar{r}_\perp, \bar{r}'_\perp, k_0, \gamma)$ – некое ядро, зависящее от параметров. Оно для уравнений с внеинтегральными членами или контурными интегралами может включать в себя двумерные и одномерные дельта-функции, а также опера-

торы дифференцирования (для ИДУ). Указанное ядро разложимо в двумерный ряд

$$\begin{aligned} \tilde{K}(\bar{r}_\perp, \bar{r}'_\perp, k_0, \gamma) &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} K_{mn}(\bar{r}_\perp, \bar{r}'_\perp, k_0, \gamma) = \\ &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} K(\bar{r}_\perp, \bar{r}'_\perp - m\bar{a}_1 - n\bar{a}_2, k_0, \gamma). \end{aligned} \quad (21)$$

Этот ряд означает суммирование в уравнении (20) по всем источникам тока поляризации во всех ячейках. Учитывая дополнительный ток поляризации, запишем ИУ ФКВ:

$$\begin{aligned} \Delta \bar{E}(\bar{r}_\perp) &= \int_{S_0} \tilde{K}_0(\bar{r}_\perp, \bar{r}'_\perp, k_0, \gamma) \kappa_\varepsilon(\bar{r}'_\perp) \Delta \bar{E}(\bar{r}'_\perp) dx' dy' + \int_{S_D} \delta \tilde{K}(\bar{r}_\perp, \bar{r}'_\perp, k_0, \gamma, \tilde{\gamma}) \kappa_\varepsilon(\bar{r}'_\perp) \bar{E}_0(\bar{r}'_\perp) dx' dy' + \\ &+ \int_{S_0} \delta \tilde{K}_0(\bar{r}_\perp, \bar{r}'_\perp, k_0, \gamma, \tilde{\gamma}) \kappa_\varepsilon(\bar{r}'_\perp) \Delta \bar{E}(\bar{r}'_\perp) dx' dy' + \int_{S_W} \delta \tilde{K}(\bar{r}_\perp, \bar{r}'_\perp, k_0, \gamma, \tilde{\gamma}) \delta \varepsilon(\bar{r}'_\perp) [\bar{E}_0(\bar{r}'_\perp) + \Delta \bar{E}(\bar{r}'_\perp)] dx' dy'. \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь $\delta \tilde{K}(\bar{r}_\perp, \bar{r}'_\perp, k_0, \gamma, \tilde{\gamma}) = \tilde{K}(\bar{r}_\perp, \bar{r}'_\perp, k_0, \tilde{\gamma}) - \tilde{K}(\bar{r}_\perp, \bar{r}'_\perp, k_0, \gamma)$, индексы 0 и W у ядер в уравнении (22) означают, что в соответствующих суммах типа (21) учтены только источники, попадающие в области S_0 и S_W .

Итак, при условии, что k_0 , γ и \bar{E}_0 известны, ИУ (22) позволяет определить $\tilde{\gamma}$ и $\Delta \bar{E}$, например, путем поиска экстремума функционала типа (18), а также используя итерационный процесс для ИУ (22) и соответствующего ему функционала. Заметим, что из функционалов можно непосредственно вывести постоянную распространения в виде

$$\begin{aligned} \bar{E}(\bar{r}_\perp) &= \bar{E}_0(\bar{r}_\perp) + \Delta \bar{E}(\bar{r}_\perp) = \int_{S_D} \tilde{K}(\bar{r}_\perp, \bar{r}'_\perp, k_0, \tilde{\gamma}) \kappa_\varepsilon(\bar{r}'_\perp) \bar{E}(\bar{r}'_\perp) dx' dy' - \\ &- (\varepsilon^{-1} - 1) \int_{S_W} \tilde{K}_W(\bar{r}_\perp, \bar{r}'_\perp, k_0, \tilde{\gamma}) [\bar{E}_0(\bar{r}'_\perp) + \Delta \bar{E}(\bar{r}'_\perp)] dx' dy' \end{aligned}$$

и имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta \bar{E}(\bar{r}_\perp) &= \int_{S_D} \delta \tilde{K}(\bar{r}_\perp, \bar{r}'_\perp, k_0, \gamma, \tilde{\gamma}) \kappa_\varepsilon(\bar{r}'_\perp) [\bar{E}_0(\bar{r}'_\perp) + \Delta \bar{E}(\bar{r}'_\perp)] dx' dy' - \\ &- (\varepsilon^{-1} - 1) \int_{S_W} \tilde{K}_W(\bar{r}_\perp, \bar{r}'_\perp, k_0, \tilde{\gamma}) [\bar{E}_0(\bar{r}'_\perp) + \Delta \bar{E}(\bar{r}'_\perp)] dx' dy' + \int_{S_D} K(\bar{r}_\perp, \bar{r}'_\perp, k_0, \gamma) \kappa_\varepsilon(\bar{r}'_\perp) \Delta \bar{E}(\bar{r}'_\perp) dx' dy'. \end{aligned} \quad (23)$$

$\gamma = \Psi(k_0, \gamma)$, где в правую часть γ входит нелинейно. Если она вытекает, то $\gamma'' > 0$, и поле в радиальном направлении далеко от неоднородности возрастает по закону $\rho^{-1/2} \exp(-jk\rho)$, $k' > 0$, $k'' > 0$, если потеря в диэлектрике нет. Указанное свойство обусловлено свойством функций Ганкеля. Если есть потери, например, в основе, то поглощение может превысить возрастание от вытекания, и тогда вышеприведенные уравнения применимы.

Рассмотрим ФКВ типа полый канал в 2-D ФК без потерь. Очевидно, ИУ для $\Delta \bar{E}$ следует из соотношения



4. Интегральное уравнение ограниченного ФКВ

Ограниченность всегда означает нахождение структуры в вакууме, т.е. $\varepsilon = \mu = 1$. Ограниченность также означает конечное число ячеек у ФК, что соответствует ФГ свободного пространства с конечным числом членов в суммах [10]. Обычно ФКВ имеют оболочки, близкие к круглым. В качестве примера рассмотрим наиболее простой для анализа квадратный ФКВ типа полый квадратный канал в квадратной оболочке (рис. 1).

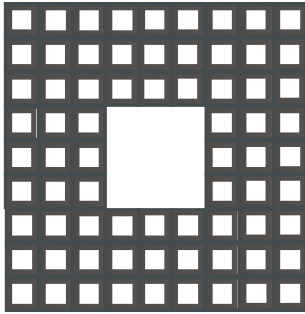


Рис. 1. Прямоугольный ФКВ типа «полый канал в оболочке»

Пусть ФК состоит из 81 ячейки размера $a_1 = a_2 = a$ с проницаемостью ε , а каждая ячейка имеет в центре полость размера $b \times b$, $b < a$. ФКВ получается из ограниченного ФК путем удаления девяти центральных ячеек. Таким образом, размер полого канала $3a \times 3a$, а оболочка имеет по три слоя в каж-

дом из поперечных направлений. В данном случае квазипериодическая ФГ представляет собой конечную сумму типа (7) по 72 ячейкам при $\vec{k}_\perp = 0$. Рассмотрим сначала бесконечный ФК и найдем его дисперсию $\gamma = \gamma(k_0)$ при $k_x = k_y = 0$. Выберем начало системы координат в центре полого прямоугольного канала. Удобно взять ФГ для диэлектрической среды. Тогда область поиска решения есть полый канал $-b/2 < x < b/2$, $-b/2 < y < b/2$. В этой области электрическое поле соленоидально, удовлетворяет волновому уравнению и имеет все три компоненты. С учетом этого и симметрии решение можно искать в виде

$$\begin{aligned} E_x &= j\gamma\alpha \sin(\alpha x)\sin(\beta y)\exp(-j\gamma z), \\ E_y &= -j\gamma\beta \cos(\alpha x)\cos(\beta y)\exp(-j\gamma z), \\ E_z &= (k_0^2 - \gamma^2)\cos(\alpha x)\sin(\beta y)\exp(-j\gamma z), \end{aligned} \quad (24)$$

где $\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = k_0^2$. Можно рассмотреть и другие типы симметрии (поляризации). Векторные функции \vec{F} удобно выбирать так, чтобы они обладали той же симметрией, что и искомое решение. Возьмем соленоидальную вектор-функцию \vec{F} такую, чтобы ее нормальная компонента равнялась нулю на контуре. Очевидно

$$\begin{aligned} F_x &= j\gamma(2\pi/b)\sin(2\pi x/b)\sin(\pi y/b)\exp(-j\gamma z), \\ F_y &= -j\gamma(\pi/b)\cos(2\pi x/b)\cos(\pi y/b)\exp(-j\gamma z), \\ F_z &= \left[(2\pi/b)^2 + (\pi/b)^2 \right] \cos(2\pi x/b)\sin(\pi y/b)\exp(-j\gamma z). \end{aligned} \quad (25)$$

Для высших мод можно рассматривать соотношения типа (25) с соответствующим числом вариаций по осям. Построим функцию-

налы на основе ИУ (9), умножая его скалярно на $\vec{F}_\perp(x, y)$ и на $\vec{z}_0 F_z$. Экспоненциальную зависимость от z будем опускать. Тогда

$$\begin{aligned} I_\perp &= \int_{S_D} \vec{F}_\perp^*(\vec{r}_\perp) \vec{E}_\perp(\vec{r}_\perp) dx dy - k_0^2(1 - \varepsilon) \int_{S_D} \int_{S_D} \ddot{G}_\varepsilon(\chi_\varepsilon |\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp|) \vec{F}_\perp^*(\vec{r}_\perp) \cdot \vec{E}_\perp(\vec{r}'_\perp) dx' dy' + \\ &+ (\varepsilon^{-1} - 1) \int_{S_D} \int_{S_D} \nabla_\perp \cdot \vec{F}_\perp^*(\vec{r}_\perp) \nabla_\perp \ddot{G}_\varepsilon(\chi_\varepsilon |\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp|) \cdot \vec{E}_\perp(\vec{r}'_\perp) dx' dy' + \\ &+ j\gamma(\varepsilon^{-1} - 1) \int_{S_D} \int_{S_D} \vec{F}_\perp^*(\vec{r}_\perp) \cdot \nabla_\perp \ddot{G}_\varepsilon(\chi_\varepsilon |\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp|) E_z(\vec{r}'_\perp) dx' dy', \end{aligned} \quad (26)$$



$$\begin{aligned}
 I_z = \int_{S_D} F_z^*(\vec{r}_\perp) E_z(\vec{r}_\perp) dx dy - [k_0^2 \varepsilon - \gamma^2] (\varepsilon^{-1} - 1) \int_{S_D S_D} F_z^*(\vec{r}_\perp) \ddot{G}_\varepsilon(\chi_\varepsilon |\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp|) E_z(\vec{r}'_\perp) dx' dy' dx dy - \\
 - j\gamma (\varepsilon^{-1} - 1) \int_{S_D S_D} F_z^*(\vec{r}_\perp) \nabla_\perp \ddot{G}_\varepsilon(\chi_\varepsilon |\vec{r}_\perp - \vec{r}'_\perp|) \cdot \vec{E}_\perp(\vec{r}'_\perp) dx' dy'.
 \end{aligned} \quad (27)$$

Интеграл (26) можно разбить на сумму $I_\perp = I_x + I_y$. Заметим, что для действительных $\gamma < k_0$ (т.е. для быстрых волн в отсутствие потерь) α и β должны быть действительными. Однако это возможно только в пределе $k_0 \rightarrow \infty$. В этом случае отражение от стенок полное, а α и β соответствуют волноводу с идеальными стенками. Поиск решения будем производить методом итераций. Пусть при большом k_0 заданы начальные значения α , β . Тем самым определено и начальное значение γ . Соответственно можно вычислить интегралы (26), (27). Из последнего определим скорректированное значение γ . С его использованием определяем из I_x новое значение k_0 и соответственно значение $\alpha = \sqrt{k_0^2 - \beta^2 - \gamma^2}$. Затем тем же путем из I_y определяем k_0 и $\beta = \sqrt{k_0^2 - \alpha^2 - \gamma^2}$. Наконец, из функционала $I = I_\perp + I_z$ находим новое значение k_0 . Процесс повторяем до сходимости результатов. Заметим, что в силу определения в (26) можно заменить $\nabla_\perp \cdot \vec{F}_\perp^*(\vec{r}_\perp)$ на $-j\gamma^* F_z^*(\vec{r}_\perp)$. При итерациях мы последовательно изменяем как собственные значения (волновое число k_0), так и собственную функцию (величины α, β, γ). Коль скоро собственная функция найдена внутри полости, она с помощью интегральных соотношений определена везде. Когда сходимость для данного k_0 достигнута, величина k_0 немного уменьшается, а итерации повторяются до следующей сходимости и т.д. Таким образом, вычисляется дисперсия моды, определяемой начальными значениями α , β при большом k_0 .

Для ФКВ с бесконечной оболочкой следует использовать ИУ (23), решение которого следует искать в области полого канала S_W (поскольку $S_D \in S_W$). Для этого также можно использовать представления решений (34) и пробные функции типа (25) с заменой γ на $\tilde{\gamma}$ и b на $3a$. В качестве исходного интегрального оператора в (23) можно взять ИУ (9) или другое, например, (16), а также любое ИДУ, нагруженное контурными интегралами. Использование представлений полей типа (24) приводит к экономным алгоритмам, поскольку неизвестными являются только три в общем случае комплексных параметра. Применение разложения полей по каким-либо базисам (например, по двумерным конечным элементам) приводит к алгоритмам достаточно большой размерности.

Для ФКВ (см. рис. 1) примем соотношение $b = a/3$ и будем использовать кусочно-постоянные базисные КЭ. Тогда каждая из 72 ячеек разбивается на 8 конечных элементов с тремя значениями компонент поля, а размерность задачи становится равной 1728. Однако в силу симметрии достаточно учесть лишь четверть области ФКВ, и реальная размерность равна 432. В случае использования ИУ (16) в качестве весовых функций можно также взять кусочно-постоянные КЭ. Тогда на основе метода Галеркина задача сводится к векторному уравнению $E = \hat{K}(k_0, \gamma)E$ в 432-мерном пространстве. Здесь E – вектор из 432 коэффициентов разложения, а \hat{K} – соответствующая квадратная матрица, зависящая от k_0 и γ . Интегралы в ее диагональных элементах сходятся. Величина k_0^2 стандартно выражается через отношение двух квадратичных форм:

$$k_0^2 = \frac{\langle E, P(k_0, \gamma)E \rangle}{\langle E, Q(k_0, \gamma)E \rangle}. \quad (28)$$



В них $P(k_0, \gamma)$ и $Q(k_0, \gamma)$ – определенные матрицы, в которые параметры k_0 и γ входят нелинейно. Находить комплексные корни определителя порядка 432 неэффективно. Более эффективно методом совместной итерации искать решения уравнения (28) и уравнения $E = \hat{K}(k_0, \gamma)E$. Использовать кусочно-постоянные весовые КЭ для ИУ (9) нельзя, поскольку они не дифференцируемые, а действие оператора $\nabla_{\perp} \otimes \nabla_{\perp}$ на логарифмически сингулярное ядро приводит к неинтегрируемой особенности. Использование ИДУ требует применения дифференцируемых КЭ и приводит к громоздким контурным интегралам и алгоритмам. Для получения численных результатов воспользуемся дифференцируемыми весовыми КЭ типа (25), например, взяв $F_{\text{ytn}}(x, y) = -j\tilde{\gamma}((2n-1)\pi/c) \times \cos(2(m-1)\pi x/c) \cos((2n-1)\pi y/c)$, $c = 9a$. Указанные функции заданы на всей области ФКВ. Использовать их в качестве пробных КЭ нельзя, так как их нормальные компоненты непрерывны на границе раздела диэлектрик – вакуум. Взяв $1 \leq m, n \leq 12$, получим 432 весовые функции. При интегрировании

по координатам точки наблюдения можно сначала вычислить интеграл по всему поперечному сечению ФКВ, а затем вычесть из него интегралы по светлым участкам (см. рис. 1). Итерационный подход с использованием квадратичных и билинейных форм типа (28) позволяет определить все волны ФКВ, включая и поверхностные. Для того чтобы метод сходился к требуемой моде, надо налагать соответствующие условия симметрии, нормировать решение на каждом шаге итерации и требовать ортогональности искомой моды к ранее найденным. В случае поиска вытекающих мод параметр γ комплексный, поэтому сходимости к собственным поверхностным модам быть не может.

Рассмотрим, наконец, интегрирование для логарифмической особенности с кусочно-постоянными КЭ для диагональных матричных элементов. Соответствующие подынтегральные выражения можно записать так: $[(\partial/\partial x)\ln(R)E_x(x'_i, y'_i) + (\partial/\partial y)\ln(R) \times E_y(x'_i, y'_i)] dx'dy'$. Рассмотрим интеграл для первого члена, обозначив значение x -компоненты $E_x(x'_i, y'_i)$ в центре КЭ с номером i как E_{xi} :

$$E_{xi} \int_{S_i} \frac{(x-x'_i) + (x'_i-x')}{R^2} dx'dy' = E_{xi} \int_{S_i} \frac{(x-x'_i)}{R^2} dx'dy' + E_{xi} \int_{S_i} \frac{\cos(\varphi')}{\rho'} dx'dy'. \quad (29)$$

При замене прямоугольного КЭ S_i кругом эквивалентной площади последний интеграл в уравнении (29) исчезает. Интегрирование первого интеграла по точке наблюдения с

бесконечно дифференцируемой функцией $f_i(x, y) = \nabla_{\perp} \cdot \vec{F}_i(x, y)$ по элементу S_i путем перехода к полярным координатам дает

$$\begin{aligned} E_{xi} \int_{S_i} \int_{S_i} \frac{f_i(x, y)(x-x'_i)}{R^2} dx'dy'dxdy &= E_{xi} \int_{S_i} \int_{S_i} f_i(x'_i + \rho \cos(\varphi), y'_i + \rho \sin(\varphi)) \cos(\varphi) d\rho d\varphi dx'dy' = \\ &= E_{xi} \int_{S_i} \int_{S_i} [f_i(x'_i, y'_i) + f'_{ix}(x'_i, y'_i)\rho \cos(\varphi) + f'_{iy}(x'_i, y'_i)\rho \sin(\varphi) + \dots] \cos(\varphi) d\rho d\varphi dx'dy'. \end{aligned}$$

Очевидно, если область S_i является кругом, интеграл от первых четырех членов в квадратных скобках равен нулю.

Для малой области рассмотренный интеграл мал, и им можно пренебречь.

5. Численные результаты

На рис. 1–6 приведены результаты ряда численных экспериментов, иллюстрирующие свойства ФКВ и волноводов типа ПКД.

На рис. 2 демонстрируется дисперсия бесконечного двумерно-периодического ФК при поперечном распространении волн вдоль одной из координат.

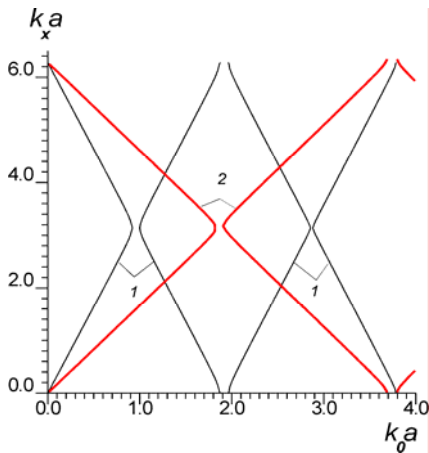


Рис. 2. Дисперсия $k_x(k_0)$ в 2-D ФК при $k_y = \gamma = 0$: $\varepsilon = 12.0$ (кривые 1) и $\varepsilon = 3.0$ (кривые 2)

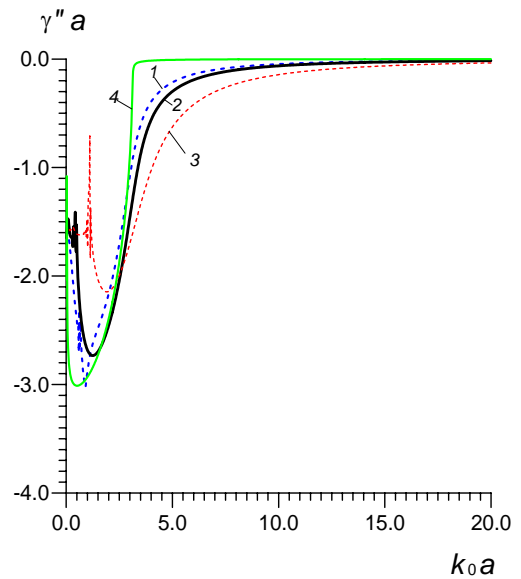


Рис. 4. Нормированные потери $\text{Re}(\gamma)a$ LM -моды. Обозначения кривых см. на рис. 3

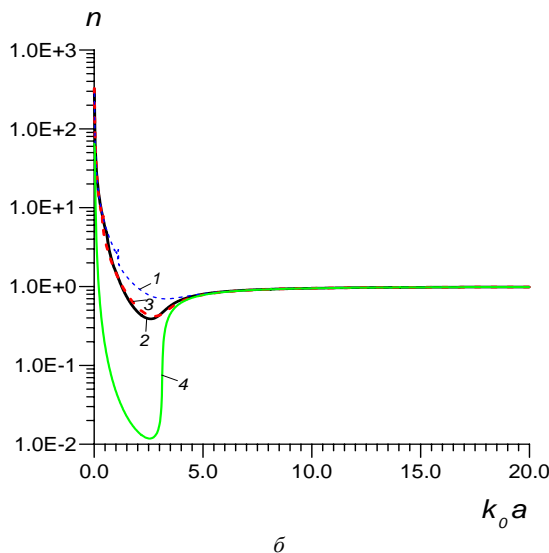
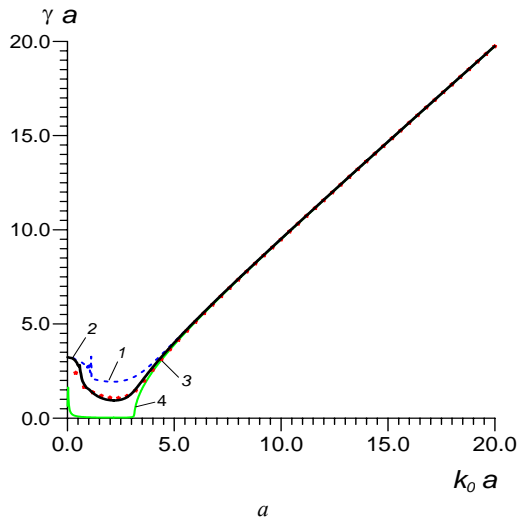


Рис. 3. Дисперсия для LM -моды (а) и замедление (б) в плоскопараллельном полом канале при следующих параметрах бесконечной оболочки: $\varepsilon = 3.0$ (кривая 1); $\varepsilon = 12.0$ (кривая 2); $\varepsilon = 3.0 - j12.0$ (кривая 3); $\varepsilon = 1.0 - j10^4$ (кривая 4)

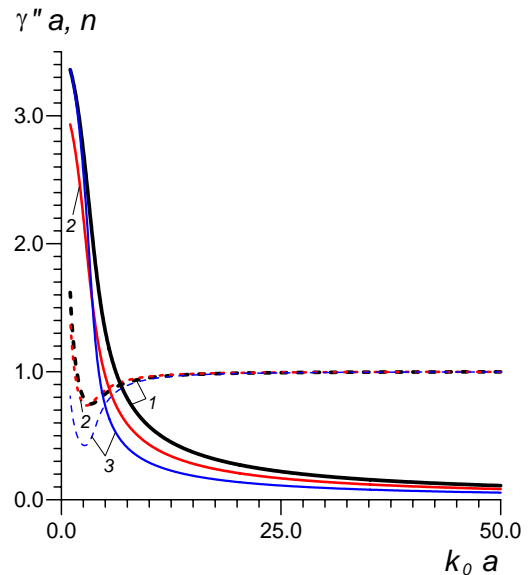


Рис. 5. Замедление $n = \text{Re}(\gamma)/k_0$ (штриховые кривые) и нормированные потери $-\text{Im}(\gamma)a$ (сплошные кривые) волны HE_{11} для волновода класса ПКД (см. рис. 1) без использования фотонно-кристаллической структуры (без полостей): $\varepsilon = 3.0$ (кривые 1); $\varepsilon = 3.0 - j3.0$ (кривые 2); $\varepsilon = 12.0 - j12.0$ (кривые 3)

Рис. 3 и 4 соответствуют результатам для волновода типа полой плоскопараллельный канал ширины a в магнитоэлектрике, ограниченный полубесконечными импедансными стенками. Стенки предполагаются выполненными из полубесконечного магнитоэлектрика, в результате чего на его границе раздела можно задать импеданс, а дисперсионные уравнения записываются явно ана-

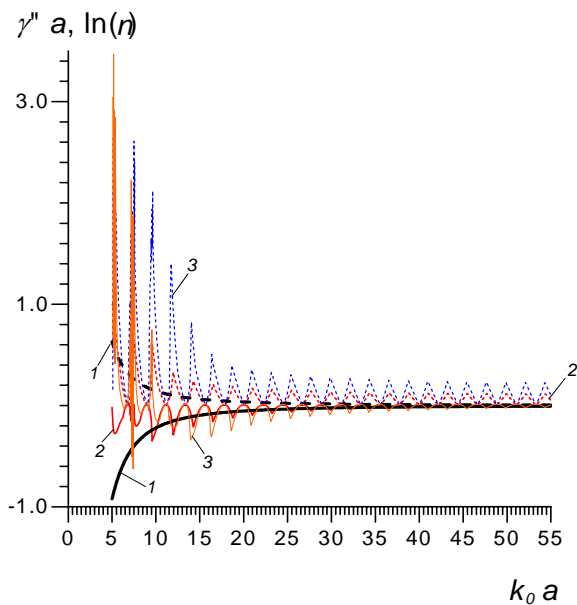


Рис. 6. Логарифм замедления (сплошные кривые) и нормированные потери (штриховые кривые) первой HE -моды полого канала размера $a \times a$ со сплошной бесконечной плоскопараллельной оболочкой (1), полого канала с плоскопараллельной оболочкой (2) и фотонно-кристаллического волновода (3). Во всех результатах $\varepsilon = 3.0 - 0.05j$, а характерные размеры каналов совпадают

литически [22], что важно для качественной оценки других подобных результатов. С практической точки зрения магнитоэлектрическую пластину можно считать полубесконечной, если все излучение из канала в оболочку затухает. Рассмотренный случай моделирует ряд задач. В частности, задавая плазменную диэлектрическую проницаемость, на низких частотах (существенно ниже плазменной частоты и частоты столкновений) получаем импеданс металла.

На рис. 5 приведены результаты для прямоугольного волновода типа ПКД, соответствующего ФКВ без полостей (см. рис. 1). В этом случае вместо двумерной суммы в ФГ взят один член с функцией Ганкеля. Заметим, что как для плоскопараллельного, так и для прямоугольного волновода типа ПКД имеет место переход быстрой вытекающей волны на высоких частотах в медленную вытекающую волну на очень низких частотах. Это связано с тем, что соответствующие строгие дисперсионные уравнения не содержат ветвей, исходящих из точки $k_0 = 0$, $\gamma = 0$. Для ФКВ (см. рис. 1) и соответствующего волно-

вода типа ПКД выше частоты отсечки, определяемой из условия $n = 1$, возможны и решения в виде медленных поверхностных мод. Однако на частотах ниже отсечки вытекающая волна сначала становится быстрой, а замедление n достигает минимума. Затем с уменьшением частоты замедление растет, становится больше 1 и продолжает рост (медленная вытекающая волна). Указанные моды следует искать в комплексной области, и в данной работе они не рассматривались.

На рис. 6 приведены результаты влияния квазипериодичности оболочки на замедление и потери для плоскопараллельного ФКВ с двумя одномерными квазипериодическими оболочками и ФКВ (см. рис. 1). Первый случай соответствует рис. 1, когда один из размеров полого канала бесконечный. Кроме этого жирными линиями (кривые 1) нанесены результаты для ДВ типа ПКД без полостей в оболочке. Видно, что имеется набор полос, в которых потери малы, а фазовая скорость близка к скорости света. Они разделены участками с более высокими потерями. Соответствующие полосы для ближайших высших мод обычно смещены, а затухание их выше, что при большой длине позволяет осуществить квазиодномодовый режим. Рассмотренный ФКВ имеет двукратное вырождение основной моды по поляризации.

Заключение

На основе метода ФГ периодических и квазипериодических источников сформулированы интегральные и интегродифференциальные уравнения для фотонно-кристаллических волноводов. Предложенные уравнения использованы для построения дисперсионных уравнений в виде билинейных и квадратичных функционалов. Также предложены итерационные процедуры решения полученных уравнений, позволяющие проводить решение в комплексной области и выделять требуемую моду из всего спектра мод. Приведены результаты численных исследований дисперсионных уравнений, включая случаи волноводов типа ПКД, для которых имеются строгие аналитические соотношения. Указанные решения качественно согласуются с



приведенными решениями для двумерных структур. Результаты показывают, что рассмотренная толщина оболочки ФКВ недостаточна для хорошей селекции мод. Уравнения для полубесконечной периодической оболочкой приведены в [23]. Для плоскостоего волновода типа ПКД их можно записать в явном аналитическом виде.

Список литературы

1. Briks T.A., Roberts P.J., Russell P.St.J., Atkin D.M., Shepherd T.J. Full 2-D photonic bandgap in silica/air structures // *Electron. Lett.* 1995. Vol.31, №22. P.1941–1943.
2. Cregan R.F., Mangan B.J., Knight J.C., Briks T.A., Russell P.St.J., Roberts P.J., Allan D.C. Single mode photonic bandgap guidance of light in air // *Science*. 1999. Vol.285, №5433. P.1537–1539.
3. Желтиков А.М. Дырчатые волноводы // *УФН*. 2000. Т.170, №11. С.1203.
4. Мелехин В.Н., Маненков А.Б. Диэлектрические трубы как волноводы с малыми потерями // *ЖТФ*. 1968. Т.38, №12. С.2113–2115.
5. Мелехин В.Н., Маненков А.Б. Диэлектрические трубы – открытые волноводы с малыми потерями и редким спектром // *Электроника больших мощностей*. М.: Наука, 1969. Вып.6. С.161–178.
6. Казанцев Ю.Н., Харлашкин О.А. Прямоугольные волноводы класса «полый канал в диэлектрике» // *РЭ*. 1978. Т.23, №10. С.2060–2068.
7. Chou R.C., Lee S.W. Modal attenuation in multilayered coated waveguides // *IEEE Trans.* 1988. Vol.MTT-36, №7. P.1167–1176.
8. Давидович М.В. Улучшение самофильтрации мод в полых волноводах с многослойной магнитодиэлектрической оболочкой // *РЭ*. 1994. Т.39, №1. С.53–61.
9. Голант Е.И., Голант К.М. Новый метод расчета спектра и радиационных потерь вытекающих мод многослойных оптических волноводов // *ЖТФ*. 2006. Т.76, вып.8. С.99–106.
10. Давидович М.В. Фотонные кристаллы: функции Грина, интегродифференциальные уравнения, результаты моделирования // *Изв. вузов. Радиофизика*. 2006. Т.49, №2. С.150–163.
11. Benisty H. Modal analysis of optical guides with two-dimensional photonic band-gap boundaries // *J. Appl. Phys.* 1996. Vol.79. P.7483–7492.
12. Kohn W., Rostoker N. // *Phys. Rev.* 1954. Vol.94. P.1111.
13. Цидильковский И.М. Электроны и дырки в полупроводниках. М.: Наука, 1972. 640 с.
14. Иваненко Д.Л., Соколов А.А. Классическая теория поля. М.: Гостехиздат, 1951. 480 с.
15. Singh S., Richards W.F., Zinecker J.R., Wilton D.R. Accelerating the convergence of series representing the free space periodic Green's function // *IEEE Trans.* 1990. Vol.AP-38, №12. P.1958–1962.
16. Yasumoto K., Yoshitomi K. Efficient calculation of lattice sums for free-space periodic Green's function // *IEEE Trans Antennas and Propagat.* 1999. Vol.AP-47, №6. P.1050–1055.
17. Марков Г.Т., Чаплин А.Ф. Возбуждение электромагнитных волн. М.: Радио и связь, 1983. 296 с.
18. Ordal M.A., Long L.L., Bell R.J., Bell S.E., Bell R.R., Alexander P.W., Word C.A. Optical properties of the metals Al, Co, Cu, Au, Fe, Pb, Ni, Pd, Pt, Ag, Ti, and W in the infrared and far infrared // *Appl. Optics*. 1983. Vol.22, №7. P.1099–1120.
19. Du F., Lu Y., Wu S. Electrically tunable liquid-crystal photonic crystal fiber // *Appl. Phys. Lett.* 2004. Vol.85, №12. P.2181–2183.
20. Давидович М.В. Численный метод для задач дифракции на полубесконечных структурах // *Изв. вузов. Радиофизика*. 2006. Т.49, №3. С.235–245.
21. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1977. 736 с.
22. Вайнштейн Л.А. Открытые резонаторы и открытые волноводы. М.: Сов. радио, 1966. 476 с.
23. Davidovich M.V. Integral and integrodifferential equations for unbounded pseudoperiodic structures // *Mathematical Methods in Electromagnetic Theory: Proc. of 12th Intern. Conf. (MMET'2008)*. Odesa, Ukraine. 2008. P.346–348.

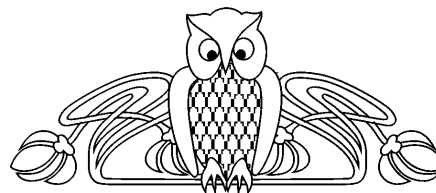
УДК 537.611.46:538.975

РЕЗОНАНСНЫЙ МЕХАНИЗМ ВОЗБУЖДЕНИЯ ОБМЕННЫХ СПИНОВЫХ ВОЛН В СЛОИСТЫХ МОНОЛИТНЫХ ФЕРРИТ-ФЕРРИТОВЫХ СТРУКТУРАХ

В.В. Тихонов

Саратовский государственный университет
E-mail: tvlad4@rambler.ru

Обнаружена высокая (до 80% и более) эффективность импульсного преобразования обменных спиновых волн (ОСВ) и звука в имплантированных пленках ЖИГ. Импульсы ОСВ распространялись в глубь пленки ЖИГ и отражались от ее противоположной поверхности. Исследованы резонансные эффекты коллинеарно-



го и неколлинеарного преобразования ОСВ. Показано, что эффекты преобразования имеют длительный характер. Это позволяет достигать высокой эффективности преобразования энергии быстрых и медленных типов волн даже при слабой интенсивности излучения ОСВ.



Ключевые слова: спиновые волны, магнитоэластические волны, упругие волны, обменное взаимодействие, дипольное взаимодействие, дипольно-обменное взаимодействие, магнитоупругое взаимодействие, феррит, железиттриевый гранат, пленки ЖИГ, ионная имплантация.

THE RESONANT MECHANISM OF EXCITATION EXCHANGE SPIN WAVES IN LAYERED MONOLITHIC FERRITE-FERRITE STRUCTURES

V.V. Tikhonov

It is found out high (up to 80% and more) efficiency of pulse transformation of exchange spin waves (ESW) and a sound in implanted YIG films. Impulses ESW extended deep into YIG film and were reflected from its opposite surface. Resonant effects colinear and noncolinear transformations ESW are investigated. It is shown, that these effects have long character that allows to reach high efficiency of transformation of energy of fast and slow types of waves even at weak intensity of radiation ESW.

Key words: spin waves, magnetostatic waves, elastic waves, exchange interaction, dipole-exchange interaction, magnetoelastic interaction, ferrite, yttrium iron garnet, YIG films, ionic implantation.

Введение

Перенос энергии в монокристаллах ферритов может осуществляться посредством спиновых волн (СВ). Известны два типа спиновых волн – обменные СВ, распространяющиеся за счет короткодействующего обменного взаимодействия нескомпенсированных спинов, и дипольные СВ, распространяющиеся за счет дальнедействующего диполь-дипольного взаимодействия. Существование обменных спиновых волн (ОСВ) было предсказано в знаменитой работе Блоха еще в 1930 году [1]. Эти волны характеризуются исключительно малыми длинами $\lambda \sim 0.01 \dots 1$ мкм – порядка радиуса обменного взаимодействия. Типичные скорости ОСВ $v \sim (10^3 - 10^5)$ см/с, что порядка скорости звука и менее. Однако уникальные свойства ОСВ оказались серьезным препятствием для их использования. Для возбуждения обменных спиновых волн (ОСВ) необходимо было создавать локальные неоднородности СВЧ поля с недостижимо малыми размерами $\delta \leq \lambda/4 \sim 0.01$ мкм. В этом смысле более доступными оказались относительно длинноволновые $\lambda \sim (0.1 - 1)$ мм дипольные спиновые волны, в литературе их чаще называют магнитоэластическими волнами (МСВ) [2]. МСВ эффективно возбуждались в пленках железиттриевого граната (ЖИГ) при помо-

щи закороченных отрезков микрополосковых линий (МПЛ). Применение той же технологии для возбуждения ОСВ было практически невозможно, поскольку требуемая ширина полоска $w \sim 1 \dots 10$ нм становилась недостижимо малой. Кроме того, возможность длительного распространения ОСВ была под вопросом. Существовала реальная угроза фатального рассеяния ОСВ на структурных дефектах и тепловых колебаниях кристаллической решетки.

Впервые обменные спиновые волны были обнаружены косвенным путем в виде продуктов нелинейного распада (параметрическое возбуждение) [3]. Позднее были обнаружены резонансы ОСВ, которые наблюдались в тонких пермалоевых пленках [4]. Это явление получило название спин-волнового резонанса (СВР). Важно, что для возбуждения СВР не требовалась высокая локализация магнитных полей, они могли возбуждаться даже в однородном СВЧ поле. Позднее резонансы ОСВ наблюдались в пленках ЖИГ [5–7], причем наиболее интенсивные резонансы наблюдались в спектре возбуждения МСВ в виде гибридных дипольно-обменных волн [7]. В пленках ЖИГ удавалось возбуждать дипольно-обменные резонансы достаточно высокого порядка $m = 10 \dots 100$. По оценкам ширин резонансных линий Δf , добротность обменных резонансов была достаточно велика: $Q = f / \Delta f \geq 10^2$. Из этого следовало, что затухание обменных волн не могло быть очень большим. Последнее обстоятельство наталкивало на мысль о возможности возбуждения ОСВ, бегущих в поперечном направлении пленки. Но существенным осложнением было то, что резонансы ОСВ возбуждались не во всех пленках ЖИГ, а только в тех, которые имели так называемые «закрепленные» спины на поверхности. Состояние «закрепления» возникало достаточно редко и случайным образом, причина его возникновения оставалась не выясненной.

Само понятие поверхностного «закрепления» спинов было введено Киттелем еще в 1958 году [8]. Оно понадобилось для теоретического описания обнаруженного эффекта СВР. В макроскопической теории состояние



«закрепления» выразилось в виде граничного условия

$$\vec{m}|_s = 0, \quad (1)$$

где \vec{m} – переменная составляющая спонтанной намагниченности. Но было получено и другое граничное условие [9]

$$\frac{\partial \vec{m}}{\partial n}|_s = 0, \quad (2)$$

где \vec{n} – нормаль к поверхности пленки, которая характеризовала «свободное» состояние поверхностных спинов. Согласно теории Киттеля, резонансы ОСВ могли возбуждаться только при полном (1) или частичном «закреплении» спинов. В случае «свободных» спинов возбуждение СВР оказывалось невозможным. Но и в случае полного «закрепления», согласно расчетам [10], эффективность возбуждения обменных волн была очень мала – порядка 0.3%. Этого могло быть достаточно для возбуждения высокочастотных резонансов, но для возбуждения и приема распространяющихся ОСВ было явно мало. Тем не менее эффекты возбуждения обменных волн были обнаружены.

Впервые возбуждение и прием бегущих ОСВ наблюдались в имплантированных пленках ЖИГ [11, 12]. При этом была обнаружена исключительно высокая эффективность преобразования, которая достигала 80% и более [12]. Позднее те же результаты были получены в пленках ЖИГ с плавно меняющейся намагниченностью по толщине пленки [13, 14]. В обоих случаях результаты эксперимента находились в явном противоречии с теоретическими прогнозами [10] и требовали своего объяснения.

В данной работе обсуждаются механизмы преобразования бегущих ОСВ, возникающие в тонком легированном слое феррита. Исследуются процессы излучения/поглощения ОСВ за счет резонансного взаимодействия электромагнитных и обменных спиновых волн (коллинеарное возбуждение) и за счет гибридизации магнитостатических волн с волноводными модами ОСВ (неколлинеарное возбуждение). Показано, что неколлинеарное излучение ОСВ имеет длительный характер. Это позволяет достигать высокой

эффективности преобразования энергии гибридных дипольно-обменных волн даже при слабой интенсивности излучения ОСВ.

1. Коллинеарное возбуждение ОСВ. Теория

Исходя из здравого смысла, можно было предположить, что поверхностное «закрепление» спинов как-то связано с магнитной неоднородностью, локализованной в тонком поверхностном слое феррита. Согласно (1), толщина этого слоя должна была быть много меньше длин возбуждаемых ОСВ. Однако реально это условие никогда не выполнялось, поскольку требуемая толщина слоя должна была быть порядка 1...10 нм, что сравнимо с толщиной молекулярного слоя кристалла. Но, однако, в этом случае уже перестает работать макроскопическая теория, и понятие усредненной намагниченности теряет смысл. Оставалось предположить, что в экспериментах [11, 12] имплантированный слой имел толщину, по крайней мере, сравнимую с длиной ОСВ, но тогда он мог обладать и собственными резонансными свойствами. Если предположить, что резонансы имплантированного слоя действительно имели место, то картина процессов возбуждения ОСВ существенно менялась. В этом случае имплантированный слой мог выполнять функции согласующего четвертьволнового резонатора. При этом эффективность преобразования должна возрасти пропорционально добротности имплантированного слоя. Впоследствии эта гипотеза нашла теоретическое подтверждение [15].

Процессы возбуждения ОСВ рассматривались на упрощенной модели имплантированной пленки, состоящей из полубезграничного феррита, содержащего на поверхности тонкий легированный слой, отличающийся только намагниченностью насыщения $4\pi M_0$. Для простоты был рассмотрен случай нормального падения электромагнитной волны (ЭМВ) на поверхность нормально намагниченного феррита. Диссипативные потери не учитывались.

Решалась краевая задача с учетом неоднородного обменного взаимодействия. Геометрия задачи представлена на рис. 1. Направления волновых векторов \vec{k}_v , где $v = 0$,

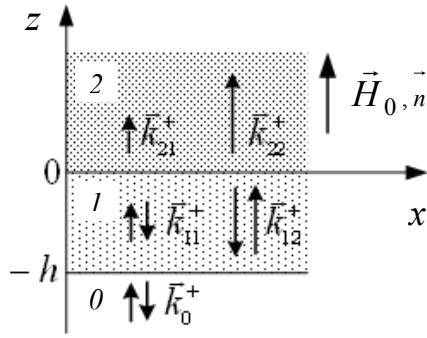


Рис. 1. Геометрия задачи: 0 – вакуум, 1 – легированный слой, 2 – чистый феррит

1, 2 – номер области, и вектор намагничивающего поля \vec{H}_0 совпадали с нормалью к поверхности $\vec{n} \parallel \vec{z}$.

Динамика векторов электрических $\vec{E}_v = \vec{e}_v \exp(i\omega t - \vec{k}_v \cdot \vec{z})$ и магнитных полей $\vec{H}_v = \vec{H}_{0v} + \vec{h}_v \exp(i\omega t - \vec{k}_v \cdot \vec{z})$, где $\omega = 2\pi f$ – круговая частота, $\vec{H}_{0v} = \vec{H}_0 - 4\pi\vec{M}_{0v}$ – внутреннее поле феррита ($H_{0v} \gg h_v$), описывалась системой уравнений Максвелла [16]

$$\begin{aligned} \text{rot } \vec{e}_v &= \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\vec{h}_v + 4\pi\vec{m}_v), \quad \text{div}(\varepsilon_v \vec{e}_v) = 0, \\ \text{rot } \vec{h}_v &= \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_v \vec{e}_v), \quad \text{div}(\vec{h}_v + 4\pi\vec{m}_v) = 0, \end{aligned} \quad (3)$$

где ε_v – диэлектрическая проницаемость, $\varepsilon_0 = 1, \varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon$, прецессия векторов намагниченности $\vec{M}_v = \vec{M}_{0v} + \vec{m}_v \exp(i\omega t - \vec{k}_v \cdot \vec{z})$, где $\vec{M}_{0v} = (0, 0, M_{0v})$ – намагниченность насыщения феррита ($M_{0v} \gg m_v, M_{00} = 0, m_0 = 0$), в феррите описывалась линеаризованным уравнением Ландау–Лифшица [2, 17]:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\gamma} \frac{\partial \vec{m}_v}{\partial t} + (\vec{m}_v \times \vec{H}_{0v}) + (\vec{M}_{0v} \times \vec{h}_v) + \\ + \alpha_v (\vec{M}_{0v} \times \nabla^2 \vec{m}_v) = 0, \end{aligned} \quad (4)$$

где $\gamma = 2.8$ МГц/Э – гиромагнитное отношение, $\alpha = 2A_v/M_{0v}^2$ – постоянная неоднородного обмена (для чистого ЖИГ $\alpha = 3,3 \times 10^{-11}$ см²), A_v – обменная жесткость феррита.

В координатной форме уравнения (3), (4) сводились к системе восьми обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, которая при заданном условии $\vec{k}_v \parallel \vec{H}_0 \parallel \vec{M}_{0v}$ разделялась на две независимые системы 4-го порядка для волн с правой $a^+ = a_x + ia_y$ и левой $a^- = a_x - ia_y$ круговой поляризации:

$$\begin{aligned} \frac{\partial e_v^\pm}{\partial z} &= -\delta^\pm k_0 (h_v^\pm + 4\pi m_v^\pm), \\ \frac{\partial h_v^\pm}{\partial z} &= -\delta^\pm k_0 \varepsilon e_v^\pm, \quad \frac{\partial m_v^\pm}{\partial z} = p_v^\pm, \\ \frac{\partial p_v^\pm}{\partial z} &= -\frac{1}{\alpha_v} h_v^\pm + \frac{\Omega_v^\pm}{\eta_v} m_v^\pm, \end{aligned} \quad (5)$$

где $\delta^\pm = \pm 1, k_0 = \omega/c, \Omega_v^\pm = \omega_{Hv} - \delta^\pm \omega, \omega_{Hv} = \gamma H_{0v}, \eta_v = \gamma \alpha_v M_{0v}$.

Подстановка в систему уравнений (5) решений в виде $a^\pm \exp(k_v^\pm z)$ сводила задачу к системе однородных алгебраических уравнений 4-го порядка

$$([A^\pm] - k_v^\pm [I]) \vec{X}_v^\pm = 0, \quad (6)$$

где $[A^\pm]$ – квадратная матрица системы (5), $[I]$ – единичная матрица, $\vec{X}_v^\pm = (e_v^\pm, h_v^\pm, m_v^\pm, p_v^\pm)$, и отысканию собственных значений k_v^\pm и собственных векторов \vec{X}_v^\pm . Значения k_v^\pm определялись из условия нетривиальности решения системы

$$\det ([A_v^\pm] - k_v^\pm [I]) = 0, \quad (7)$$

которое при раскрытии определителя сводилось к биквадратному уравнению:

$$\begin{aligned} \eta_v (k_v^\pm)^4 - (\Omega_v^\pm - \eta_v \varepsilon k_0^2) (k_v^\pm)^2 - \\ - \varepsilon k_0^2 (\Omega_v^\pm + \omega_{Mv}) = 0 \end{aligned} \quad (8)$$

и имело простое аналитическое решение:



$$k_{vj}^{\pm} = \pm \sqrt{\frac{\Omega_v^{\pm} - \eta_v \varepsilon k_0^2 \pm \sqrt{(\Omega_v^{\pm} + \eta_v \varepsilon k_0^2)^2 + 4\eta_v \varepsilon k_0^2 \omega_{Mv}}}{2\eta_v}}, \quad (9)$$

где индексом $j = 1, 2$ обозначены два типа волн в феррите («быстрые» и «медленные» волны), которые соответствовали знакам (-) и (+) перед радикалом под знаком квадратного корня. С учетом этого общие решения для полей в феррите записывались в виде

$$\begin{aligned} e_v^{\pm} &= \sum_{j=1}^2 \delta^{\pm} k_{vj}^{\pm} S_{vj}^{\pm} m_v^{\pm}, \\ h_v^{\pm} &= \sum_{j=1}^2 S_{vj}^{\pm} m_{vj}^{\pm}, \\ m_v^{\pm} &= \sum_{j=1}^2 m_{vj}^{\pm}, \end{aligned} \quad (10)$$

где $m_{vj}^{\pm} = C_{vj}^{\pm} \exp(k_{vj}^{\pm} z) + D_{vj}^{\pm} \exp(-k_{vj}^{\pm} z)$, $C_{vj}^{\pm}, D_{vj}^{\pm}$ – амплитуды волн намагниченности, $S_{vj}^{\pm} = 4\pi \varepsilon k_0^2 / [(k_{vj}^{\pm})^2 + \varepsilon k_0^2]$ – безразмерная величина.

Вне феррита электромагнитные поля имели вид

$$\begin{aligned} e_0^{\pm} &= i [\exp(ik_0 z) - R_0^{\pm} \exp(-ik_0 z)], \\ h_0^{\pm} &= \exp(ik_0 z) + R_0^{\pm} \exp(-ik_0 z), \end{aligned} \quad (11)$$

где R_0^{\pm} – коэффициент отражения электромагнитной волны на границе феррит–вакуум.

Подстановка общих решений (10) и (11) в граничные условия сводила задачу к системе алгебраических уравнений, которая решалась численными методами. При расчетах функциональная зависимость $\alpha_v(M_{0v}) = 2A_v(M_{0v})/M_{0v}^2$ задавалась как дополнительный параметр. В общем случае, как было показано в работе [18], зависимость $A_v(M_{0v})$ могла иметь немонотонный характер. С учетом этого следовало бы записать $A_v(M_{0v}) = \sum \sigma_k M_{0v}^k$, но определение коэффициентов σ_k не входило в задачу данной работы. Для примера были рассмотрены два варианта расчетов: при $\alpha_1 = \alpha_2 = \text{const}$ и при $A_1 = A_2 = \text{const}$.

Для определения девяти неизвестных коэффициентов $C_{vj}^{\pm}, D_{vj}^{\pm}, R_0^{\pm}$ использовались шесть электродинамических граничных условий:

$$\begin{aligned} e_0^{\pm} - e_1^{\pm} \Big|_{z=-h} &= 0, & e_1^{\pm} - e_2^{\pm} \Big|_{z=0} &= 0, \\ e_2^{\pm} \Big|_{z=\infty} &= 0, & h_0^{\pm} - h_1^{\pm} \Big|_{z=-h} &= 0, \\ h_1^{\pm} - h_2^{\pm} \Big|_{z=0} &= 0, & h_2^{\pm} \Big|_{z=\infty} &= 0 \end{aligned} \quad (12)$$

и три дополнительных граничных условия. Дополнительные граничные условия были получены из уравнения Ландау–Лифшица (4). При этом не делалось никаких предположений о наличии поверхностного «закрепления» спинов [8] или о наличии «обменной связи» [19, 20] на границе ферритовых слоев. Использовалась стандартная процедура получения граничных условий из уравнения баланса [16].

Уравнение Ландау–Лифшица переписывали в виде уравнения баланса вектора прецессии намагниченности

$$\begin{aligned} \frac{\partial \vec{m}_v}{\partial t} - \text{div}(\gamma \alpha_v \nabla \vec{m}_v \times \vec{M}_{0v}) &= \\ = -\gamma (\vec{m}_v \times \vec{H}_{0v}) - \gamma (\vec{M}_{0v} \times \vec{h}_v), \end{aligned} \quad (13)$$

где $(\nabla \vec{m}_v)_{ij} = \partial (\vec{m}_v)_i / \partial x_j$ – тензор 2-го ранга. После интегрирования уравнения (13) и применения теоремы Остроградского–Гаусса на границе ферритовых слоев было получено условие

$$\alpha_1 \frac{\partial \vec{m}_1}{\partial n} \cdot \vec{M}_{01} - \alpha_2 \frac{\partial \vec{m}_2}{\partial n} \cdot \vec{M}_{02} \Big|_s = 0, \quad (14)$$

где $\partial \vec{m}_v / \partial n = (\vec{n} \cdot \nabla \vec{m})$. Данное условие можно было записать на границе феррит–вакуум, положив $\vec{M}_{01} = 0$. При этом оно совпадало с известным условием «свободных» поверхностных спинов [9]

$$\frac{\partial \vec{m}_2}{\partial n} \Big|_s = 0. \quad (15)$$



В координатной форме для право- и левополяризованных волн условия (14) и (15) записывались в виде двух дополнительных условий:

$$\alpha_1 \frac{\partial m_1^\pm}{\partial n} \cdot M_{01} - \alpha_2 \frac{\partial m_2^\pm}{\partial n} \cdot M_{02} \Big|_{z=0} = 0, \quad (16)$$

$$\frac{\partial m_2^\pm}{\partial n} \Big|_{z=-h} = 0.$$

Но, однако, для решения краевой задачи этого было не достаточно.

Поскольку резервы получения линейных граничных условий были исчерпаны, оставалось использовать квадратичное условие. Уравнение (13) скалярно умножалось на вектор \vec{m}_v . При этом уравнение баланса получалось в виде

$$\frac{\partial \vec{m}_v^2}{\partial t} + \text{div} [2\gamma\alpha_v \nabla \vec{m}_v \cdot (\vec{M}_{0v} \times \vec{m}_v)] = 2\gamma\vec{M}_{0v} \cdot (\vec{h}_v \times \vec{m}_v). \quad (17)$$

Аналогично предыдущему из уравнения (17) было получено квадратичное граничное условие:

$$\vec{m}_1 \cdot \left(\alpha_1 \frac{\partial \vec{m}_1}{\partial n} \cdot \vec{M}_{01} \right) - \vec{m}_2 \cdot \left(\alpha_2 \frac{\partial \vec{m}_2}{\partial n} \cdot \vec{M}_{02} \right) \Big|_S = 0, \quad (18)$$

из которого, используя (14), нетрудно было выделить линейное условие:

$$\vec{m}_1 - \vec{m}_2 \Big|_S = 0. \quad (19)$$

Особенность условия (19) состояла в том, что его можно было записать только на границе феррит-феррит, где $|\vec{M}_{01}|$ и $|\vec{M}_{02}|$ строго больше нуля. На границе феррит-вакуум квадратичное условие (18) не накладывало на вектор \vec{m}_v никаких ограничений, поскольку, согласно (14), при $\vec{M}_{0v} = 0$ в уравнении (18) скалярные множители в скобках обращались в ноль. При этом вектор \vec{m}_v мог принимать любые значения. Тем не менее на границе феррит-феррит условие (19) давало последнее недостающее условие

$$m_1^\pm - m_2^\pm \Big|_{z=0} = 0, \quad (20)$$

необходимое для решения краевой задачи.

Для анализа эффектов возбуждения обменных волн представляли интерес расчеты только правополяризованных волн, совпадающих по типу поляризации с ОСВ [2, 17]. Левополяризованные волны в дальнейшем не рассматривались. На рис. 2 представлены дисперсионные характеристики $\omega(k_{vj}^+)$ волн в безграничном феррите, рассчитанные по формуле (9). Расчеты проводились при намагниченностях, равных намагниченности в поверхностном легированном слое и в полупространстве чистого ЖИГ. Мнимые значения волновых чисел соответствовали распространяющимся волнам, действительные – затухающим волнам.

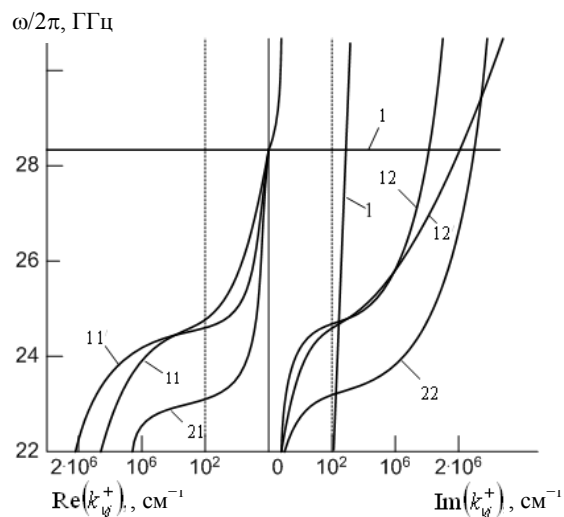


Рис. 2. Дисперсионные зависимости: 11, 12 – $\omega(k_{11}^+)$, $\omega(k_{12}^+)$ ($4\pi M_0 = 1.2$ КГц, $\alpha_1 = \alpha_2$); 11', 12' – $\omega(k_{11}^+)$, $\omega(k_{12}^+)$ ($4\pi M_0 = 1.2$ КГц, $A_1 = A_2$); 21, 22 – $\omega(k_{21}^+)$, $\omega(k_{22}^+)$ ($4\pi M_0 = 1.75$ КГц); 1 – $k_{vj}^+(\omega) = i\epsilon k_0^+$; 1' – $\omega = \gamma H_0$ ($M_{01} \rightarrow 0$); $H_0 = 10$ кЭ

На рис. 3, 4 представлены наиболее характерные АЧХ волн намагниченности $m_{20}^+(\omega)$, излучаемые в полупространство чистого ЖИГ. Расчеты проводились при различных параметрах легированного слоя. На рис. 3 кривые отличались толщиной слоя h , намагниченность слоя $4\pi M_{01} = 1200$ Гс фиксировалась. На рис. 4 варьировалась намагниченность слоя $4\pi M_{01}$, толщина слоя $h = 0.5$ мкм фиксировалась.

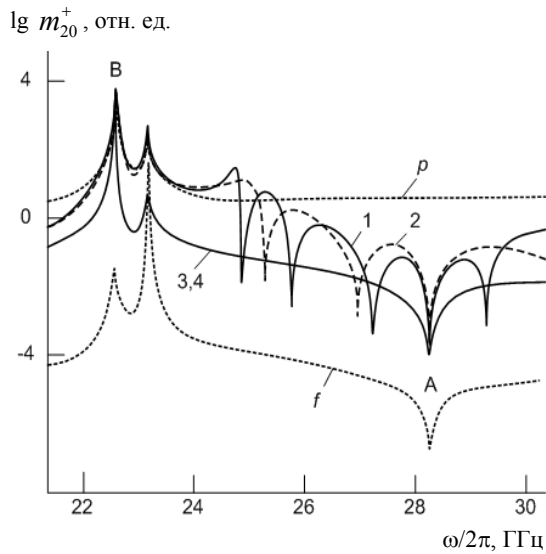


Рис. 3. Зависимости АЧХ от толщины ИС:
 1 - $h = 0.5$ мкм, $\alpha_1 = \alpha_2$; 2 - $h = 0.5$ мкм, $A_1 = A_2$;
 3 - $h = 0.005$ мкм, $\alpha_1 = \alpha_2$; 4 - $h = 0.005$ мкм, $A_1 = A_2$;
 f - «свободные» спины; p - «закрепленные» спины;
 $H_0 = 10$ кЭ, $4\pi M_0 = 1.2$ КГц

Для сравнения на рис. 3 и 4 представлены АЧ, отн. ед. итанные при отсутствии поверхностного слоя, но с учетом полного закрепления поверхностных спинов. На рис. 3 дополнительно представлена АЧХ, рассчитанная при отсутствии закрепления (кривая p) на поверхности чистого ЖИГ. Минимумы на АЧХ соответствовали нулевым значениям функции $m_{20}^+(\omega)$. Кривые АЧХ на рис. 3 и 4 имели общие особенности, не зависящие от параметров имплантированного слоя. Совпадающие минимумы на АЧХ с литерой А точно соответствовали частоте однородных электромагнитных колебаний в феррите $\omega_0 = \gamma H_0$. На этой частоте дисперсионные кривые ЭМВ на рис. 2 переходили из области затухающих в область распространяющихся волн. При этом их волновые числа обращались в ноль $k_{11}^+(\omega) = k_{21}^+(\omega) = 0$.

Совпадающие максимумы с литерой В соответствовали частоте наилучшего согласования. Здесь импедансы падающей ЭМВ в вакууме $Z_0 = e_0^+/h_0^+ = i$ и возбуждаемой ОСВ в феррите $Z_2 = e_2^+/h_2^+ = k_{22}^+/\epsilon k_0 = i$ были равны. Остальные максимумы были вызваны резонансами ОСВ в имплантированном слое. Это подтверждалось совпадением их частот с резонансными частотами слоя ω_l , где $l = 1,$

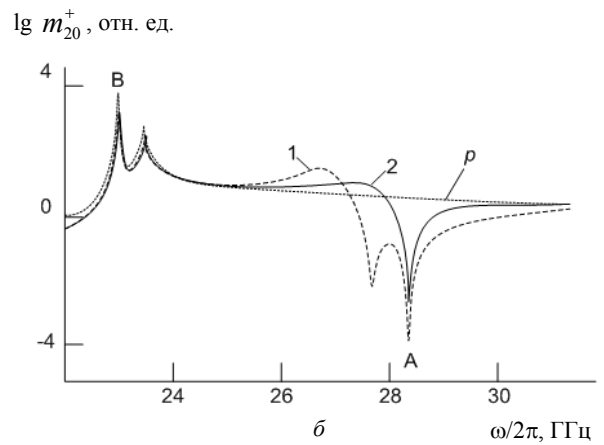
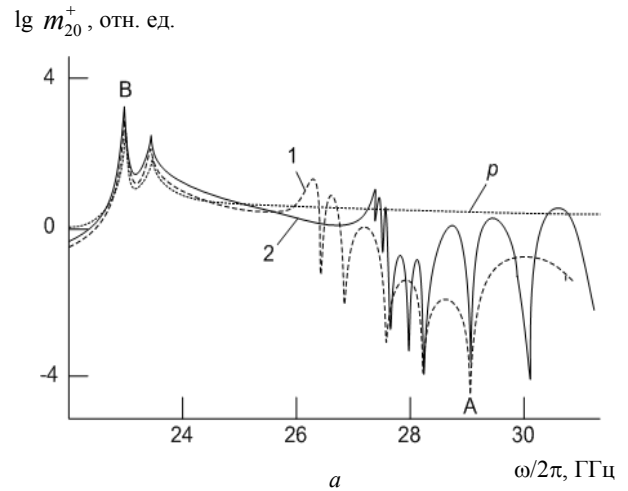


Рис. 4. Зависимости АЧХ от намагниченности имплантированного слоя: a - при $\alpha_1 = \alpha_2$: 1 - $4\pi M_0 = 600$ Гс, 2 - $4\pi M_0 = 600$ Гс; b - при $A_1 = A_2$: 1 - $4\pi M_0 = 600$ Гс, 2 - $4\pi M_0 = 600$ Гс; $H_0 = 10$ кЭ, $h = 0.5$ мкм

2, 3 - номера резонансов, которые определялись из дисперсионных кривых рис. 2 при подстановке $k_{12}^+(\omega_l) = l\pi/h$.

Варьирование параметрами легированного слоя деформировало кривые АЧХ. При уменьшении толщины слоя h резонансные минимумы разреживались и смещались в сторону более высоких частот (ср. кривые 1 и 2 на рис. 3). При этом интенсивность возбуждения ОСВ спадала, а влияние зависимости $\alpha_1(M_{01})$ уменьшалось. Так, уже при толщине слоя $h = 5$ нм кривые АЧХ, рассчитанные при $\alpha_1 = \alpha_2$ и при $A_1 = A_2$, практически полностью сливались (ср. кривые 3 и 4 на рис. 3). В пределе $h \rightarrow 0$ реализовался случай «свободных» поверхностных спинов (кривая f на рис. 3). Напротив, при уменьшении намагниченности легированного слоя M_{01} вли-



яние зависимости $\alpha_1(M_{01})$ на АЧХ заметно усиливалось (см. рис. 4). Это также проявлялось в изменении характера дисперсии (см. рис. 2). В пределе $M_{01} \rightarrow 0$: при $\alpha_1 = \alpha_2$ дисперсионная зависимость трансформировалась в прямые $\omega = \gamma H_0$ и $k_{vj}^+ = i\epsilon k_0$ (кривые I и I' на рис. 2), а АЧХ приближалась к случаю «свободных» поверхностных спинов (см. рис. 4, а); при $A_1 = A_2$ дисперсия приближалась к случаю однородных спиновых колебаний $k_{v2}^+(\omega) = 0$ и $k_{v2}^-(\omega) = i\epsilon k_0$, а АЧХ стремилась к случаю «закрепленных» спинов всюду, кроме частоты ω_0 (см. рис. 4, б).

Объяснение обнаруженных эффектов во многом следовало из самой постановки задачи. Условия сшивания полей обуславливали взаимодействие на границах слоя длинноволновых (электромагнитных) и коротковолновых (спиновых) возбуждений, которые в безграничном феррите могли существовать только независимо друг от друга. Рассеяние падающей ЭМВ₀ на внешней границе вакуум–феррит возбуждало в слое пару волн ЭМВ₁ и ОСВ₁, которые в соответствии с законом дисперсии могли быть или бегущими или затухающими. При вторичном рассеянии этих волн на внутренней границе феррит–феррит в глубь феррита излучалась новая пара волн ЭМВ₂ и ОСВ₂ (также бегущие или затухающие), а внутри слоя устанавливались неоднородные спиновые колебания. Колебания в слое играли важную роль, они вносили «закрепление» спинов на границе феррит–феррит и тем самым дополнительно стимулировали преобразование типов волн ЭМВ₂ → ОСВ₂. В интервале частот $\gamma(H_0 - 4\pi M_0) \leq \omega \leq \gamma H_0$ возбуждение бегущих ОСВ₂ было вызвано преобразованием затухающих ЭМВ₂, а на частотах $\omega \geq \gamma H_0$ – преобразованием бегущих ЭМВ₂.

Механизм «закрепления» пограничных спинов в пределах спектра возбуждения ОСВ₂ имел качественные различия. В начале спектра в интервале частот $\gamma(H_0 - 4\pi M_{02}) \leq \omega \leq \gamma(H_0 - 4\pi M_{01})$ «закрепление» спинов было вызвано возбуждением в слое быстро затухающих ОСВ₁ (бегущие

ОСВ₁ отсутствовали) (см. кривые II и II' на рис. 2). Это обуславливало резкий экспоненциальный спад прецессии намагниченности на границе феррит–феррит. Такое «закрепление» имело монотонный характер и, по существу, мало отличалось от известного киттелевского «закрепления». Этим объясняется слияние кривых I , 2 и p на рис. 3 в самом начале спектра. На более высоких частотах $\omega \geq \gamma(H_0 - 4\pi M_{01})$ ситуация резко менялась. В слое оказывалось возможным возбуждение бегущих ОСВ₁ (затухающие ОСВ₁ отсутствовали), которые возбуждались в виде стоячих волн. При этом максимальное «закрепление» и, соответственно, максимальное излучение ОСВ₂ достигалось при образовании узла прецессии намагниченности на границе феррит–феррит. Ясно, что для реализации такого механизма «закрепления» толщина слоя должна была быть сравнимой с длиной ОСВ₁.

Эффекты резонансного и нерезонансного «закрепления» пограничных спинов были весьма критичны к параметрам легированного слоя, они могли возникать только при пониженной намагниченности слоя и при толщинах, сравнимых с длинами обменных волн. При уменьшении толщины слоя эффекты «закрепления» исчезали, реализовывался случай «свободных» поверхностных спинов, возбуждение бегущих ОСВ прекращалось.

2. Неколлинеарное возбуждение ОСВ. Эксперимент

Механизм неколлинеарного возбуждения ОСВ реализуется в двухслойной ферритовой структуре при гибридизации электромагнитных и/или магнитостатических волн с быстрыми волноводными модами ОСВ, возбуждаемыми в тонком легированном слое феррита. На полупрозрачной границе феррит–феррит обменная волна может частично вытекать из легированного слоя, распространяясь в глубь чистого слоя феррита. Особенность такого механизма преобразования состоит в том, что он имеет длительный и обратимый характер. В пределе он может продолжаться до полного преобразования энергии быстрых типов волн в энергию бегущих



ОСВ и обратно. Обнаружение такого типа преобразования входило в задачу данного эксперимента.

Для проведения экспериментов были выбраны обычные пленки ЖИГ (с «незакрепленными» спинами), которые были выращены методом жидкофазной эпитаксии на подложках гадолиний-галлиевого граната (ГГГ) с ориентацией поверхности (111). Толщины пленок d_0 составляли 3 и 14 мкм, ширины линий ФМР $2 \Delta H < 1$ Э. Толщины структур пленка ЖИГ-подложка ГГГ D_0 составляли 511 и 514 мкм. Размеры образцов составляли 10×10 мм².

Пленки имплантировались ионами He^+ с энергией 120 КэВ и дозой 10^{16} см⁻². Ионная имплантация создавала магнитную неоднородность пленки в тонком поверхностном слое. Толщина имплантированного слоя (ИС) оценивалась на основании статистических расчетов концентрации N ионов He^+ по глубине залегания x от поверхности пленки ЖИГ [21]. Расчеты функции распределения $N(x)$, проводились методом Монте-Карло при использовании фактических режимов имплантации. Результаты представлены на рис. 5. Видно, что толщина ИС составляла $x = (0.3 \pm \pm 0.2)$ мкм, что по порядку величины совпадало с характерными длинами ОСВ.

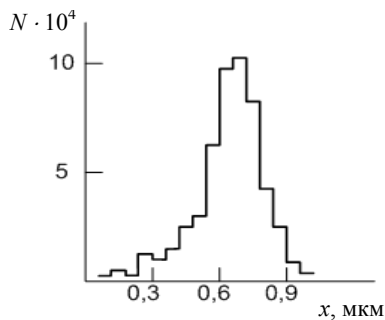


Рис. 5. Расчетная зависимость концентрации имплантированных ионов He от глубины залегания от поверхности пленки ЖИГ

Для обнаружения бегущих ОСВ использовалась импульсная методика измерений. О возбуждении ОСВ можно было судить по факту наблюдения отраженных эхоимпульсов. Длительность возбуждающего импульса выбиралась равной 20 нс. Этого было достаточно для уверенного разрешения эхоим-

пульсов, поскольку при толщине пленки $d \sim 3$ мкм и групповой скорости ОСВ $v_{\text{гр}} \sim \sim 10^4$ см/с задержка отраженного эхоимпульса должна была составлять $\tau = 2d/v_{\text{гр}} \sim 60$ нс.

В качестве возбудителей и приемников ОСВ использовались микрополосковые линии передачи ЭМВ, которые также использовались для возбуждения и приема МСВ. Эксперименты проводились при нормальном и касательном (продольном и ортогональном к полосковым преобразователям) намагничивании пленки ЖИГ, что соответствовало возбуждению в пленке прямых объемных (ПОМСВ), поверхностных (ПМСВ) и обратных объемных МСВ (ООМСВ).

Измерения проводились в непрерывном и импульсном режимах. В непрерывном режиме измерялись амплитудно-частотные (АЧХ) и амплитудно-полевые характеристики (АПХ) прошедшего или отраженного сигнала. В импульсном режиме измерялись время задержки и ослабление эхоимпульсов.

Эффекты преобразования ЭМВ \leftrightarrow ОСВ исследовались на макете, представленном на вставке рис. 6. Пленка ЖИГ приклеивалась к МПЛ преобразователю и помещалась в постоянное магнитное поле. С целью подавления сигналов МСВ полосковый преобразователь выбирался достаточно широким (0.5 мм) и был закорочен на конце. Исследовались отраженные сигналы МПЛ преобразователя. Падающие и отраженные сигналы разделялись при помощи ферритового Y-циркулятора.

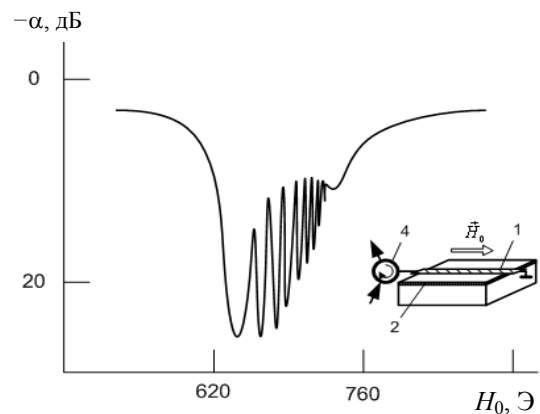


Рис. 6. АЧХ отраженного сигнала МПЛ преобразователя. На вставке – экспериментальный макет: 1 – МПЛ преобразователь; 2 – имплантированная пленка ЖИГ; 3 – подложка ГГГ; 4 – ферритовый циркулятор



Качественная картина наблюдаемых эффектов мало зависела от ориентации поля, но наиболее сильные эффекты были обнаружены при касательном продольном намагничивании пленки (геометрия возбуждения ПМСВ). Ниже приведены результаты измерений именно для этого случая намагничивания.

В непрерывном режиме на АЧХ отраженного сигнала была обнаружена область поглощения, как показано на рис. 6, которая смещалась полем H_0 . При определенных значениях поля в области поглощения обнаруживалась серия относительно узкополосных резонансных пиков. В импульсном режиме в области частот наблюдения пиков, помимо основного отраженного импульса, были обнаружены две серии задержанных эхоимпульсов, как показано на осциллограммах (рис. 7, а, б).

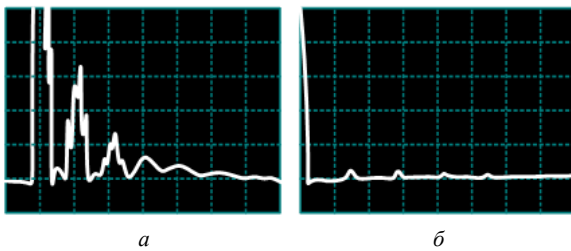


Рис. 7. Осциллограммы эхоимпульсов, полученные в режиме отражения от МПЛ преобразователя: а – ОСВ, б – упругих волн

Первая серия эхоимпульсов (рис. 7, а) отличалась относительно большими амплитудами и малыми временами задержки $\tau \approx 20 \div 50$ нс. Появление данной серии не было вызвано отражением магнитостатических волн от краев пленки, что проверялось путем смещений пленки ЖИГ относительно преобразователя. При смещении пленки задержка эхоимпульсов также не менялась. Задержка зависела только от величины намагничивающего поля H_0 и от толщины пленки. Следовательно, появление эхоимпульсов могло быть вызвано возбуждением волн, распространяющихся в поперечном направлении пленки. Согласно предварительной оценке скоростей $v = 2d_0/\tau \sim (10^4 - 10^5)$ см/с, это могли быть только обменные спиновые волны.

Подтверждение этого было получено при сравнении экспериментальных результатов с расчетной зависимостью времени пробега обменной волны $\tau(H_0) = 2d_0^{\text{эф}}/v_{\text{гр}}$, где $d_0^{\text{эф}}$ – эффективная толщина пленки ЖИГ. Формула для расчета $v_{\text{гр}}$ была получена из дисперсионного уравнения обменных волн [17] для случая $\vec{q}' \perp \vec{H}_0$ и имела вид

$$v_{\text{гр}} = 2\pi\eta q' \sqrt{1 + \left(\frac{\omega_M}{2\omega}\right)^2}, \quad (21)$$

где

$$q' = \sqrt{\frac{\sqrt{\omega^2 + (\omega_M/2)^2} - \omega_M/2 - \omega_H}{\eta}}, \quad (22)$$

$\omega_M = \gamma 4\pi M_0$, $\omega_H = 2H_0$, $\omega = 2\pi f$, $\eta = \alpha\omega_M$, $\gamma = 2.83$ МГц/Э – гиромагнитное отношение, $\alpha = 2.6 \cdot 10^{-12}$ см² – постоянная неоднородного обмена, $4\pi M_0 = 1750$ Э – намагниченность насыщения чистого ЖИГ.

Расчетные зависимости $\tau(H_0)$ и $q'(H_0)$ представлены на рис. 8. Совпадение экспериментальных точек с расчетной кривой $\tau(H_0)$ возникало при подстановке в уравнения (21), (22) эффективной толщины $d_0^{\text{эф}} = 1.5$ мкм при фактической толщине пленки $d_0 = 3$ мкм. Такое расхождение можно было считать удовлетворительным, поскольку $d_0^{\text{эф}}$ характеризовало длину пробега ОСВ в однородной (неимплантированной) части пленки, которая была меньше d_0 на толщину имплантированного слоя и толщину переходного слоя на границе пленка–подложка. В сумме эти толщины могли составлять 1–2 мкм (см., например, [21]). По результатам измерений были сделаны оценки волновых характеристик обнаруженных ОСВ:

$$q' = (0,5 \dots 2,5) \cdot 10^5 \text{ см}^{-1},$$

$$\lambda = 2\pi/q' = (0,3 \dots 0,6) \text{ мкм},$$

$$v_{\text{гр}} = (0,5 \dots 2,0) \cdot 10^4 \text{ см/с},$$

$$v_{\phi} = \omega/q' = (1,0 \dots 5,0) \cdot 10^5 \text{ см/с},$$

где v_{ϕ} – фазовая скорость ОСВ.

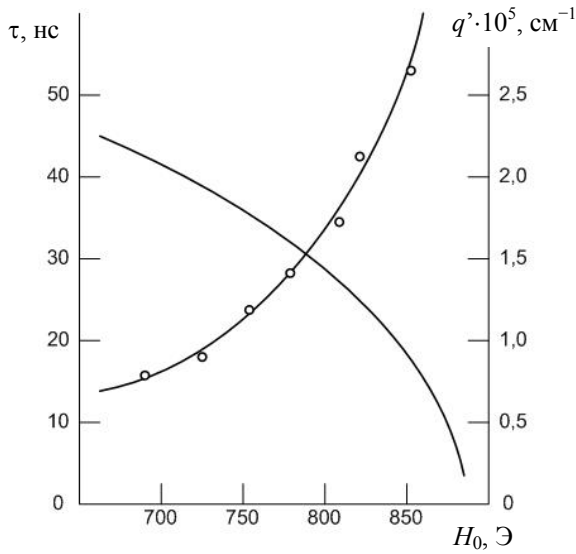


Рис. 8. Полевые зависимости задержки эхоимпульсов (1) и волновых чисел ОСВ (2)

Коэффициенты преобразования k и декременты ОСВ q'' определялись путем обработки осциллограмм импульсных сигналов отраженных от входного преобразователя (см. рис. 7, а). Для этого использовалась следующая методика. Измерялись амплитуды первого A_1 и второго A_2 эхоимпульсов, которые были связаны с амплитудой входного сигнала A_0 следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} A_1 &= A_0 k^2 \exp(-2q'' d^{\text{эф}}), \\ A_2 &= A_1 (1 - k) \exp(-2q'' d^{\text{эф}}). \end{aligned} \quad (23)$$

Из выражений (23) нетрудно было получить расчетные формулы:

$$\begin{aligned} k &= \frac{A_1^2}{A_0 A_1} \left[\sqrt{1 + \frac{2A_0 A_2}{A_1^2}} - 1 \right], \\ q'' &= -\frac{1}{2d^{\text{эф}}} \ln \left[\frac{A_2}{A_1} \left(\sqrt{1 + \frac{2A_0 A_2}{A_1^2}} - 1 \right) \right]. \end{aligned} \quad (24)$$

Результаты расчета коэффициентов преобразования k и декрементов ОСВ q'' представлены и на рис. 9. Видно, что полевая зависимость $k(H_0)$ имела немонотонный характер и в максимуме достигала $k \approx 30\%$. При этом декременты $q''(H_0) \approx (0,6 \dots 0,8) \cdot 10^3 \text{ см}^{-1}$ в пределах погрешности измерений оставались практически постоянными. Интерес-

но, что временные декременты ОСВ $\omega'' = 20 \ln(q'' v_{\text{гр}}) \approx 20 \text{ дБ/мкс}$ оказались того же порядка, что и в случае МСВ, хотя длины обменных волн были на 2–3 порядка меньше.

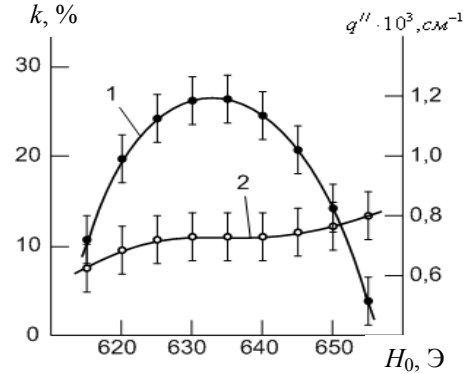


Рис. 9. Полевые зависимости коэффициента преобразования (1) и декремента ОСВ (2)

Вторая серия эхоимпульсов (см. рис. 7, б) возникала вместе с первой, но отличалась от нее меньшими амплитудами и большими временами задержки $\tau \approx 290 \text{ нс}$. Эти волны также возбуждались в поперечном направлении пленки, но их задержка не зависела ни от толщины пленки d_0 , ни от величины поля H_0 , а зависела, причем линейно, только от толщины структуры пленка-подложка D_0 . Это не могли быть ОСВ, но могли быть чисто упругие волны, бегущие в поперечном направлении в глубь подложки ГГГ. Это подтверждалось расчетом времени задержки эхоимпульсов $\tau_s = 2D/v_{st} = 288 \text{ нс}$, где $v_{st} = 3.57 \cdot 10^5 \text{ см/с}$ – скорость сдвиговых упругих волн в ГГГ. Возбуждение упругих волн могло быть вызвано, по крайней мере, двумя причинами: во-первых, вытеканием волноводных акустических мод, гибридованных с модами ОСВ в тонком имплантированном слое; во-вторых, коллинеарным (или почти коллинеарным) магнитострикционным взаимодействием бегущих ОСВ и звука [22] в чистой пленке ЖИГ.

Еще более интенсивные эффекты преобразования ОСВ и звука были обнаружены в спектре возбуждения магнитоэлектрических волн, как показано на вставке рис.10. Здесь МПЛ преобразователи имели существенно меньшую ширину $\approx 20 \text{ мкм}$ и предназначались для возбуждения и приема поверхност-



ных МСВ. В непрерывном режиме на АЧХ прошедшего сигнала ПМСВ были обнаружены известные дипольно-обменные резонансы, аналогичные [7], которые, однако, отличались ярко выраженной немонотонностью амплитуд (см. рис. 10). В импульсном режиме (рис. 11, *а, б*) были обнаружены те же две серии задержанных эхоимпульсов – импульсов ОСВ (рис. 11, *а*) и упругих волн (рис. 11, *б*). При таком способе возбуждения эффективность преобразования МСВ ↔ ОСВ достигала $k \approx 60\%$. Акустические эхоимпульсы также имели существенно большие амплитуды (ср. рис. 11, *б* и рис. 7, *б*).

С целью еще большего повышения интенсивности возбуждения ОСВ оба типа преобразования МСВ ↔ ОСВ и ЭМВ ↔ ОСВ были объединены в меандровой конструкции МПЛ преобразователя (см. вставку на рис. 12).

Меандровая линия имела пять периодов с шагом 0.5 мм, длину плеч 5 мм, ширину полоска 50 мкм. Прошедший сигнал поступал с выхода меандра. Как и в предыдущем случае, на АПХ прошедшего сигнала ЭМВ (см. рис. 12) обнаруживались резонансные

пики, которые служили ориентирами для импульсных измерений. В импульсном режиме обнаруживались те же обменные и акустические эхоимпульсы, которые отличались еще большими интенсивностями (рис. 13, *а, б*).

Характерно, что при таком способе возбуждения наблюдался только один (первый) эхоимпульс ОСВ (см. рис. 12, *а*), а все последующие эхоимпульсы оказывались за пределами чувствительности осциллографа. При этом эффективность преобразования достигала $k \approx 80\%$, но она могла быть еще больше при увеличении длины меандра.

Столь высокую эффективность преобразования и в особенности немонотонность амплитуд резонансных пиков на рис. 10, 12 невозможно было объяснить без учета резонансов имплантированного слоя, наличие которых было установлено прямыми наблюдениями при нормальном намагничивании пленки ЖИГ [23]. Резонансы ИС наблюдались на АПХ отраженного сигнала МПЛ (рис. 14, вставка) вне спектра возбуждения ПОМСВ (рис. 14, область *А*). Они отличались большей интенсивностью и следовали

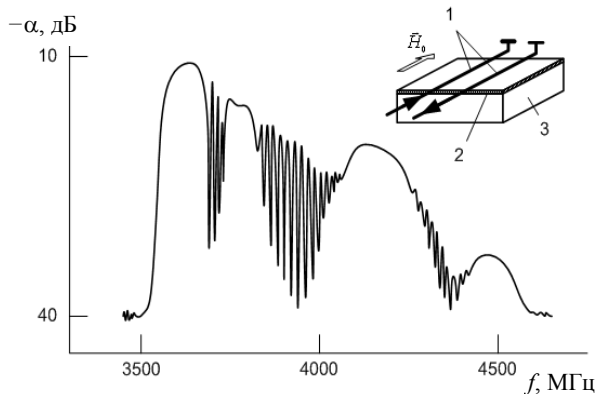


Рис. 10. АЧХ прошедшего сигнала ПОМСВ. На вставке – экспериментальный макет: 1 – МПЛ преобразователя; 2 – имплантированная пленка ЖИГ; 3 – подложка ГГ

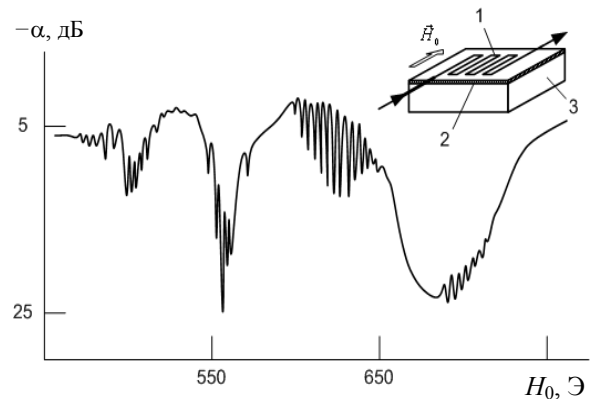


Рис. 12. АПХ прошедшего сигнала меандрового МПЛ преобразователя. На вставке – экспериментальный макет: 1 – меандровый МПЛ преобразователь; 2 – имплантированная пленка ЖИГ; 3 – подложка ГГ

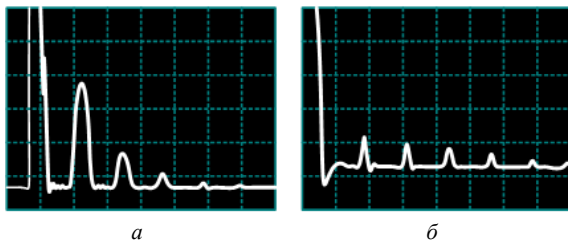


Рис. 11. Осциллограммы эхоимпульсов, полученные в режиме распространения ПМСВ: *а* – ОСВ, *б* – упругих волн

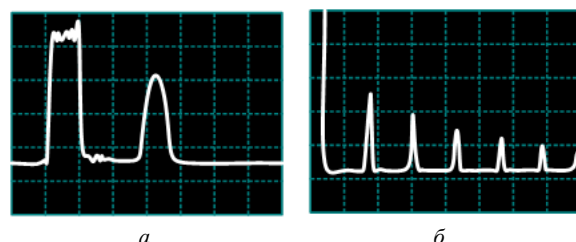


Рис. 13. Осциллограммы эхоимпульсов, полученные в режиме распространения ЭМВ: *а* – ОСВ, *б* – упругих волн

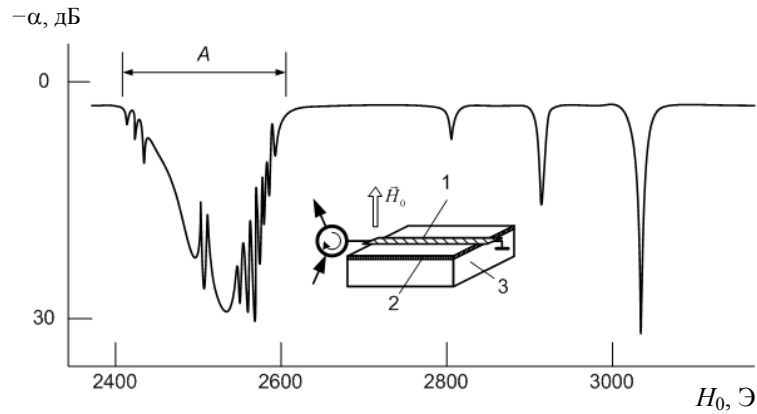


Рис. 14. АЧХ отраженного сигнала МПЛ преобразователя при нормальном намагничивании пленки ЖИГ. На вставке – экспериментальный макет: 1 – МПЛ преобразователь; 2 – имплантированная пленка ЖИГ; 3 – подложка ГГТ

с большими интервалами полей $\Delta H_0 \approx 115$ Э и 120 Э. В пределах спектра ПОМСВ пики дипольно-обменных резонансов располагались значительно плотнее $\Delta H_0 \sim (10 - 15)$ Э, поскольку устанавливались по толщине всей пленки.

По измерениям резонансных полей (см. рис. 14) можно было рассчитать эффективную толщину $d_i^{\text{эф}}$ и эффективную намагниченность $4\pi M_{0i}^{\text{эф}}$ имплантированного слоя. Для этого использовалось уравнение поперечного резонанса ОСВ в двухслойной ферритовой структуре, полученное при условии отсутствия возбуждения спиновых волн в одном из слоев. При нормальном намагничивании пленки это условие выполнялось в интервале полей $H_{\parallel} < H_0 < H_{\parallel}^{\text{эф}}$, где $H_{\parallel} = \omega/\gamma + 4\pi M_0$ и $H_{\parallel}^{\text{эф}} = \omega/\gamma + 4\pi M_{0i}^{\text{эф}}$ – предельные поля существования обменных волн в чистом ЖИГ и в имплантированном слое, а само уравнение имело вид

$$q' d_i^{\text{эф}} + \arctg\left(\frac{\text{Im} q'}{q'}\right) = n\pi, \quad (25)$$

где q' , q'_i – волновые числа ОСВ в чистом ЖИГ и в имплантированном слое соответственно. Волновые числа были определены из дисперсионного уравнения обменных волн в свободном пространстве при $\vec{q}', \vec{q}'_i \parallel \vec{H}_0$ в виде $q' = i\sqrt{(\omega_H - \omega)/\eta}$, $q'_i = \sqrt{(\omega - \omega_H)/\eta}$,

где $\omega_H = \gamma(H_0 - 4\pi M_0)$, $\omega_{Hi} = \gamma(H_0 - 4\pi M_{0i}^{\text{эф}})$, $\eta = \alpha\gamma 4\pi M_0$. Подстановка в уравнение (24) значений резонансных полей давала систему уравнений, которая решалась численными методами. Из решения системы были получены оценки величин $d_i^{\text{эф}} = (0.3 \pm 0.1)$ мкм и $4\pi M_{0i}^{\text{эф}} = (1270 \pm 80)$ Гс. Заметим, что оценка толщины имплантированного слоя $d_i^{\text{эф}}$ с хорошей точностью совпадала с расчетной (см. рис. 5).

Резонансы имплантированного слоя также наблюдались на АЧХ отраженного сигнала, но при этом пики возникали на частотах, расположенных ниже нижней границы спектра возбуждения ПОМСВ. При детальном рассмотрении АЧХ была обнаружена тонкая структура резонансных пиков, которая хорошо видна на развертке первого (наиболее интенсивного) пика (рис. 15). Тонкая структура представляла собой серию эквидистантных (с интервалами частот $\Delta f = 3.54$ МГц) узкополосных (шириной < 1 МГц) резонансных пиков, амплитуда которых достигала максимума в центре широкополосного пика и спадала к периферии. При заданном поле $H_0 = 2690$ Э наибольшая интенсивность узкополосных пиков наблюдалась в диапазоне частот 2...3 ГГц. Подобные пики наблюдались и ранее. В работах [24, 25] было показано, что их появление могло быть вызвано возбуждением в подложке ГГТ гиб-

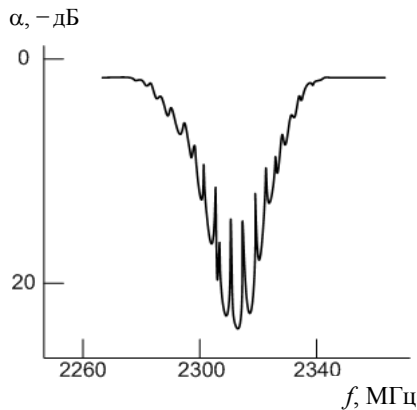


Рис. 15. АЧХ первого резонансного пика имплантированного слоя

ридизованных акустических мод Лэмба, но в данном случае гибридизация могла возникать только с волноводными модами ОСВ, возбуждаемыми в тонком имплантированном слое.

Немонотонность амплитуд дипольно-обменных резонансов на рис. 10, 12, 14 можно было пояснить на упрощенной модели двухслойной пленки. Вследствие симметрии внешних граничных условий в двухслойной пленке ЖИГ могли возбуждаться только симметричные (полуволновые) резонансы ОСВ. Но, однако, полуволновые резонансы могли существовать только при условии возбуждения в каждом из слоев несимметричных (четвертьволновых) резонансов. С учетом конечных ширин резонансных линий это условие можно было записать в виде

$$f_{n1} - \delta f_{n1} < (f_{n2} \pm \delta f_{n2}) < f_{n1} + \delta f_{n1}, \quad (26)$$

где $f_{ni} = n_i v_i / (2d_i)$ – резонансные частоты в контактирующих слоях: при $i = 1$ – в тонком (имплантированном) слое, при $i = 2$ – в слое чистого ЖИГ, $\delta f_{ni} = f_{ni} / Q_{ni}$ – полуширины резонансных линий, Q_{ni} – добротности резонансов ($Q_{n2} > Q_{n1}$), n_i – номера мод четвертьволнового резонанса, v_i – фазовые скорости ОСВ, d_i – толщины слоев ($d_2 \gg d_1$). Из условия (25) нетрудно было получить правило отбора допустимых номеров четвертьволновых резонансов n_2 в толстом (неимплантированном) слое при заданных номерах резонансов n_1 в тонком (имплантированном) слое

$$n_1 \frac{d_2 v_1}{d_1 v_2} \left(1 - \frac{1}{Q_{n1}}\right) \left(1 + \frac{1}{Q_{n2}}\right)^{-1} < n_2 < n_1 \frac{d_2 v_1}{d_1 v_2} \left(1 + \frac{1}{Q_{n1}}\right) \left(1 - \frac{1}{Q_{n2}}\right)^{-1}, \quad (27)$$

и соответственно правило отбора допустимых номеров полуволновых резонансов в двухслойной структуре $n_0 = (n_1 + n_2) / 2$, которое с учетом (27) можно было записать в виде

$$2n_1 \left[1 + \frac{d_2 v_1}{d_1 v_2} \left(1 - \frac{1}{Q_{n1}}\right) \left(1 + \frac{1}{Q_{n2}}\right)^{-1}\right] < n_0 < 2n_1 \left[1 + \frac{d_2 v_1}{d_1 v_2} \left(1 + \frac{1}{Q_{n1}}\right) \left(1 - \frac{1}{Q_{n2}}\right)^{-1}\right]. \quad (28)$$

Заметим, что интервалы частот между соседними четвертьволновыми резонансами $\Delta f_{ni} = v_i / (2d_i)$ обратно пропорциональны толщинам слоев. Из этого следует, что $\Delta f_{n1} \gg \Delta f_{n2}$. Из-за толщинной неоднородности имплантированного слоя его добротность была значительно ниже добротности чистой пленки ЖИГ. Из этого следовало, что $\delta f_{n2} < \delta f_{n1}$, но тогда при достаточной толщине пленки могло оказаться, что $\delta f_{n2} < \Delta f_{n2} < \delta f_{n1}$. В этом случае в полосе резонансных частот имплантированного слоя должен возбуждаться не один, а несколько резонансов двухслойной пленки ЖИГ. Понятно, что на промежуточных частотах $f_{n1} + \delta f_{n1} < f < f_{n1+1} - \delta f_{n1+1}$ резонансы ОСВ возбуждаться не могут. Из этого следует, что дипольно-обменные резонансы в имплантированной пленке ЖИГ должны возбуждаться в порядке следования номеров, но с чередующимися интервалами спада амплитуд.

Заметим, что при построении модели двухслойной пленки мы не делали никаких предположений о «закреплении» спинов. Тем не менее из условия (25) следовало, что на частотах четвертьволновых резонансов на границе ферритовых слоев должен возникать узел прецессии намагниченности. Следуя



традициям, можно было трактовать возникновение узла, как наведенное динамическое (или резонансное) «закрепление» пограничных спинов. Понятно, что такого рода «закрепление» могло оказаться достаточно сильным даже при небольшом скачке намагниченности на границе ферритовых слоев.

Резонансный механизм «закрепления» спинов оставался в силе и при отсутствии резонансов в одном из слоев, например, при кратковременном (импульсном) возбуждении ОСВ, когда резонансы в толстом слое ЖИГ еще не успевали установиться. В этом случае «закрепленная» граница выполняла функции преобразователя бегущих ОСВ. Понятно, что такого рода преобразование должно было иметь резонансный характер, причем полоса частот (или полей) импульсного преобразования ОСВ должна соответствовать полосе собственных резонансов ИС. Но, однако, в экспериментах эта полоса оказывалась значительно шире, чем на рис.14. Оценка добротности имплантированного слоя по ширине полосы кривой $k(H_0)$ (см. рис. 9), которая практически повторяла форму резонансной кривой первой моды ОСВ, составляла $Q \approx H_0/\Delta H_0 \approx 10$, что оказалось на порядок ниже добротности собственных резонансов имплантированного слоя. Но так и должно быть, поскольку таким способом оценивалась добротность нагруженного резонатора. Нагруженность резонансов ИС возникала из-за излучения бегущих ОСВ.

Интенсивность импульсного преобразования ОСВ быстро спадала с ростом номера гибридной моды ОСВ имплантированного слоя. Так, например, на частоте ближайшей третьей моды она уже не превышала 5%. Этот спад можно было объяснить снижением добротности собственных резонансов ИС, вызванного рассеянием ОСВ на толщинных неоднородностях имплантированного слоя. С учетом этого становится понятной причина слабого возбуждения ОСВ при нормальном намагничивании пленки. В этом случае эффекты излучения были вызваны возбуждением только высших мод с номерами $n_1 > 7$. Напомним, что низшие, наиболее интенсивные моды ОСВ, возбуждались

вне спектра существования ОСВ в чистой пленке ЖИГ. По измерениям амплитуд резонансных пиков на рис.14 можно было оценить спад интенсивности резонансных пиков приблизительно как $1/n_1^2$. С учетом этого эффективность возбуждения ОСВ на частоте седьмой моды имплантированного слоя должна была составлять приблизительно 2% от максимально возможной. Примерно в таком же соотношении находились предельные коэффициенты преобразования ОСВ, измеренные при нормальном и при касательном намагничивании пленки ЖИГ.

Интенсивность излучения бегущих ОСВ определялась интенсивностью волноводных мод ОСВ, которая зависела от типа волны-возбудителя – электромагнитной или магнитостатической волны. Но, однако, эффективность преобразования энергии ЭМВ \leftrightarrow ОСВ и МСВ \leftrightarrow ОСВ определялась не только интенсивностью излучения, но и длительностью процесса излучения, то есть зависела от длины пробега вытекающей моды ОСВ. При неограниченной длине пробега можно было ожидать практически полного преобразования энергии даже при слабой интенсивности излучения.

Заключение

На основании экспериментальных исследований и расчетов было показано, что в слоистых монокристаллических феррит-ферритовых структурах возможно высокоэффективное возбуждение обменных спиновых волн. Эффекты возбуждения ОСВ возникают за счет преобразования энергии быстрых типов волн (электромагнитных и/или магнитостатических) и носят ярко выраженный резонансный характер. Возможно коллинеарное и неколлинеарное возбуждение ОСВ.

Коллинеарное возбуждение ОСВ возникает при нормальном падении электромагнитной волны на поверхность слоистой феррит-ферритовой структуры. Тонкий легированный слой выполняет функции согласующего четвертьволнового резонатора. При этом на границе ферритовых слоев возникает узел прецессии намагниченности, который можно трактовать как динамическое или ре-



зонансное закрепление пограничных спинов. Показано, что при стремлении к нулю толщины поверхностного легированного слоя эффекты закрепления исчезают.

Неколлинеарное возбуждение возникает за счет частичного вытекания волноводных мод ОСВ, возбуждаемых в тонком легированном слое феррита за счет эффектов гибридизации с быстрыми типами волн. Обратное преобразование возникает за счет частичного проникновения бегущих ОСВ в глубь имплантированного слоя, возбуждения в нем волноводных мод и связанных с ними быстрых типов волн. Особенность такого механизма преобразования состоит в том, что он имеет длительный характер. Это позволяет даже при слабой интенсивности излучения/поглощения ОСВ достигать высокой эффективности преобразования энергии ЭМВ \leftrightarrow ОСВ и МСВ \leftrightarrow ОСВ.

Показано, что в имплантированных пленках ЖИГ параллельно с ОСВ возбуждаются чисто упругие волны, которые убегают в глубь подложки ГГГ. Это возбуждение возникает вследствие неколлинеарного излучения связанных акустических волноводных мод Лэмба, возбуждаемых в имплантированном слое за счет гибридизации с модами ОСВ, а также за счет коллинеарного излучения звука обменными волнами бегущими в чистой пленке ЖИГ.

Предложенный способ высокоэффективного преобразования коротковолновых обменных спиновых волн и звука открывает широкие перспективы создания принципиально новых сверхминиатюрных спинволновых устройств аналоговой обработки радиосигналов в диапазоне СВЧ вплоть до миллиметрового и субмиллиметрового диапазона длин волн.

Список литературы

1. Bloch F. // Zs. für Phys. 1930. Bd.61, №3–4. S.206–216.
2. Гуревич А.Г. Ферриты на сверхвысоких частотах. М.: Физматгиз, 1973. 497 с.
3. Suhl H. // J. Phys. Chem. 1973. Bd.1, №4. P.209–227.
4. Seavey M.H., Tannenwald P.E. // Phys. Rev. Lett. 1958. Vol.1, №5. P.168–169.
5. Wames R.E. de, Wolfram T. // J. Appl. Phys. 1970. Vol.41. P.987–993.
6. Adam J.P., O’Keeffe T.W., Patterson R.W. // J. Appl. Phys. 1979. Vol.50, №3. P.2446–2448.
7. Гуляев Ю.В., Бугаев А.С., Зильберман П.Е., Игнатьев И.А., Коновалов А.Г., Луговской А.В., Медников А.М., Нам Б.П., Николаев Е.И. // Письма в ЖЭТФ. 1979. Т.30, №9. С.600–603.
8. Kittel C. // Phys. Rev. 1958. Vol.110, №6. P.1295–1299.
9. Rado G., Weertman I. // Phys. Rev. Vol.94, №5. P.1386–1392.
10. Зильберман П.Е., Шишкин В.Г. // РЭ. 1990. Т.35. С.204–206.
11. Гуляев Ю.В., Зильберман П.Е., Санников Е.С., Тихонов В.В., Толкачев А.В. // Письма в ЖТФ. 1988. Т.14, №10. С.884–888.
12. Тихонов В.В., Толкачев А.В. // ФТТ. 1994. Т.36, №1. С.185–193.
13. Зильберман П.Е., Темирязов А.Г., Тихомирова М.Н. // УФН. 1995. Т.165, №10. С.1219–1223.
14. Зильберман П.Е., Темирязов А.Г., Тихомирова М.Н. // ЖЭТФ. 1995. Т.108, №1(7). С.281–302.
15. Тихонов В.В., Нефедов И.С. // ЖТФ. 1996. Т.66, №8. С.133–142.
16. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 1957. 532 с.
17. Ахиезер А.И., Барьяхтар В.Г., Пелетминский С.В. Спиновые волны. М.: Наука, 1967. 368 с.
18. Высоцкий С.Л., Казаков Г.Т., Маряхин А.В., Сухарев А.Г., Филимонов Ю.А., Хе А.С. // ФТТ. 1992. Т.34, №5. С.1376–1383.
19. Hoffman F. // Phys. Stat. Sol. 1970. Vol.41. P.807–813.
20. Visotsky S.L., Kazakov G.T., Nam B.P., Filimonov Yu.A., He F.S. // JMMM. 1994. Vol.131, №12. P.2067–2074.
21. Кудряшкин И.Г., Крутогин Д.Г., Ладыгин Е.А., Летюк Л.М., Маряхин А.В., Нам Б.П., Хе А.С., Фетисов Ю.К. // ЖТФ. 1989. Т.59, №3. С.70–77.
22. Ахиезер А.И., Барьяхтар В.Г., Пелетминский С.В. // ЖЭТФ. 1958. Т.35, №1. С.228–239.
23. Тихонов В.В., Толкачев А.В., Остафийчук Б.К. // Письма в ЖТФ. 1991. Т.17, №15. С.49–52.
24. Гуляев Ю.В., Зильберман П.Е., Казаков Г.Т., Сысоев В.Г., Тихонов В.В., Филимонов Ю.А., Нам, Б.П., Хе А.С. // Письма в ЖЭТФ. 1981. Т.39, №9. С.500–504.
25. Казаков Г.Т., Тихонов В.В., Зильберман П.Е. // ФТТ. 1983. Т.25, №8. С.2307–2312.

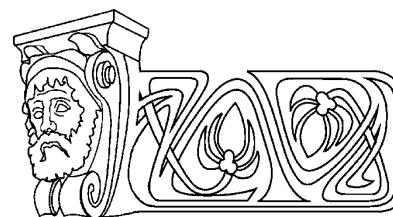


УДК 577.3

О РАСПРОСТРАНЕНИИ СИГНАЛОВ В НЕРВНОМ ВОЛОКНЕ

Ю.Н. Зайко

Поволжская академия государственной службы им. П.А. Столыпина, Саратов
E-mail: zyrnick@rambler.ru



В статье рассмотрен вопрос о распространении сигналов (информации) в нервном волокне с учетом омических потерь и тепловых процессов. Это позволяет объединить две стадии процесса распространения и связанного с ним транспорта ионов Na^+ и K^+ через клеточную мембрану: метаболическую и неметаболическую. Электродинамика нервного волокна описывается уравнениями длинной линии с учетом потерь. Тепловые процессы в волокне – уравнением транспорта энтропии. Движение ионов на метаболической стадии против электрохимического потенциала описывается с помощью отрицательной проводимости, отвечающей за ток утечки. Исследованы решения полученных уравнений типа бегущей волны. Получены интеграл и точное решение данной системы уравнений. Численно исследованы решения в виде серии почти гармонических импульсов, что доказывает возможность применения уравнений длинной линии к рассматриваемой задаче. Также исследованы различные уединенные волны в нервном волокне, отвечающие различным типам проводимости.

Ключевые слова: нервное волокно, динамика ионов, клеточная мембрана, бегущая волна, длинная линия, уединенная волна, электрохимический потенциал, потенциал действия.

SIGNAL PROPAGATION IN NERVE FIBER

Yu.N. Zayko

In this article a problem of signal propagation in nerve fiber is considered. Ohm's losses and heat processes are taken into account. These permit to join two stages (metabolic and non-metabolic) of propagation and Na^+ and K^+ ions transmission through cell membrane connected with propagation. Electrodynamics of nerve fiber is described by telegraph equations with losses. Heat processes in fiber are described by an equation of entropy transfer. Ion motion at metabolic stage against the electro-chemical potential is described by negative conductance, responsible for the escape flow. A running-wave type solutions of these equations are studied. An integral and explicit solution of given system are received. A solution of series of quasi-harmonic pulses is investigated numerically. This proves the possibility of telegraph equation implementation to considered problem. Different types of solitary waves corresponding to various types of conductivity are investigated also.

Key words: nerve fiber, ion motion, cell membrane, running wave, telegraph equations, solitary wave, electro-chemical potential, action potential.

Введение

Описание распространения нервных импульсов – потенциалов действия на основе измеренных параметров нервной клетки – явилось подтверждением картины динамики

ионного транспорта на границе клеток живых организмов [1]. Выделяют две стадии этого процесса – пассивную и активную. На пассивной (неметаболической) стадии ионы Na^+ и K^+ переносятся внутрь и соответственно наружу клетки через клеточную мембрану. Их движение описывается с помощью уравнений Максвелла для электрических и магнитных полей (или токов и напряжений) вблизи клеточной мембраны [2]. Для объяснения динамики ионов на активной стадии, соответствующей метаболическому переносу ионов Na^+ и K^+ в обратных направлениях, т.е. против действующего на них электрохимического потенциала, привлекают дополнительные соображения, например, использующие доставку необходимой энергии за счёт превращения АТФ (аденозинтрифосфат) в АДФ (аденозиндифосфат) [2]. Основным механизмом активного транспорта ионов Na^+ и K^+ является механизм, осуществляемый специфическими мембранными белками за счёт изменения их конформационной трёхмерной структуры при подведении к ним химической энергии (молекулы АТФ) или при поглощении кванта света [2, 3]. В работе [4] предложено выражение для скорости активного переноса $v = \mu F$, где μ – подвижность иона, а сила (так называемая термодинамическая сила Гиббса [4, 5]) $F = -T \cdot \Delta S / l$, где l – толщина мембраны, T – абсолютная температура среды, $\Delta S = S_1 - S_2$ – разность энтропии, приходящейся на один ион мембранного белка в разных конформационных состояниях.

В настоящей работе предложена модель для описания распространения сигналов в нервном волокне с учётом изменения его энтропии, что позволяет включить эффект изменения структуры мембранного белка в основные уравнения модели.



1. Электродинамические уравнения

Электродинамика нервного волокна описывается уравнениями длинной линии [2]:

$$\begin{aligned} V_x + L \cdot I_t + R \cdot I &= 0, \\ C \cdot V_t + I_x + G \cdot V &= 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь V – напряжение, отсчитываемое от некоторого усреднённого по типам ионов равновесного значения; L – погонная индуктивность; I – ток проводимости, текущий вдоль волокна; R – погонное сопротивление; C – погонная ёмкость; G – некоторая усреднённая по типам ионов проводимость; $GV = j_i$ – ток ионов через мембрану – «ток утечки». x и t – координата вдоль волокна и время.

Уравнения (1) при $R = G = 0$, т.е. при отсутствии потерь, приводят к закону сохранения энергии $H_t + P_x = 0$, где $H = \frac{1}{2}L I^2 + \frac{1}{2}C V^2$ – плотность энергии, а $P = I V$ – плотность потока энергии. Как уже отмечалось выше, решения (1) описывают только пассивный транспорт ионов. Для описания возвращения системы в исходное состояние после прохождения нервного импульса (или серии N импульсов, $N \gg 1$) предлагались различные обобщения (1), моделирующие стадию активного транспорта ионов (перезарядку «ионных батарей» [2]). Наиболее известным является уравнение Фитц–Хью–Нагумо [2], ставшее полезной моделью для математиков, также применявшееся для описания активных сверхпроводящих линий передачи. Работам этого направления присущи определённые недостатки:

1. Используется изэнтропическое приближение. Это не позволяет связать электродинамические и информационные процессы, что характерно для живых организмов.

2. Введение дополнительных членов в исходные уравнения выполняется не на основе первых физических принципов, а носит сугубо модельный характер.

3. Все уравнения, полученные таким образом, имеют решения в виде импульсов строго определённой формы. Было бы странно, если бы созданные в ходе эволюции биологические системы отличались этой особенностью, приводящей к неустойчивости по отношению к изменению внешних условий. Напротив, скорее можно предположить, что

в ходе эволюции были созданы системы, нервные волокна которых проводили бы импульсы любой формы (бездисперсность), которая определялась бы устройством (органом) возбуждения и изменялась в зависимости от условий внешней среды.

Кроме того, отсутствие дисперсии является необходимым условием описания электродинамических систем с помощью уравнений длинных линий с не зависящими от частоты (волнового числа) параметрами [6].

2. Транспорт тепла в нервном волокне

В настоящей работе предлагается модель, свободная (возможно, частично) от отмеченных недостатков, уравнения которой получены из выражений для H и P с учётом потерь и тепловых процессов:

$$H = \frac{1}{2}L \cdot I^2 + \frac{1}{2}C \cdot V^2 + \varepsilon; P = I \cdot V - \gamma T_x, \quad (2)$$

где ε – плотность внутренней энергии волокна, определяемая из соотношения $d\varepsilon = T ds - p dV'$; s , p и V' – энтропия единицы длины, давление и объём волокна, γ – коэффициент теплопроводности волокна. Ограничимся рассмотрением несжимаемой среды: $dV' = 0$. Из закона сохранения энергии $H_t + P_x = 0$ следует, что система (1) должна быть дополнена уравнением переноса тепла:

$$T \cdot s_t = R \cdot I^2 + G \cdot V^2 + \gamma \cdot T_{xx}. \quad (3)$$

Уравнение (3) связано с (1) за счёт зависимости R и G от погонной энтропии s .

До сих пор наши рассуждения являются строгими в рамках сделанных предположений. В частности, из них следует второе начало термодинамики для энтропии S волокна:

$$\begin{aligned} S_t = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{R(s)I^2 + G(s)V^2}{T} dx + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma T_x^2}{T^2} dx \geq 0, \\ S = \int_{-\infty}^{\infty} s dx. \end{aligned} \quad (4)$$

При выводе (4) было использовано условие достаточно быстрого убывания T на бесконечности, а также положительность $R(s)$, $G(s)$ и γ .



Чтобы исследовать полученные уравнения, надо сделать некоторые правдоподобные предположения о поведении $R(s)$ и $G(s)$. На наш взгляд, представляется весьма вероятным предположить следующее:

а) в момент перезарядки ионных батарей ток утечки $j_i = G V$ изменяется быстрее тока проводимости I , и можно пренебречь зависимостью R от плотности энтропии s ;

б) поскольку перезарядка осуществляется за счёт движения ионов Na^+ и Ca^+ против электрохимического потенциала, то естественно предположить, что она связана с изменением знака $G(s)$ с положительного на отрицательный при значениях плотности энтропии s больше некоторого характерного значения s_0 . Это согласуется с представлением о том, что в живых организмах происходит нарушение второго начала термодинамики за счёт потребления отрицательной энтропии (негэнтропии) [7], в данном случае отрицательной энтропии мембранных белков.

3. Исследование уравнений

Приведем систему уравнений (1) и (3) к безразмерному виду, для чего введем единицы напряжения $V_0 = 1 \cdot 10^{-6}$ В и тока $I_0 = 1 \cdot 10^{-9}$ А, характерные для рассматриваемых явлений [2, 8]. Кроме того, используем характерные значения удельных сопротивления R и проводимости G : $R = 3.82 \cdot 10^3$ Ом/см, $G = 1.57 \cdot 10^{-4}$ 1/Ом·см и теплопроводности волокна $\gamma = 0.47 \cdot 10^{-4}$ Вт·см/К. При этом мы в качестве среды распространения рассматриваем по традиции гигантский аксон кальмара диаметром $d = 10^{-1}$ см [1, 2, 8]. Из приведенных величин построим единицу температуры $T_0 = V_0^2 / \gamma R = 0.56 \cdot 10^{-11}$ К. Запишем систему уравнений (1) и (3) для величин $I = I/I_0$, $v = V/V_0$ и $t = T/T_0$, причем ограничимся исследованием ее решений вида бегущей волны, т.е. зависящих лишь от комбинации $\xi = x - u \cdot t$, u – скорость волны. Приведем вид полученных таким образом уравнений в системе отсчета, в которой волна покоится:

$$\begin{aligned} v_\xi + i &= 0, \\ i_\xi + \Gamma v &= 0, \\ t_{\xi\xi} + i^2 + \Gamma v^2 &= 0, \end{aligned} \quad (5)$$

где $\Gamma = G/R \cdot V_0^2 / I_0^2$ – параметр задачи, $\xi = x V_0 / R I_0$ – безразмерная координата. Для приведенных выше значений единица длины $R I_0 / V_0 = 0.26$ см, а параметр $\Gamma = 4.1 \cdot 10^{-2}$.

Система (5) допускает интеграл M и имеет решение в виде

$$\begin{aligned} M &= t_\xi - i v = t_\xi + \frac{1}{2} (v^2)_\xi, \\ t &= -\frac{1}{2} v^2 + M \xi + t_0, \end{aligned} \quad (6)$$

где t_0 – некоторая постоянная температура. Заметим, что это решение не зависит от каких бы то ни было предположений относительно зависимостей $R(s)$ и $G(s)$ или, что то же, $R(T)$ и $G(T)$, имея в виду связь между s и T : $T \cdot s_t = c \cdot T_t$, c – теплоёмкость единицы длины волокна [5].

Сформулируем эти предположения явно в виде зависимости $G = -G_0 \cdot \text{th}(t/q)$, что соответствует поглощению электромагнитной энергии и сопровождающему его производству энтропии при $t < 0$ и обратной картине при $t > 0$. Отсчет температуры мы ведем от некоторой температуры гомеостаза, в качестве которой для численных расчетов выбрано значение 300 К. Величина q представляет размер температурной области вблизи гомеостаза, в пределах которой происходит смена знака G . Величина $G_0 = 1.57 \cdot 10^{-4}$ 1/Ом·см. Согласно сказанному выше мы пренебрегли зависимостью $R(s)$ или, что то же, $R(T)$.

На рис. 1–4 представлены результаты решения граничной задачи для системы (5) при указанных значениях параметров и граничных значениях: $v_0 = 70$, $i_0 = 0.9$, $t_0 = 5.357 \cdot 10^{11}$, $t_0' = 63$, при которых значение интеграла $M = 0$. Значение $q = 5.357 \cdot 10^{10}$, что в размерных величинах соответствует ширине области изменения знака проводимости в 0.3 К при превышении температуры гомеостаза на 3 К.

Рассмотрим решения (5) другого типа, а именно решения типа уединенных волн, исследованию которых посвящено подавляющее число публикаций на эту тему. Система (5) путем несложных преобразований может быть приведена к виду:

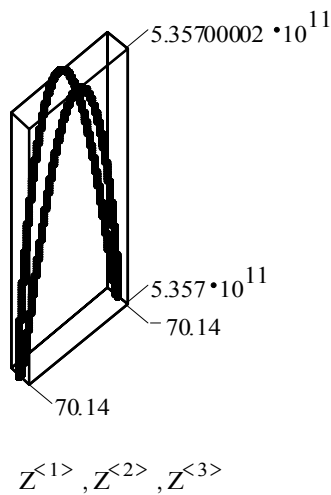


Рис. 1. Фазовый портрет решения (5). По осям отложены: напряжение, ток проводимости (соответствующая ось не имеет разметки) и температура

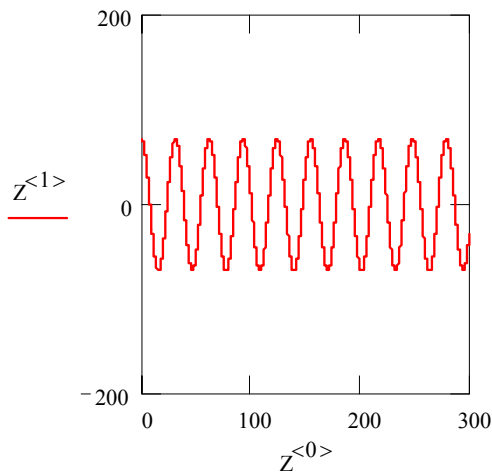


Рис. 2. Зависимость напряжения от координаты. Шаг по оси абсцисс равен 0.037

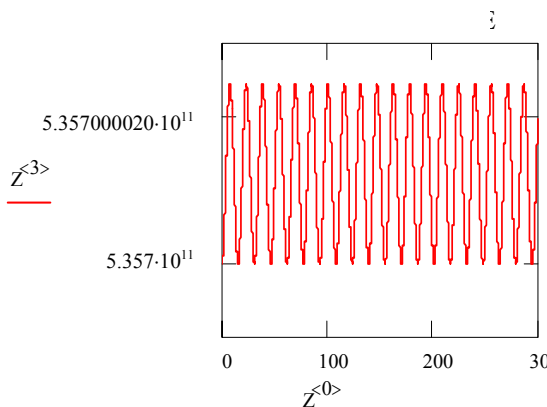


Рис. 3. Зависимость температуры от координаты. Шаг по оси абсцисс см. на рис. 2

$$v_{\xi\xi} - \Gamma(v) \cdot v = 0, \quad (7)$$

$$\Gamma(v) = \Gamma_0 \cdot th \frac{v^2/2 - t_0}{q}.$$

Ее решение можно представить в виде квадратуры:

$$\xi = \pm \int_0^v \frac{dv}{\sqrt{2[W_0 - W(v)]}}, \quad (8)$$

$$W(v) = -\Gamma_0 q \cdot \ln \left[ch \frac{v^2/2 - t_0}{q} \right],$$

где W_0 – постоянная интегрирования. Вид «потенциала» $W(v)$ показан на рис. 5 для значений параметров, приведенных выше.

Фазовая плоскость (v, v') уравнения (7) имеет следующие особые точки: $v_1 = 0$ – центр, $v_{2,3} = \pm(2t_0)^{1/2}$ – неустойчивые фокусы. Единственный вид решений типа уединенной волны, возможный при данной постановке задачи (обусловленный выбором зависимости $G(t)$, приведенной выше), – перепад, соответствующий траектории на фазовой плоскости, связывающей два фокуса и отвечающий волне переключения напряжения между значениями $-(2t_0)^{1/2}$ и $+(2t_0)^{1/2}$.

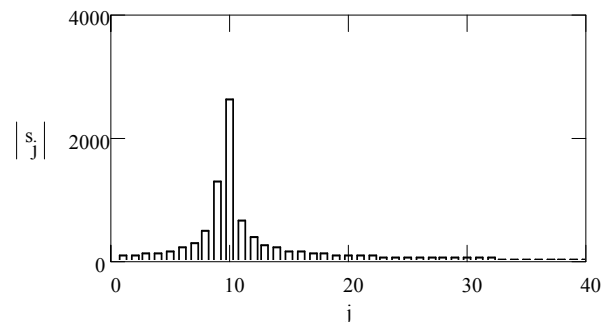


Рис. 4. Спектр фурье-напряжения: $s = \text{FFT}(Z^{<1>})$

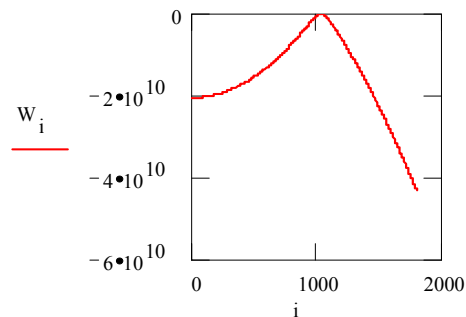


Рис. 5. Вид зависимости $W(v)$ согласно формуле (8) для $v > 0$



Рассмотрим другой вид зависимости $G(t) = G_0 \cdot (1 - a / ch^2(t/q))$, $1 < a < 2$, соответствующий изменению знака проводимости G в узком температурном интервале порядка q . Соответствующий «потенциал» $W(v)$ в выражении (8) приобретет вид

$$W(v) = \Gamma_0 \cdot \left(t_0 - \frac{v^2}{2} - qa \cdot th \frac{t_0 - v^2/2}{q} \right). \quad (9)$$

Он показан на рис. 6 ($a = 2$, остальные параметры имеют те же значения, что и на рис. 5).

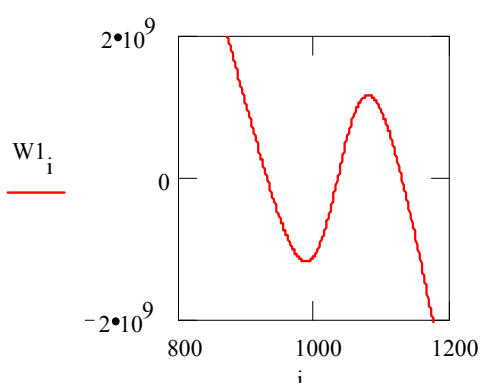


Рис. 6. Вид «потенциала» $W(v)$ согласно формуле (9) ($v > 0$)

Для такого «потенциала» фазовая плоскость уравнения (7) допускает замкнутые траектории, начинающиеся и заканчивающиеся в одном неустойчивом фокусе, соответствующем максимуму $W(v)$. Такой траектории отвечает уединенная волна напряжения, имеющая вид горба.

4. Обсуждение результатов

Как видно из представленных результатов, решение уравнения (5) малой амплитуды носит осциллирующий характер, т.е. представляет серию импульсов, спектр которых близок к гармоническому, а частота не зависит от скорости распространения. Это подтверждает допустимость использования уравнений длинной линии (1) для данной задачи.

Кроме того, результаты обосновывают само понятие гомеостаза как устойчивого состояния, малые отклонения от которого не

растут и состояние не разрушается. Справедливость этого факта подтверждена при значительных вариациях величин граничных значений, но при условии превышения граничной температуры над температурой гомеостаза. При нарушении этого условия, т.е. при выборе $t_0 < 0$, устойчивое, осциллирующее поведение решения сменяется на монотонное, что говорит о значительном отклонении от гомеостаза. Кроме того, решения с $M \neq 0$ также связаны с разрушением гомеостаза.

Что же касается описания распространения сигналов (информации) в нервном волокне, которые обычно отождествляются с уединенными импульсами, то результаты зависят от того, какое предположение мы делаем относительно поведения проводимости. В первом случае, соответствующем выражению (8) для $W(v)$, уединенная волна напряжения имеет форму перепада, тогда как при эксперименте наблюдается волна напряжения, более соответствующая выражению (9) для $W(v)$. Для выбора в пользу последнего случая есть и физические основания, заключающиеся в том, что запас энергии, доставляемый мембранными белками, ограничен и вряд ли может обеспечить изменение знака проводимости в бесконечном температурном интервале, как в первом случае.

Основным результатом работы является построение простой модели для описания распространения сигналов в нервном волокне, исходя из первых физических принципов: закона сохранения энергии и второго начала термодинамики, которая позволяет получать простые аналитические выражения для измеряемых величин – напряжения, температуры и др. и, кроме того, позволяет объединить рассмотрение обеих стадий ионного транспорта – активной (метаболической) и пассивной (неметаболической).

В заключение следует сказать, что поставленная задача требует более детального рассмотрения, в первую очередь в плане теоретического определения зависимости проводимости от плотности энтропии (температуры).



Список литературы

1. *Hodjkin A.L., Haxley A.F.* The dual effect of membrane potential on sodium conductance in the giant axon of *Loligo*. // *J. Physiol.* 1952. Vol. 116. P. 497–551.
2. *Скотт Э.* Волны в активных и нелинейных средах с приложением к электронике / Пер. с англ. под ред. Л.А. Островского и М.И. Рабиновича. М.: Сов. радио, 1977. 368 с.
3. *Леннингджер А.* Биохимия / Пер. с англ. М.: Мир, 1974. 483 с.
4. *Зайко Ю.Н.* Второе начало термодинамики и неоднородные системы: приложение к космологии и биофизике. // *Биомедицинские технологии и радиоэлектроника.* 2003. № 2. С.69–72.

5. *Румер Ю.Б., Рывкин М.Ш.* Термодинамика, статистическая физика и кинетика. М.: Наука, 1972. 400 с.
6. *Роу Дж.* Теория нелинейных явлений в приборах сверхвысоких частот / Пер. с англ. под ред. З.С. Чернова. М.: Сов. радио. 1969. 615 с.
7. *Шредингер Э.* Что такое жизнь. С точки зрения физики / Пер. с англ. под ред. А.А. Малиновского и Г.Г. Порошенко. М.: Атомиздат, 1972. 88 с.
8. *Николс Дж. Г. и др.* От нейрона к мозгу / Пер. с англ. под ред. П.М. Балабана и Р.А. Гиниатуллина. М.: УРСС, 2003. 671 с.

УДК 530.182:577.3

СЛОЖНЫЕ КОЛЕБАНИЯ И СИНХРОНИЗАЦИЯ В ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ МОДЕЛИ ВАСКУЛЯРНОГО ДЕРЕВА НЕФРОНОВ

П.А. Щербаков, О.В. Астахов, Д.Э. Постнов*

Саратовский государственный университет
E-mail: scherbakovpa@Gmail.com

Предложена математическая модель, на качественном уровне воспроизводящая колебательные процессы в системе авторегуляции почечного кровотока. Модель содержит ансамбль двумодовых осцилляторов, взаимодействующих посредством двух типов (каналов) связи, различающихся как геометрией (древовидная структура и локальное взаимодействие), так и характером воздействия на индивидуальный осциллятор (модуляция энергонесущего параметра и процесс диффузионного типа). Выявлены основные режимы функционирования такой системы и взаимопереходы между ними.

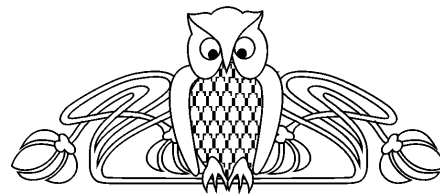
Ключевые слова: синхронизация, функциональная модель, васкулярное дерево, нефрон, гемодинамика, мультистабильность, кластер.

COMPLEX WAVEFORMS AND SYNCHRONIZATION IN FUNCTIONAL MODEL OF VASCULAR NEPHRON TREE

P.A. Scherbakov, O.V. Astakhov, D.E. Postnov

We suggest functional model that qualitatively describes oscillatory processes in renal autoregulation. Our model consists of ensemble of two-mode oscillators that are coupled by means of two different pathways. The above coupling pathways count both the geometry of ensemble (tree-like structure or local interaction) and the specific action of individual oscillator (energy distribution network or diffusive coupling). We study the typical operating regimes of suggested model as well as transitions between them.

Key words: synchronization, functional model, vascular tree, nefron, hemodynamics, multistability, cluster.



Введение

Исследование поведения взаимодействующих автоколебательных систем – одна из основных задач теории колебаний и нелинейной динамики, которая во многом сводится к выявлению и изучению разнообразных проявлений общего и фундаментального явления – синхронизации [1–3]. Диапазон приложений таких исследований весьма широк. Например, в радиофизике – это ансамбли связанных осцилляторов [4], в нейрофизиологии – коллективная динамика нейронов-пейсмекеров [5].

Замечательно, что при всем разнообразии проявлений механизмы синхронизации универсальны и могут поэтому изучаться на примере относительно небольшого числа модельных систем. При этом расширение круга изучаемых конкретных задач связано с:

- усложнением индивидуальной динамики взаимодействующих автоколебательных систем;
- изучением различных типов их взаимодействия;



- увеличением числа взаимодействующих осцилляторов;
- учетом способа их организации в ансамбль (геометрия связей).

По каждому из упомянутых направлений за последние десятилетия имеется значительный прогресс. Так, установлены основные закономерности синхронизации для хаотических [6, 7] и индуцированных шумом колебаний. Исследуются различные типы связи и соответствующие им характеристики синхронных режимов ансамблей осцилляторов [8–10]. Изучаются особенности кооперативной динамики осцилляторов при различных способах их организации в ансамбль [11, 12].

Вместе с тем бесконечное разнообразие окружающего мира предлагает все новые задачи со своей спецификой как свойствами самих взаимодействующих осцилляторов, так и характером их взаимодействия. Одна из таких задач возникла в результате исследований физиологами закономерностей авторегуляции почечного кровотока.

Почки, будучи одним из важнейших органов человека, предназначены для поддержания постоянства объема и состава внеклеточной жидкости, омывающей клетки организма, тем самым обеспечивая оптимальные условия их жизнедеятельности [13]. Они выводят из организма избыток воды и растворенных в ней веществ, а также выполняют различные метаболические функции. Почки человека содержат около миллиона *нефронов*, каждый из которых может считаться мельчайшей функциональной единицей почки [14, 15] и способен самостоятельно выполнять ее главную функцию: регулировать химический и ионный состав плазмы крови посредством ее фильтрации. Одним из важных достижений в области ренальной физиологии было открытие автоколебательной динамики в функционировании нефронов.

Авторегуляция почечного кровотока: основные механизмы и экспериментальные свидетельства автоколебательной динамики

Каждый нефрон (рис. 1, *a*) содержит так называемый клубочек, играющий роль фильтра, с кровеносными сосудами, приносящими и отводящими поток крови (аффе-

рентная и эфферентная артериолы). Фильтрат не удаляется из нефрона немедленно, а проходит процедуру регуляции химического состава в процессе продвижения по проксимальному извитому канальцу и так называемой петле Генле. Перед тем как перейти в дистальный каналец, петля Генле примыкает непосредственно к клубочку (*macula densa*). Здесь имеет место организованная природой обратная связь: в зависимости от химического состава фильтрата меняется тонус клеток гладкой мускулатуры, окружающих стенку афферентной артериолы, и ее диаметр изменяется: артериола сжимается при чрезмерно интенсивной фильтрации и расслабляется при ее недостаточной интенсивности. Такой механизм, наряду с заметным временем прохождения фильтратом петли Генле (порядка 13 с), создает предпосылки для автоколебательной динамики. И действительно в экспериментах на нефронах крысы *in vivo* P.P. Leysec и N.H. Holstein-Rathlow наблюдали автоколебания проксимального гидростатического давления с периодом 20–40 с [16, 17]. Была экспериментально доказана важная роль упомянутых выше факторов: канальцево-гломерулярной обратной связи (КГОС), наличия существенной задержки при продвижении фильтрата по петле Генле, а также миогенного отклика афферентной артериолы [18–20].

Колебания той же частоты, но с фазовым сдвигом, наблюдались и для концентрации ионов натрия и хлора в дистальном канальце нефрона. Согласно результатам измерений, высокая концентрация ионов хлора соответствует минимуму давления в канальце [21]. Спектральный анализ записи артериального давления и его сопоставление с колебательными свойствами отдельных нефронов подтверждают предположение о том, что наблюдаемая колебательная динамика является результатом внутренних свойств системы, а не привнесена извне. Была выявлена связь гипертонии с характеристиками колебаний в нефронах. В частности, было экспериментально зафиксировано наличие нерегулярных (хаотических) колебаний проксимального давления для крыс с повышенным артериальным давлением [22].

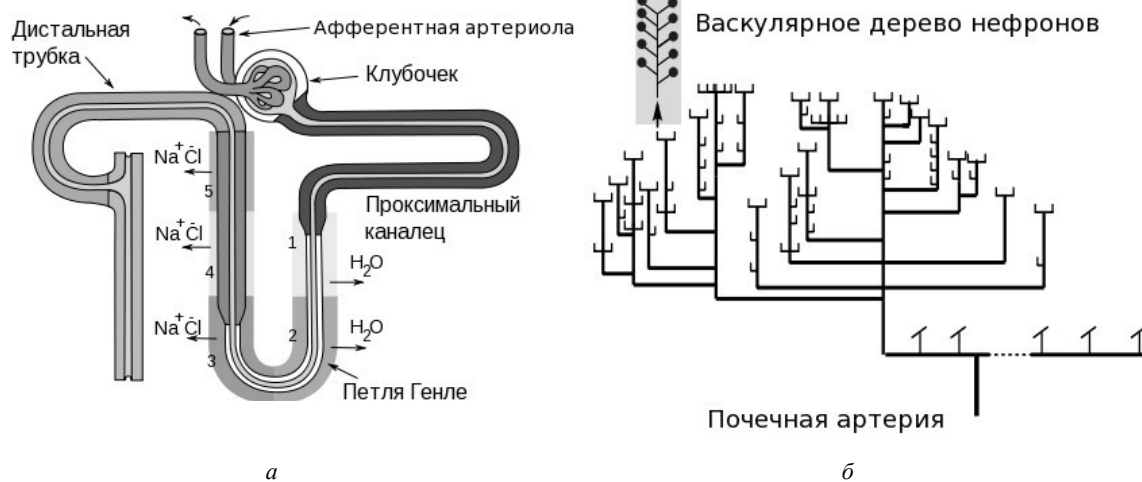


Рис. 1. Схематичное представление основных частей нефрона и путей их взаимодействия. В сегментах 1 и 2 удаляется вода, в сегментах 3–5 регулируется концентрация ионов натрия и хлора (а). Схематичное представление ветвления кровеносных сосудов почки от единственной почечной артерии (внизу) до васкулярного дерева из 10–20 нефронов (вверху) (б)

Почка как ансамбль осцилляторов: геометрия и характеристики связей

Задача снабжения кровью каждого из нефронов «решена» природой типичным для живых систем образом: единственная почечная артерия неоднократно ветвится на более мелкие сосуды, распределенные по мозговому веществу и коре почки, как это схематично изображено на рис. 1, б. В результате образуется 50–100 тысяч отростков артерий, каждый из которых (уже не ветвясь) снабжает кровью по 10–20 нефронов, соединенных с ним посредством афферентных артериол. Такую структуру ветвления сосудов называют *васкулярным деревом (vascular tree)*.

Для краткости описания далее под васкулярным деревом нефронов будет пониматься совокупность нефронов и общего кровеносного сосуда, к которому они присоединены. Следует заметить, что в таких деревьях около 50% нефронов расположены парами (имеют общую артериолу) и порядка 5% – триплетами.

Очевидно, что авторегуляция интенсивности кровотока на входе в отдельно взятый нефрон влияет на давление крови в ближайшей к нему точке ветвления. Таким образом, изменение состояния одного нефрона заставляет соседние нефроны реагировать на изменившиеся условия в процессе поддержания нужного режима фильтрации. Результатом

является «конкуренция» нефронов за поток крови: его рост на входе одного из нефронов приводит к уменьшению потока соседнего и наоборот.

Кроме того, электрические потенциалы, управляющие сечением артериолы на входе в нефрон (так регулируется поток втекающей крови), способны распространяться вдоль стенок сосуда и достигать артериол близкорасположенных нефронов, вмешиваясь в их работу [23, 24]. Такое взаимодействие приводит к обратному эффекту: уменьшение просвета афферентной артериолы нефрона индуцирует тот же (хотя и ослабленный) эффект для соседей.

Таким образом, неизбежность взаимодействия нефронов следует уже из анатомических особенностей строения почки. Подтверждается это и результатами экспериментов, а именно удается зафиксировать режимы синхронизации нефронов, принадлежащих к одному дереву [25]. При этом наблюдаются как синфазные, так и противофазные режимы колебаний.

Функциональный подход в моделировании

На данный момент известны количественные математические модели одиночных [26–29], а также парных нефронов [30, 31]. Эти модели неплохо воспроизводят такие характеристики, как частота колебаний, а



также уровень максимального и минимального давления в проксимальном канальце. Однако работ, связанных с количественным моделированием процессов в рамках васкулярного дерева нефронов, крайне мало [11, 24, 32, 33].

Во многом это связано со сложностями, возникающими при численном моделировании больших ансамблей количественных моделей нефронов в структуре типа васкулярного дерева. Такая математическая модель имеет сотни динамических переменных и десятки управляющих параметров, далеко не все из которых имеют адекватные экспериментальные оценки. В то же время представляет несомненный интерес исследование хотя бы общих свойств такого ансамбля нефронов, как нелинейная автоколебательная система и выявление типичных режимов ее функционирования в зависимости от соотношения управляющих параметров.

В свете всего вышеперечисленного привлекательным и адекватным является использование функциональных моделей, а именно как сами нефроны, так и способ их организации в ансамбль представляются упрощенными модельными уравнениями, воспроизводящими, однако, наиболее существенные свойства прототипа. В нашем случае такими свойствами можно считать:

1) наличие двух источников колебательной динамики в одиночном нефроне; при этом «медленная мода» связана с автоколебаниями вследствие наличия задержки в петле Генле и КГОС, тогда как быстрая мода отображает в 3–5 раз более быстрые колебания диаметра афферентной артериолы при регуляции сосудистого тонуса, которые носят затухающий характер;

2) характер зависимости автоколебаний в нефроне от артериального давления: при слишком низком или слишком высоком давлении в афферентной артериоле автоколебания не наблюдаются;

3) древовидная структура связи, которая в пределе упрощения может быть разложена на минимальные ансамбли 2 и 3 нефронов, подсоединенных к общему источнику (кровеносному сосуду), либо на группу, подсоединенную последовательно к общему «стволу» через некоторые промежуточные;

4) дуальный характер взаимодействия, обусловленный упомянутыми выше механизмами.

В нашей работе мы предлагаем имитационную модель нефрона, а также технологию численного моделирования, позволяющую воспроизвести различные варианты геометрии васкулярного дерева. Как показывают результаты вычислительного эксперимента, такая модель воспроизводит на качественном уровне динамику нефрона в части быстрой и медленной колебательных мод.

1. Имитационная модель нефрона в виде двумодового осциллятора

Наиболее простой вид функциональной модели нефрона был предложен в работе [34]. Эта модель представляет собой двумодовый осциллятор с соотношением частот медленной и быстрой моды от 1 : 1 до 1 : 6. Модель состоит из двух связанных осцилляторов: одного, демонстрирующего автоколебательную динамику (медленная подсистема), и второго – демпфированного (быстрая подсистема). Каждый из осцилляторов представлен системой из двух дифференциальных уравнений первого порядка.

В работе [34] выбор вида нелинейностей быстрой подсистемы основан на анализе уравнений количественной модели Барфреда одиночного нефрона [26], в то время как уравнения для медленной подсистемы записаны из самых общих соображений (наличие автоколебательной динамики) в виде осциллятора ван дер Поля [35]. Как известно, в этой классической модели теории колебаний отсутствует параметр, явно описывающий приток энергии в систему. Для нефрона роль такого энергонесущего параметра играет артериальное давление крови на входе в нефрон [32], и учет его в модели представляется принципиально важным.

Для целей нашего исследования была предложена модель в следующем виде:

$$\dot{x} = y, \quad (1)$$

$$y = P - y(R + N'(x)) - RN(x) - x + cv, \quad (2)$$

$$\dot{u} = v, \quad (3)$$

$$v = -Dv - u(1 + ve^u) + F(x, u); \quad (4)$$



где

$$N'(x) = x^2 - 10x + 20,$$

$$N(x) = x^3 / 3 - 5x^2 + 20x,$$

$$F(x, u) = A \tanh(k_u (u + d_u))(1 + \gamma u).$$

В качестве медленной подсистемы (1), (2) был использован осциллятор с нелинейностью N-типа из [36]. В гемодинамической интерпретации параметр R есть безразмерный аналог сопротивления входной артериолы, а P – аналог давления на входе артериолы. Выбранная модель медленной подсистемы относится к широко известному классу осцилляторов с нелинейностью N-типа, но отличается наличием параметра, эквивалентного напряжению питания в радиофизической интерпретации. Данная модель анализировалась в [33, 36]. В частности, было показано, что автоколебания возможны в ограниченной области значений E . Это хорошо согласуется с результатами по моделям нефронов, где для слишком низкого и слишком высокого кровяного давления автоколебаний не наблюдается.

В качестве быстрой подсистемы (3), (4) нашей модели был оставлен нелинейный, параметрически возбуждаемый демпфированный осциллятор, использованный в [36], с масштабными коэффициентами k_u и d_u для адаптации к выбранной медленной подсистеме. Связь двух подсистем осуществляется посредством нелинейной функции $F(x, u)$ в быстрой подсистеме и коэффициента c обратной связи в медленной подсистеме.

Типичный набор значений управляющих параметров включал: $R=0.15$, $c=13.2$, $\beta=0.0009$, $A=0.474$, $\gamma=11.09$, $D=0.1061$, $k_u=0.4$, $d_u=-5$.

На рис. 2 приведена однопараметрическая диаграмма, характеризующая наличие автоколебаний в модели (1)–(4) в зависимости от значения параметра P . Как можно видеть, они отсутствуют при значениях P менее 4.55 и больших, чем 9.3. Наличие быстрой подсистемы, обеспечивающей, по сути, обратную связь, приводит к эффекту гистерезиса: в области 4.55–6.41 режим автоколебаний и режим устойчивой точки сосуществуют.

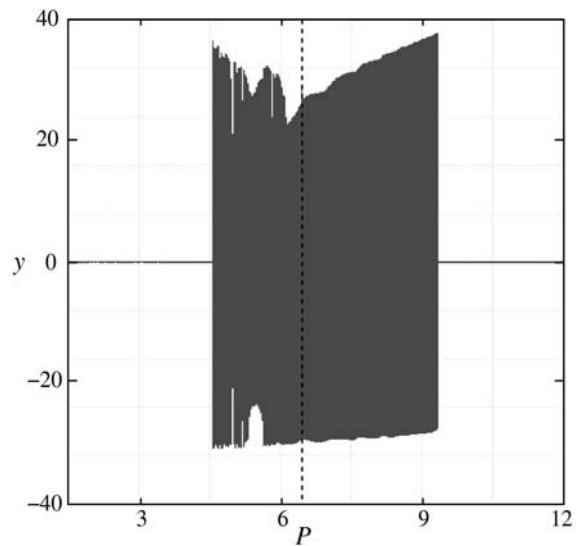


Рис. 2. Зависимость амплитуды колебаний модельной системы от параметра P . При значениях меньших 4.55 и больших 9.3 автоколебания в осцилляторе отсутствуют. В области значений параметра P между 6.41 (пунктирная линия) и 9.3 автоколебательный режим представляет единственный аттрактор системы, тогда как в области 4.55–6.41 режим автоколебаний и режим устойчивой точки сосуществуют

Помимо самого факта наличия автоколебательной динамики, главное свойство модели (1)–(4) – это наличие двух различных временных масштабов, один из которых определяется автоколебательной подсистемой (1)–(2), а второй – колебаниями в нелинейном осцилляторе (3)–(4). Несмотря на наличие в этой подсистеме постоянного затухания (параметр D), сложный характер воздействия со стороны медленной подсистемы, задаваемый $F(x, u)$, порождает разнообразные колебательные режимы. В [34] упоминается наличие квазипериодических режимов, а также детально обсуждается раздельная синхронизация двух пар базовых частот хаотических автоколебаний. Таким образом, модель (1)–(4) демонстрирует две моды колебаний на различных частотах, которые могут находиться как в рациональном соотношении (резонанс), так и быть рассинхронизованы.

Ранее в [31] был обнаружен эффект рассинхронизации быстрой и медленной мод хаотических колебаний в количественной модели нефрона, где каждое из характерных времен имеет ясную физиологическую интерпретацию (время прохождения фильтра-том петли Генле и квазипериод колебаний



диаметра афферентой артериолы). Нами была выявлена аналогичная перестройка хаотического автоколебательного режима модели (1)–(4). На рис. 3, *а* приведена характерная временная реализация колебаний по переменной y . Низкочастотная мода колебаний представлена последовательностью выбросов положительной и отрицательной полярности. Высокочастотная мода колебаний отражена заполнением интервалов между выбросами, причем форма этого заполнения (амплитуда и количество пиков) не повторяется от квазипериода к квазипериоду. Для количественной характеристики соотношения между частотами мод рассчитывалось число вращения r как среднее по реализации число колебаний

быстрой подсистемы на один период колебаний медленной подсистемы. График изменения r при вариации P представлен на рис. 3, *б*. Несмотря на то, что интервал значений P на графике соответствует хаотическому режиму, величины r выявляют две качественно различные ситуации, а именно при $P < 5.293$ число вращения изменяется с изменением P , отражая факт независимого изменения двух временных масштабов хаотических колебаний. При $P > 5.293$ число вращения r равно $1/6$ в пределах точности измерений: на каждый квазипериод низкочастотной моды приходится ровно 6 квазипериодов высокочастотной моды, в то время как колебательный режим в целом остается хаотическим.

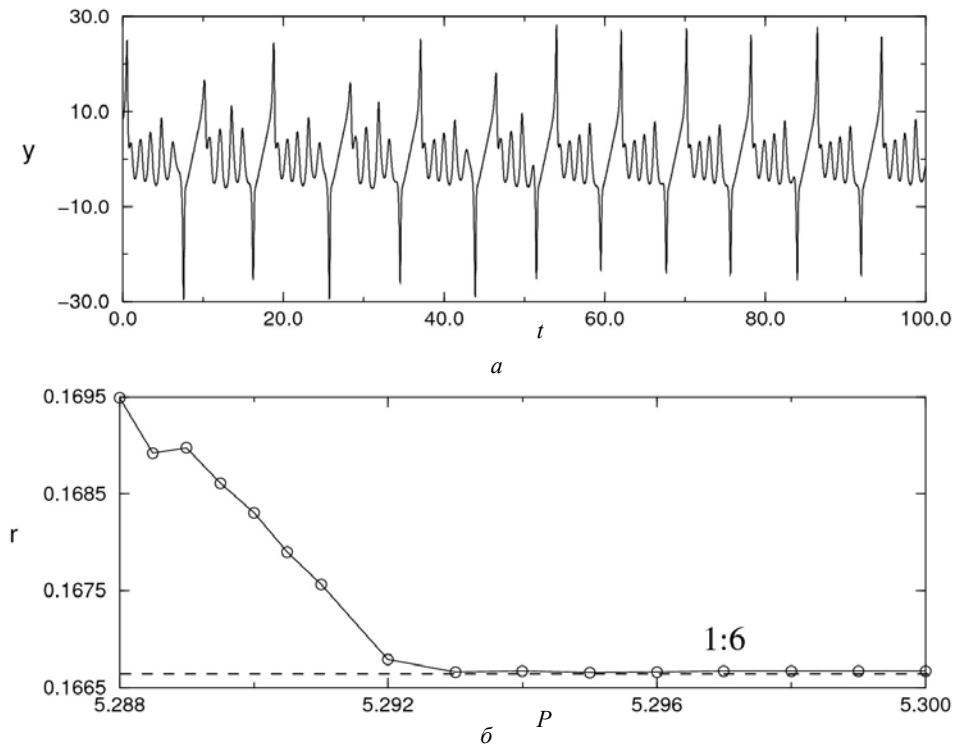


Рис. 3. Пример временной реализации для случая хаоса с рассинхронизованными модами $P = 5.288$ (*а*). Зависимость числа вращения r от параметра P . При значении параметра $P > 5.293$ наблюдается хаотический режим с синхронизованными модами, число вращения $r = 1/6$. При $P < 5.293$ моды хаотического режима рассинхронизованы, число вращения меняется при вариации P (*б*)

На рис. 4 такая перестройка хаотического режима охарактеризована более детально. Приведены фазовые проекции и спектры колебаний для двух значений P : $P = 5.3$ (левая колонка) и $P = 5.288$ (правая колонка). Различия в характеристиках очевидно: при сохранении общей структуры фазового портрета

рассинхронизация мод отображается наличием дополнительных петель траектории на панели (*з*), выбивающихся из «общего русла» шестиоборотной структуры на панели (*а*). Сравнение панелей (*б*) и (*д*) позволяет увидеть, что в окрестности утолщения пучка траекторий (левая нижняя четверть рисунка)



при рассинхронизации мод могут образовываться дополнительные петли, наличие которых и определяет мгновенное значение r . Диагностика с помощью усредненных спектров мощности по переменной x дает интересные результаты: спектр на панели (в) имеет все признаки двухчастотного колебатель-

ного режима (з), хорошо видны пики, соответствующие низкочастотной и высокочастотной моде колебаний, тогда как спектр на панели (б) более похож на типичный развитый спектр одномодового хаоса. При этом низкочастотный пик оказывается размытым и практически не наблюдается.

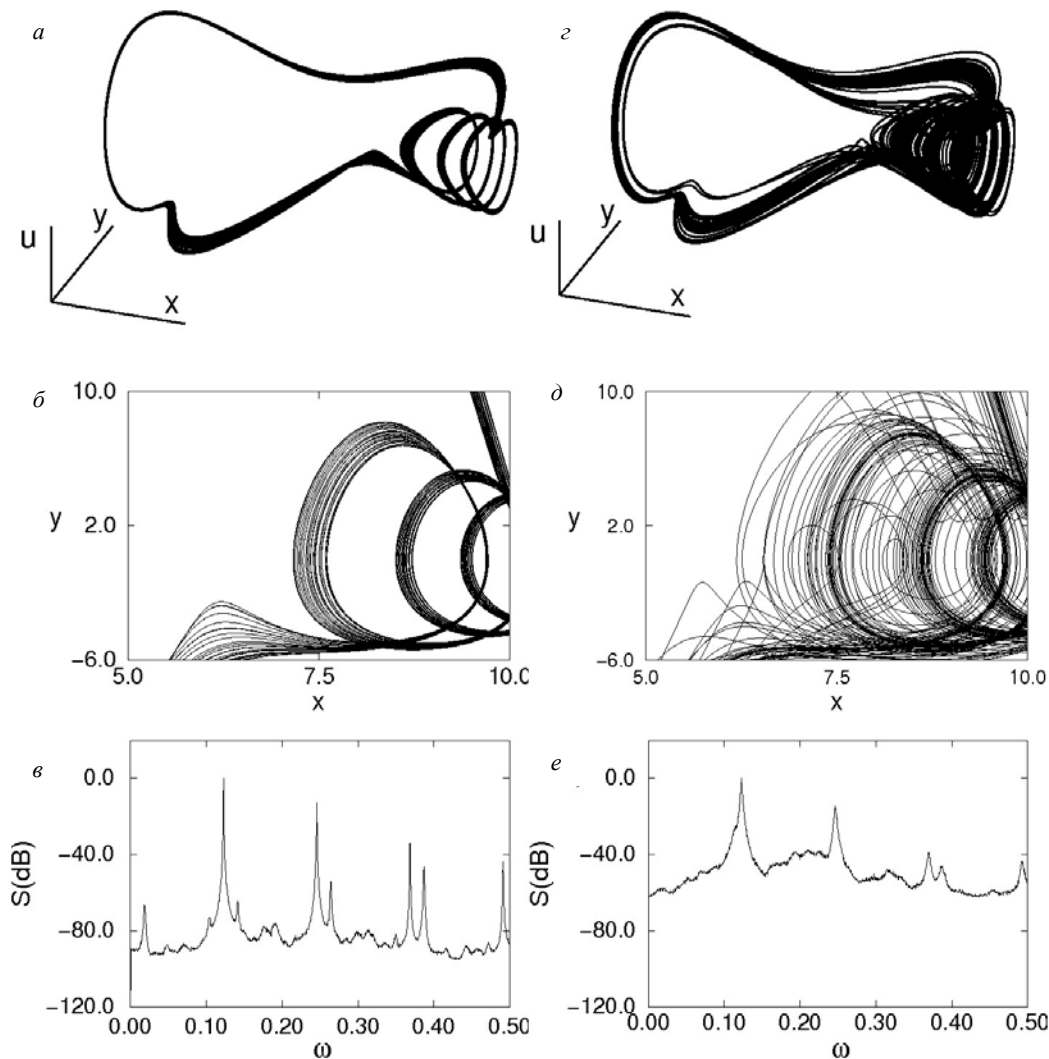


Рис. 4. Сравнение характеристик хаотического режима с синхронизованными (слева, $P = 5.3$) и рассинхронизованными (справа, $P = 5.288$) модами. Проекция фазового пространства на плоскость $x:y$ (a, z); то же в укрупненном масштабе (b, d); усредненные спектры мощности колебаний по переменной x (e, e)

Этот факт согласуется с поведением фазовых траекторий: различное количество мелкомасштабных петель траектории приводит к большой дисперсии времени в левую часть фазового портрета на панелях (a) и (z), что и размывает проявление соответствующего временного масштаба в спектре.

Таким образом, наблюдаемый эффект рассинхронизации мод хаотического режима не сводится ни к классическому случаю синхронизации двух частот «на фоне» хаотических автоколебаний, что было бы близко к активно изучавшимся в последние десятилетия механизмам синхронизации хаоса, ни к



типичной эволюции характеристик хаотического аттрактора по мере увеличения параметра надкритичности (этот вопрос обсуждался в [34]). Для целей нашего исследования важно, что поведение имитационной модели (1)–(4) воспроизводит характерные черты динамики количественных моделей нефронов и тем самым обосновывает ее применение для целей моделирования более крупных структур.

2. Моделирование структуры связей васкулярного дерева

Как уже упоминалось выше, взаимодействие нефронов в васкулярном дереве обусловлено как модуляцией давления в общем кровеносном сосуде (гемодинамическая связь), так и распространением электрического потенциала по стенкам артериол (миогенная связь). Для математической модели двух или трёх нефронов указанное взаимодействие нетрудно описать в явном виде путём соответствующей модификации уравнений. Однако для целей моделирования более крупных ансамблей нефронов и, особенно, с учетом их сложной геометрии более гибким и эффективным представляется описанный ниже метод, основанный на дискретном представлении неоднородной структуры среды [37]. А именно пространственная структура моделируемого ансамбля представлена в виде набора элементов с различными свойствами и различным характером локального взаимодействия с ближайшими соседями.

На практике такая матрица элементов задается в виде графического файла, цвет каждого пикселя которого кодирует свойства элемента. На рис. 5 каждой клетке соответствует своя система уравнений.

(0) – Пустая клетка. Правые части уравнений и сами переменные тождественно равны нулю, взаимодействие отсутствует.

(1) – Имитация большого кровеносного сосуда, давление P в котором постоянно и равно p :

$$p = P, \dot{p} = 0, \mu\dot{v} = \sum \frac{v_i - v}{R_d}.$$

Здесь уравнение для потенциала v на качественном уровне описывает пассивное распространение электрического сигнала по стен-

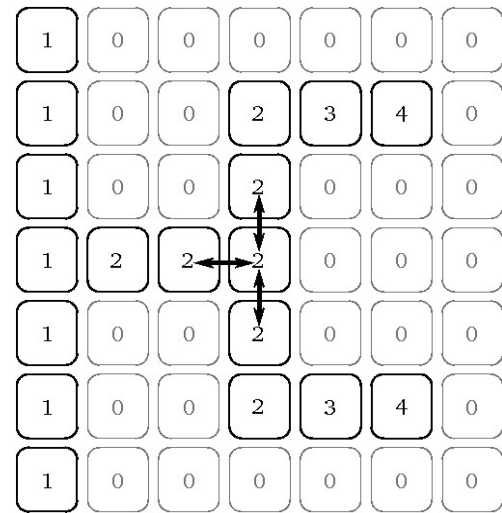


Рис. 5. Пример моделирования двух связанных двумодовых осцилляторов при помощи пиксельной матрицы

кам сосуда, R_d – погонное сопротивление, μ – параметр, пропорциональный погонной емкости. В случае соседства с элементами типов 0 или 3, для которых величина v не определена, принимается v_i . Индекс i в этом и последующих описаниях элементов принимает значения $i = 1, r, t, b$, которые указывают на элемент, расположенный слева, справа, сверху и снизу соответственно.

(2) – Имитация малого кровеносного сосуда с меняющимся давлением:

$$\xi\dot{p} = \sum \frac{P_i - P}{R_c}, \quad \mu\dot{v} = \sum \frac{v_i - v}{R_d},$$

где R_c – погонное гемодинамическое сопротивление, μ – параметр, пропорциональный эластичности сосуда.

(3) – Медленная подсистема (имитация КГОС-осциллятора нефрона). Значения p_i и v_i не равны нулю только в случае соседнего элемента типа 1, 2 или типа 4, соответственно.

$$\dot{x} = y,$$

$$\dot{y} = p_i - y(R + N'(x)) - RN(x) - x + cv_i.$$

(4) – Быстрая подсистема (имитация миогенного отклика артериолы нефрона):

$$\dot{u} = v,$$

$$\dot{v} = -Dv - u(1 + \beta e^u) + F(x, i, u) + \frac{v_i - v}{R_d}.$$



В отличие от предыдущих элементов, индекс при v_i указывает на элементы, соседние к смежному элементу типа 3.

В процессе компьютерного моделирования все элементы описанной выше матрицы перебирались при выполнении каждого шага численного интегрирования. При этом количество взаимодействующих двумодовых осцилляторов и геометрия их подключения к общему кровеносному сосуду задавались просто соответствующей закраской пикселей графического файла, что позволяло моделировать самые разнообразные случаи. Ниже описаны результаты, полученные для базовых (простейших) конфигураций, исследование которых необходимо для лучшего понимания нелинейных механизмов, определяющих динамику такой системы.

3. Синхронные колебательные режимы в случае простейших структур связи

В почке млекопитающих порядка 50% нефронов расположены парами (делят общий участок артериолы), а 5% – соединены в триплеты. По этой причине вопрос о динамике таких структур представляет очевидный интерес.

В рамках решаемой нами задачи имеются две особенности, определяющие специфику проявления синхронизации и отличия от хорошо исследованных случаев. Каждая из взаимодействующих автоколебательных систем имеет две моды колебаний, и связь осуществляется по двум каналам, по-разному воздействующим на осцилляторы. В рамках данного раздела проиллюстрируем те особенности, которые возникают при симметричном соединении двух осцилляторов. При их моделировании матрицей элементов (см. рис. 5) кровеносный сосуд от точки с постоянным значением параметра P до точки ветвления был представлен 8 элементами матрицы, участок от точки ветвления до осциллятора – тремя элементами и один элемент описывал точку ветвления.

При наличии только гемодинамической связи через переменную p (что задается условием $1/R_d = 0$) имеет место тенденция к противофазной синхронизации медленной моды колебаний.

Рассмотрим два связанных осциллятора при $R_c = 0.001$, $\xi = 40$. Как можно видеть на рис. 6, в этом случае устанавливается синхронный режим колебаний с разбегом фазы в половину периода. Подобные результаты были получены в [36] для связанных по питанию одномодовых осцилляторов. В нашем случае к колебаниям медленной моды «привязаны» колебания быстрой моды, хорошо различимые на рисунке. Их наличие и определяет сложную геометрию фазовой проекции.

Следует отметить, что сдвиг фаз колебаний быстрой моды (его легко диагностировать по фазовому портрету, см. рис. 6, б) не постоянен в пределах общего периода. Это подтверждает тот факт, что синхронизация осуществляется в результате взаимодействия осцилляторов по медленной моде.

В условиях только миогенной связи посредством переменной v , а также смешанной связи по обоим каналам наблюдается гораздо более сложная картина. В зависимости от выбора величин R_d и R_c наблюдается различное количество сосуществующих синхронных режимов колебаний, различающихся сдвигом фаз – имеет место фазовая мультистабильность. На рис. 7 приведены временные реализации и фазовые проекции для трех таких режимов. Как можно видеть, сдвиг фаз $\Delta\phi$ по общему периоду колебаний (то есть по периоду медленной моды) не соответствует ни синфазной, ни противофазной синхронизации и составляет 0.4π , 0.54π , 0.7π . Однако на графиках временных реализаций переменных хорошо видно, что во всех случаях имеется несколько (точнее, 4, 3 и 2) квазипериодов колебаний быстрой моды, минимумы которых совпадают для обоих переменных. Данное наблюдение позволяет диагностировать механизм образования множественных синхронных режимов, опираясь на работы по механизму фазовой мультистабильности [38, 39, 40].

Как уже упоминалось, миогенная связь носит диффузионный (выравнивающий характер), чем обусловлена тенденция к синфазной синхронизации по переменной v , то есть по колебаниям быстрой моды. Однако одному и тому же сдвигу фаз колебаний

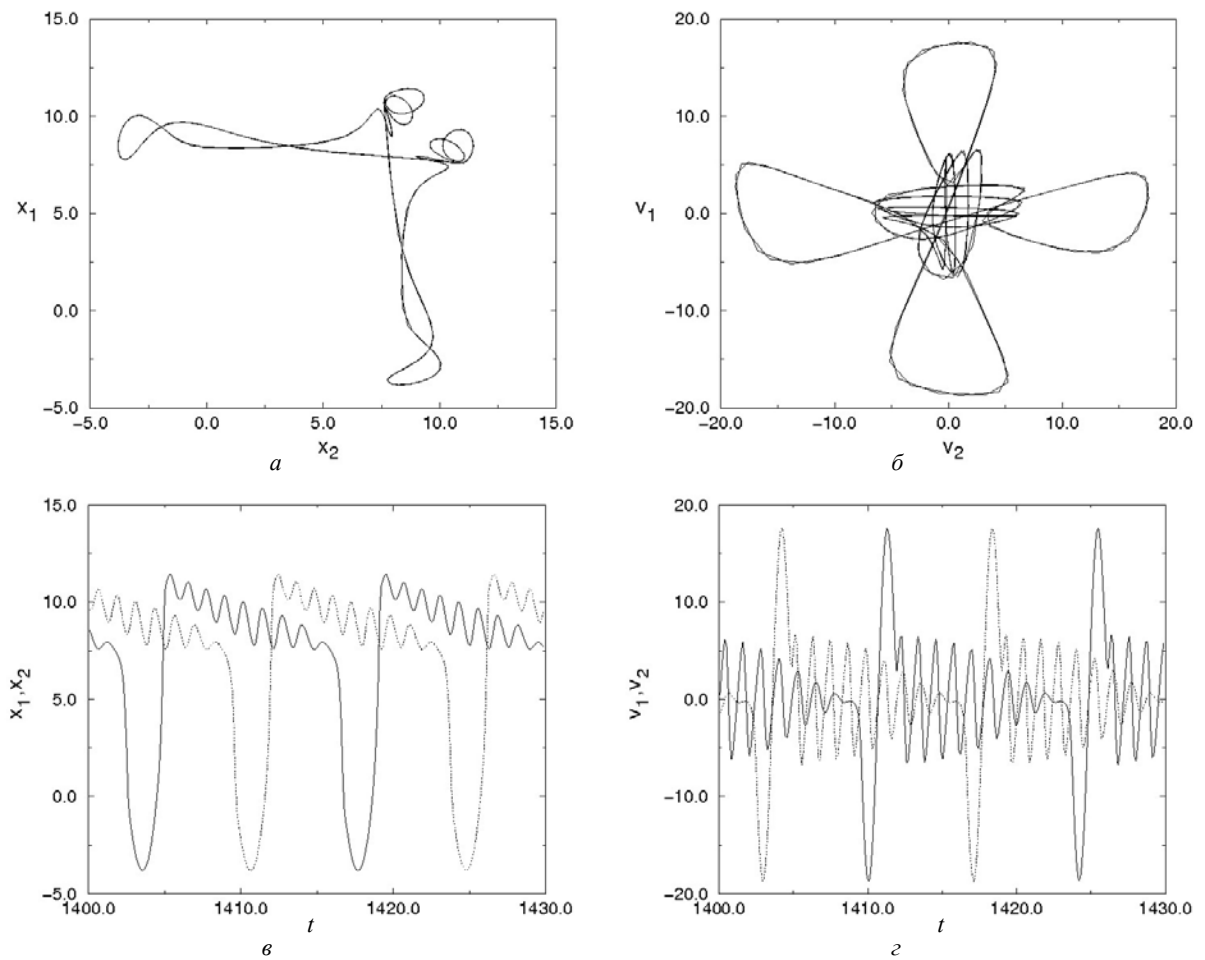


Рис. 6. Противофазная синхронизация двух связанных двумодовых осцилляторов при $P = 8.6$, $R_c = 0.001$, $1/R_d = 0$:
 а – проекция фазового пространства на плоскость $x_1 : x_2$; б – проекция фазового пространства на плоскость $v_1 : v_2$;
 в – временные реализации $x_1 : x_2$; г – временные реализации $v_1 : v_2$

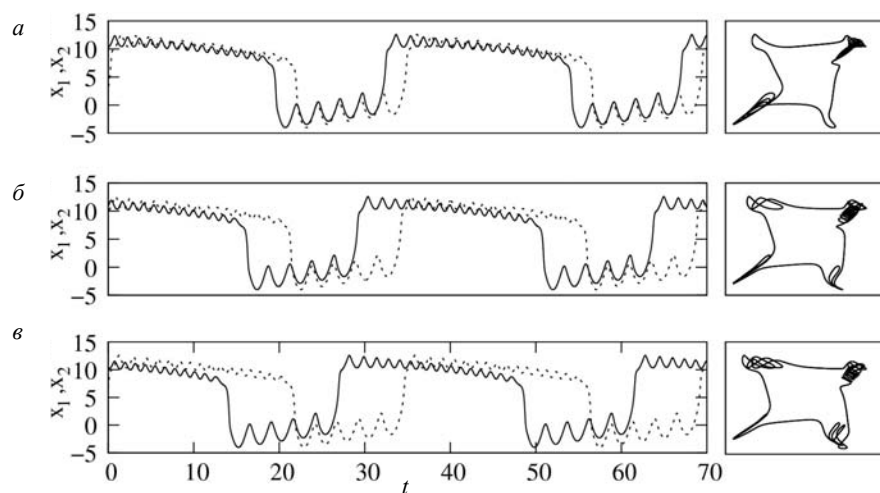


Рис. 7. Временные реализации (слева) и фазовые проекции (справа) трех сосуществующих синхронных режимов при $P = 6.0$, $R_d = 16.5$, $\mu = 1$, $R_c = 0.01$, $\xi = 40$. Сдвиг фаз колебаний составляет: а – $\Delta\varphi = 0.4\pi$, б – $\Delta\varphi = 0.54\pi$, в – $\Delta\varphi = 0.7\pi$. Непрерывная и пунктирная линии соответствуют переменным x_1 и x_2 . Фазовые проекции справа даны по переменным $x_1 : x_2$ в пределах $[-5; 15]$ по обоим направлениям



быстрой моды соответствует несколько вариантов сдвига фаз медленной моды колебаний. При подходящих значениях параметра связи сразу несколько вариантов синхронных режимов, синфазных по быстрой моде колебаний, но отличающихся сдвигом фаз медленной моды могут быть одновременно устойчивы. Данный эффект был продемонстрирован для двумодовых колебаний в [38], его особенности при одновременной связи по нескольким переменным обсуждались в [39]. В [40] результаты были обобщены как «субгармонический механизм фазовой мультистабильности». В отличие от упомянутых выше работ, в нашем случае колебания быстрой моды не непрерывны в пределах общего периода: как можно видеть на рис. 7, амплитуда и частота быстрой моды значительно отличаются для положительной и отрицательной полуволны медленной моды колебаний. С одной стороны, это делает невозможным синхронизацию на определенных сдвигах фаз, а с другой – потенциально способствует формированию дополнительных синхронных режимов. Полная картина фазовой мультистабильности в исследуемом случае весьма сложна. В частности, на рисунке приведены не все обнаруженные при данных параметрах синхронные режимы. Однако механизм их формирования представляется вполне ясным и соответствует описанному выше.

Увеличение силы взаимодействия по каналу гемодинамической связи (рост параметра R_c) усиливает тенденцию к синхронизации в противофазе и, таким образом, ослабляет устойчивость в первую очередь тех режимов, которые характеризуются наименьшим сдвигом фаз (см. рис. 7, а), тогда как режимы, более близкие к противофазному (см. рис. 7, в), могут становиться более устойчивыми.

Итак, динамика двух симметрично связанных двумодовых осцилляторов характеризуется значительным разнообразием синхронных режимов: чисто гемодинамической связи соответствует противофазная синхронизация по медленной моде колебаний, а значит и в целом. Чисто миогенной связи соответствует синхронизация в фазе по бы-

строй моде колебаний, но наличие медленной моды порождает несколько сдвигов фазы колебаний в целом, отвечающих данному условию. В результате одновременное действие двух каналов связи приводит к наличию набора синхронных режимов с различным сдвигом фаз в зависимости от силы взаимодействия по каждому из каналов. Полная картина, включающая все реализующиеся синхронные режимы и области их устойчивости на плоскости управляющих параметров, представляется весьма сложной и требует отдельного исследования.

4. Кластерная генерация и индуцированный связью сдвиг частоты колебаний

Структура разветвленного васкулярного дерева нефронов, на функциональное моделирование которой нацелена наша модель, может быть разложена на подансамбли с более упорядоченной геометрией связи. В предыдущем разделе анализировался простейший случай, когда осцилляторы ансамбля равноудалены от точки с постоянной величиной P . Другой важной ситуации соответствует распределение нефронов вдоль «ствола» дерева и описывается моделью, в которой ряд нефронов (в нашей модели – двумодовых осцилляторов) последовательно присоединен к общему кровеносному сосуду, давление в котором падает по мере удаления от «основания» (точки с постоянным P). Такой ансамбль имеет структуру, схематически показанную на рис. 8 и рассматривался в работах [32–34, 36].

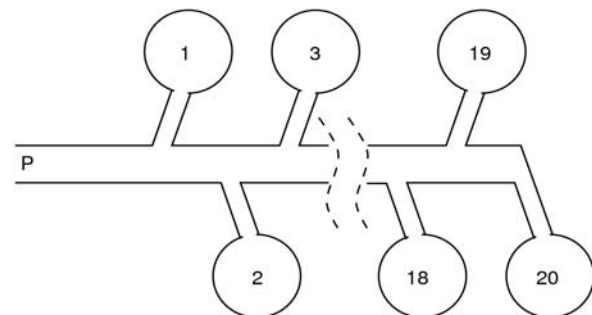


Рис. 8. Структура связи типа «цепь». Цифрами отмечены номера осцилляторов. В пиксельном шаблоне расстояние от большого кровеносного сосуда до первой точки ветвления малого кровеносного сосуда составляет 4 пикселя, между точками ветвления малого кровеносного сосуда – один пиксель плюс один на точку ветвления, длина артериолы каждого элемента составляет 3 пикселя



В частности, был обнаружен эффект так называемой кластерной генерации, когда в силу особенностей связи в автоколебательном режиме оказываются не все элементы цепочки, а лишь их группа (кластер). Этот эффект является следствием двух факторов. Во-первых, область существования автоколебательного режима для отдельно взятого осциллятора ограничена по величине p : при слишком малых и слишком больших его значениях автоколебаний нет. Во-вторых, средняя величина p будет уменьшаться по мере удаления от начальной точки с постоянным P . Таким образом, положение рабочей точки осцилляторов будет меняться при движении вдоль цепи, и вполне вероятна ситуация, когда лишь часть из них генерирует колебания,

тогда как остальные находятся в передемпфированном режиме.

На рис. 9 приведены временные реализации по переменной x для 10-ти осцилляторов цепочки при одном (а) и при двух (б) каналах связи. Как можно видеть, в режиме автоколебаний находятся осцилляторы с четвертого по девятый в колонке (а) и со второго по восьмой – в колонке (б). Для осцилляторов, находящихся ближе к началу цепочки, получаемое ими значение p избыточно, в то время как для осцилляторов, находящихся ближе к концу цепочки, – оно недостаточно для возбуждения автоколебаний. На рисунке можно также различить колебания малой амплитуды в осцилляторах, находящихся вне осцилляторного кластера.

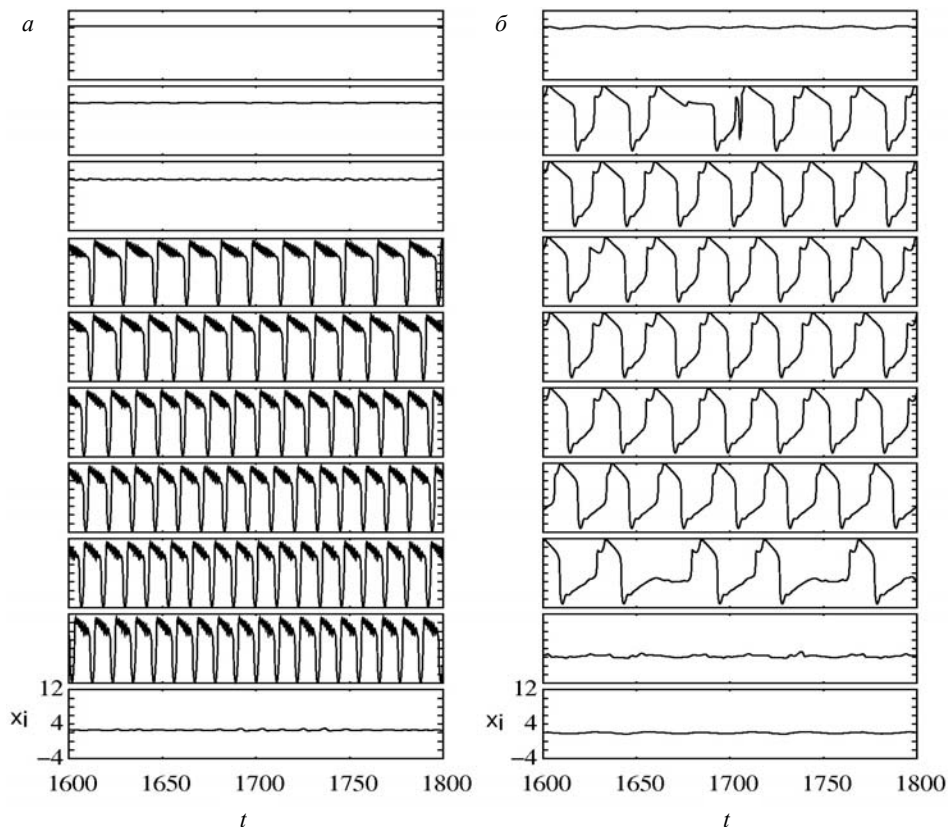


Рис. 9. Временные реализации для группы из 10-ти осцилляторов цепочки: с 3 по 12 элемент: а – случай одного канала связи $P = 13.0$, $R_c = 0.001$, $\xi = 40$, $1/R_d = 0$, $\mu = 1$; в режиме автоколебаний находятся только шесть осцилляторов, колебания во всех шести осцилляторах не синхронизованы, хорошо выражена быстрая мода колебаний; б – случай двух каналов связи, $P = 13.0$, $R_c = 0.001$, $\xi = 40$, $R_d = 0.25$, $\mu = 1$. В режиме автоколебаний находятся шесть осцилляторов, однако за счет модуляции питания в центральной ветви цепочки наблюдаются колебания небольшой амплитуды в десятом осцилляторе; четыре осциллятора совершают синхронные колебания в фазе; хорошо выражена тенденция к синфазному режиму в остальных осцилляторах кластера



Они обусловлены модуляцией текущей величины p теми из осцилляторов, которые находятся в режиме автоколебаний. В случае только гемодинамической связи частоты колебаний в осцилляторах, составляющих кластер, заметно разнятся, что хорошо видно на рис. 9, *a*. Включение второго канала связи приводит к понижению частоты автоколебаний осцилляторов, составляющих кластер, примерно в два раза. Кроме того, на рис. 9, *b* наблюдается хорошо выраженная тенденция

к синфазной динамике. Эти особенности могут быть объяснены следующим образом: синфазные колебания в соседних осцилляторах кластера приводят к более глубокой модуляции величины p . Чрезмерное уменьшение (равно как и увеличение) p смещает каждый из осцилляторов в режим, близкий к границе области генерации. Согласно [36], это приводит к существенному росту периода колебаний.

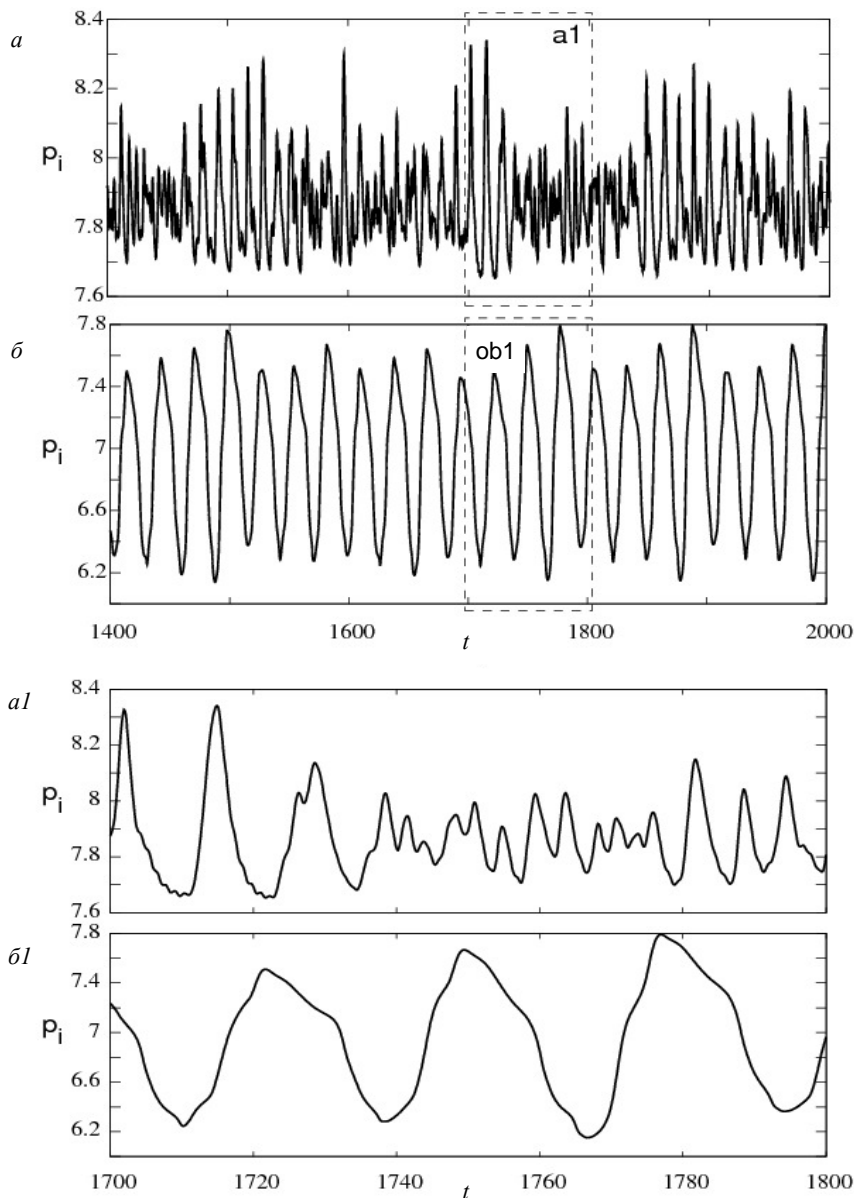


Рис. 10. Временные реализации колебаний величины p в главной ветви цепочки в середине осцилляторного кластера: *a* – случай только гемодинамической связи при $P = 13$, $R_c = 0.001$, $\xi = 40$, $1/R_d = 0$, $\mu = 1$; *b* – случай двух каналов связи при $P = 13$, $R_c = 0.001$, $\xi = 40$, $R_d = 0.25$, $\mu = 1$; *a1*, *b1* – фрагменты временных реализаций, выделенные пунктиром на верхних панелях



Дополнительную информацию о поведении системы дает рис. 10, где приведены графики изменения p в центральной ветви цепочки. Как можно видеть, в случае чисто гемодинамической связи (панели a и $a1$) колебания p носят нерегулярный характер, что объясняется наложением колебаний с различными частотами. Кроме того, заметны слабые модуляции с частотой колебаний быстрой подсистемы. При добавлении миогенной связи (панели b – $b1$) модуляция в центральной ветви цепочки становится более регулярной и глубокой, что увеличивает амплитуду вынужденных колебаний в осцилляторах, граничащих с кластером. Среднее значение p может быть оценено как 7.85 для случая a и 6.9 для случая b . Это говорит о том, что синфазный режим колебаний в данном случае энергетически менее выгоден, чем противофазный режим или режим со сдвигом фазы. В терминах исходной задачи о динамике ансамблей нефронов это означает, что при наличии заметной миогенной связи кровяное давление быстрее спадает по мере удаления от крупных сосудов, что уменьшает предельно достижимую скорость фильтрации. За счет описанных эффектов наблюдается сдвиг осцилляторного кластера в сторону начала цепи при введении второго канала связи.

Выводы

В данной работе нами была предложена модель двумодового осциллятора, на качественном уровне воспроизводящая особенности колебаний в модели одиночного нефрона. Как было показано, такая модель демонстрирует режимы с различным соотношением частот быстрых и медленных колебаний, а также позволяет наблюдать перестройку хаотического колебательного режима, связанного с рассинхронизацией мод, которая ранее была обнаружена в динамике количественной модели нефрона.

Для построения функциональной модели васкулярного дерева нефронов был предложен способ задания структуры связей в ансамбле двумодовых осцилляторов путем их дискретного представления посредством пиксельной матрицы.

При исследовании динамики двух симметрично связанных двумодовых осцилляторов было обнаружено, что миогенная связь приводит к формированию набора сосуществующих синхронных режимов колебаний, что обусловлено тенденцией к синхронизации в фазе на быстрой моде колебаний. Увеличение относительного вклада гемодинамической связи делает неустойчивыми синхронные режимы с наименьшей величиной сдвига фаз и, в пределах только гемодинамической связи, приводит к противофазной синхронизации на медленной моде колебаний.

Для ансамбля двумодовых осцилляторов в виде цепочки был продемонстрирован эффект кластерной генерации, что согласуется с известными результатами для ансамблей одномодовых осцилляторов [33, 36]. Новым в данной работе является учет влияния миогенной связи. Как установлено, ее действие приводит к синхронизации в фазе элементов кластера, что усиливает модуляцию переменной p , которая по смыслу соответствует давлению крови в «стволе» васкулярного дерева нефронов. Эта модуляция, в свою очередь, существенно понижает частоту генерации элементов кластера и приводит к сдвигу его в сторону «основания» дерева с постоянным $p = P$.

Обнаруженные нами различия в характере изменения p (см. рис. 10) интересным образом коррелируют с некоторыми работами физиологов по моделированию почечного кровотока. При обсуждении механизмов его авторегуляции некоторыми физиологами (D.J. Marsh, США) высказывалось предположение, что хаотизация колебаний в нефроне вызвана, скорее, их взаимодействием в пределах васкулярного дерева, нежели особенностями индивидуальной динамики. Заметим, что в эксперименте измерения проводятся на нефронах в составе васкулярного дерева (а не изолированных). По этой причине физиологические исследования пока не могут подтвердить либо опровергнуть данную гипотезу. Наши результаты показывают, что при слабой миогенной связи колебания имеют весьма сложную форму, что вызвано различием в режиме элементов осцилляторного кластера.



В целом результаты данной работы позволяют продвинуться в двух направлениях: первое – это построение функциональных моделей больших ансамблей нефронов, что является все более актуальным по мере появления экспериментальных данных по пространственным кластерам синхронной активности нефронов, а второе направление – это исследование роли пространственной асимметрии в динамике относительно небольших (10–20 нефронов) ансамблей, что облегчается применением описанной в данной работе методики задания геометрии связей при помощи пиксельной матрицы.

Авторы благодарят коллег О. Sosnovtseva, E. Mosekilde (Denmark Technical University), а также А.Н. Павлова (Саратовский госуниверситет) за полезные дискуссии в ходе выполнения работы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант №090201049).

Список литературы

1. Landa P.S., Rosenblum M.G. Synchronization and chaoticization of oscillations in coupled self-oscillating systems // Appl. Mech. Rev. 1993. Vol.46. P.414-426.
2. Pikovsky A., Rosenblum M., Kurths J. Synchronization: A Universal Concept in Nonlinear Sciences. Cambridge University Press, 2001. 411 p.
3. Balanov A., Janson N., Postnov D., Sosnovtseva O. Synchronization From Simple to Complex. Springer, 2009. 406 p.
4. Hadley P., Beasley M.R., Wiesenfeld K. Phase locking of Josephson junction series arrays // Phys. Rev. B. 1988. Vol.38. P.8712.
5. Абарбанель Г.Д.И., Рабинович М.И., Сильверстон А., Баженов М.В., Хуэрта Р., Суэчик М.М., Рубчинский Л.Л. Синхронизация в нейронных ансамблях // УФН. 1999. Т.166, №4. С.365–390.
6. Анищенко В.С., Астахов В.В., Вадивасова Т.Е., Нейман А.Б., Стрелкова Г.И., Шиманский-Гайер Л. Нелинейные эффекты в хаотических и стохастических системах. Ижевск, 2003. 530 с.
7. Mosekilde E., Maistrenko Y., Postnov D. Chaotic synchronization. Application to living systems. World Scientific, 2002. 440 p.
8. Meda P., Atwater I., Goncalves A., Bangham A., Orci L., Rojas E. The topography of electrical synchrony among -cells in the mouse islet of Langerhans // Q. J. Exp. Psychol. 1984. Vol.69. P.719–735.
9. Kiss I.Z., Zhai Y., Hudson J.L. Emerging coherence in a population of chemical oscillators // Science. 2002. Vol.296. P.1676.
10. Danø S., Hynne F., Monte S.de, Ovidio F. d', Sorensen P.G., Westerhoff H. Synchronization of glycolytic oscillations in a yeast cell population // Faraday Discuss. 2002. Vol.120. P.261–275.
11. Postnov D.E., Sosnovtseva O.V., Mosekilde E. Oscillator clustering in a resource consumption chain // CHAOS. 2005. Vol.15. P.1–12.
12. Osipov G.V., Ivanchenko M. V., Kurths J., Hu B. Synchronized chaotic intermittent and spiking behavior in coupled map chains // Phys. Rev. E. 2005. Vol.71. P.056209.
13. West J.B. Best and Taylors Physiological Basis of Medical Practice. 12th ed. Baltimore: Williams and Wilkins, 1991.
14. Netter F.H. The CIBA collection of medical illustration // Summit: CIBA; Kidneys, Ureters and Urinary Bladder, 1973. Vol.6.
15. Despopoulos A., Silbernagel S. Color atlas of physiology. Stuttgart: Georg Thieme Verlag, 1991.
16. Holstein-Rathlou N.-H., Leyssac P.P. TGF-mediated oscillations in the proximal intratubular pressure: Differences between spontaneously hypertensive rats and Wistar-Kyoto rats // Acta Physiol. Scand. 1986. Vol.126. P.333–339.
17. Leyssac P.P., Holstein-Rathlou N.-H. Effects of various transport inhibitors on oscillating TGF pressure response in the rat // Pflugers Arch. 1986. Vol.407. P.285.
18. Holstein-Rathlou N.-H., Wagner A.W., Marsh D.J. Tubuloglomerular feedback dynamics and renal blood flow autoregulation in rats // Amer. J. Physiol. 1991. Vol.260. P.F53.
19. Chou K.H., Yu-Ming Ch., Mardarelis V.Z., Marsh D.J., Holstein-Rathlou N.-H. Detection of interaction between myogenic and TGF mechanisms using nonlinear analysis // Amer. J. Physiol. 1994. Vol.267. P.F160.
20. Feldberg R., Colding-Jorgensen M., Holstein-Rathlou N.-H. Analysis of interaction between TGF and the myogenic response in renal blood flow autoregulation // Amer. J. Physiol. 1995. Vol.269. P.F581.
21. Holstein-Rathlou N.-H., Marsh D.J. Oscillations of tubular pressure, flow and distal chloride concentration in rats // Amer. J. Physiol. 1989. Vol.256. P.1007–1014.
22. Yip K.-P., Holstein-Rathlou N.-H., Marsh D.J. Chaos in blood flow control in genetic and renovascular hypertensive rats // Amer. J. Physiol. 1991. Vol.261. P.400–408.
23. Moore L.C., Rich A., Casellas D. Ascending myogenic autoregulation: interactions between tubuloglomerular feedback and myogenic mechanisms // Bull. Math. Biol. 1994. Vol.56. P.391–410.
24. Oien A.H., Aukland K. A multinephron model of renal blood flow autoregulation by tubuloglomerular feedback and myogenic response // Acta. Physiol. Scand. 1991. Vol.143. P.71–92.
25. Holstein-Rathlou N.-H. Synchronization of proximal intratubular pressure oscillations: evidence for interaction between nephrons // Pflugers. Arch. 1988. Vol.408. P.438–443.
26. Barfred M., Mosekilde E., Holstein-Rathlou N.-H. Bifurcation analysis of nephron pressure and flow regulation // Chaos. 1996. Vol.6. P.280–287.
27. Marsh D.J., Sosnovtseva O.V., Chou K.H., Holstein-Rathlou N.-H. Nonlinear interactions in renal blood flow regulation // Amer. J. Physiol. 2005. Vol.288. P.R1143–R1159.
28. Jensen K.S., Mosekilde E., Holstein-Rathlou N.-H. Self-sustained oscillations and chaotic behavior in kidney pressure regulation // Mondes Develop. 1986. Vol.55. P.91–109.



29. Holstein-Rathlou N.-H., Marsh D.J. A dynamic model of the tubuloglomerular feedback mechanism // Amer. J. Physiol. 1990. Vol.258. P.F1448–F1459.
30. Chen Yu-Ming, Kay-Pong Yip, Marsh D.J., Holstein-Rathlou N.-H. Magnitude of TGF-initiated nephron-nephron interactions is increased in SHR // Amer. J. Physiol. 1995. Vol.269. P.F198–F204.
31. Postnov D.E., Sosnovtseva O.V., Mosekilde E., Holstein-Rathlou N.-H. Cooperative phase dynamics in coupled nephrons // Intern. J. Mod. Phys. B. 2001. Vol.15. P.3079–3098.
32. Постнов Д., Шишкин А., Щербаков П. Нелинейные эффекты в ансамблях осцилляторов со связью через распределение ресурса. Ч. I. Динамические режимы авторегуляции кровотока в васкулярном дереве нефронов // Изв. вузов. ПНД. 2007. Т.15, №5. С.3–22.
33. Постнов Д., Шишкин А., Щербаков П. Нелинейные эффекты в ансамблях осцилляторов со связью через распределение ресурса. Ч. II. Колебательные режимы одномерного массива связанных через общий источник питания осцилляторов // Изв. вузов. ПНД. 2007. Т.15, №5. С.23–35.
34. Postnov D.E., Shishkin A.V., Sosnovtseva O.V., Mosekilde E. Two-mode chaos and synchronization properties // PRE. 2005. Vol.72. P.056208.
35. Van-der-Pol B. Forced oscillations in a circuit with nonlinear resistance // Phil. Mag. 1927. Vol.3. P. 64–80.
36. Postnov D.E., Sosnovtseva O.V., Scherbakov P.A., Mosekilde E. Multimode dynamics in a network with resource mediated coupling // CHAOS. 2008. Vol. 18. P. 015114.
37. Постнов Д.Э., Жирин Р.А. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ №2007614145. 2007.
38. Sosnovtseva O.V., Postnov D.E., Nekrasov A.M., Mosekilde E., Holstein-Rathlou N.-H. Phase multistability of self-modulated oscillations // Phys. Rev. E. 2002. Vol.66. P.0362.
39. Постнов Д.Э., Некрасов А.М. Механизмы фазовой мультистабильности при синхронизации 3D осцилляторов // Изв. вузов. ПНД. 2005. Т.13, №1–2. С.47–62.
40. Некрасов А.М. Фазовая мультистабильность в диффузионно связанных нелинейных осцилляторах: Дис. ... канд. физ.-мат. наук. Саратов, 2007. 160 с.

УДК 539.196.3

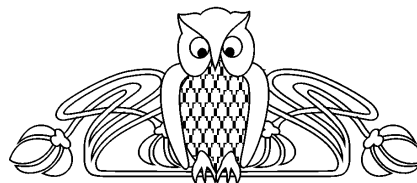
МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ КИСЛОРОДОСОДЕРЖАЩИХ СОЕДИНЕНИЙ. 1. СПИРТЫ

П.М. Элькин, Т.А. Шальнова*, О.Н. Гречухина*

Саратовский государственный технический университет

E-mail: pashaelkin@yandex.ru

* Астраханский государственный университет



На примере молекулы метанола описывается методика учета ангармонических резонансов при построении структурно-динамических моделей кислородосодержащих соединений.

Ключевые слова: колебательные спектры, структурно-динамические модели, ангармонические резонансы, метод DFT, метанол.

MODELING OF STRUCTURE AND VIBRATION SPECTRA FOR OXYGEN SUBSTITUTED COMPOUNDS. 1. SPIRITS

P.M. Elkin, T.A. Shalnova, O.N. Grechuhina

The article describes the methods of accounting of anharmonic resonances in structural dynamic models oxygen substituted compounds on the example of methanol.

Keywords: vibration spectra, anharmonic resonances, structural dynamic model, DFT method, methanol.

Введение

Построение структурно-динамических моделей сложных молекулярных соединений, связанное с анализом их адиабатических потенциалов, – одна из основных задач молекулярного моделирования.

Существуют две методики решения таких задач. Первая основана на решении обратных колебательных задач [1], вторая использует неэмпирические квантовые методы оценки геометрической и электронной структуры молекул [2].

Достоверность полученных результатов подтверждается согласием с имеющимися экспериментальными данными по колебательным спектрам и физической непрото-



речивостью рассчитанных параметров адиабатического потенциала, одним из критериев которого является сравнимость системы силовых постоянных для родственных по электронной структуре молекулярных фрагментов. Этот факт служит обоснованием правомерности схемы переноса системы силовых постоянных из простых соединений в сложные. На нем основана известная методика фрагментарного расчета колебательных спектров сложных молекулярных соединений [3]. Недостатки этой методики, как и всего подхода, основанного на решении обратных колебательных задач, подробно описаны в [4].

Использование неэмпирических квантовых расчетов для анализа параметров адиабатического потенциала наталкивается на проблему выбора метода и базиса расчета [5]. Большинство исследователей отдает предпочтение методам функционала плотности (DFT-методам) [6]. В выборе базиса ситуация иная. Основным критерием здесь служит хорошее совпадение результатов расчета фундаментальных колебательных состояний с экспериментом. Базис подбирается на основании численного эксперимента для простых молекул, а затем используется в предсказательных расчетах сложных соединений, включающих указанные выше молекулярные фрагменты.

Для кислородосодержащих соединений ситуация иная. Для ряда простых молекул до настоящего времени нет устоявшейся интерпретации фундаментальных состояний [1]. Имеет место смещение полос при проведении эксперимента для различных фазовых состояний. Кислородосодержащие соединения легко образуют димеры.

Отработка методики использования современных компьютерных технологий в моделировании геометрической структуры и колебательных спектров для различных кислородосодержащих соединений является предметом данной публикации. Объект исследования – спирты. Начнем с метанола.

Анализ колебательных состояний

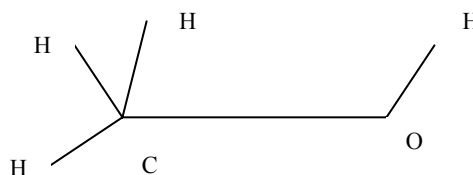
Метиловый спирт (CH_3OH) – молекулярное соединение, хорошо изученное методами колебательной спектроскопии [1].

Приведенная в монографии [1] интерпретация колебательного спектра метанола и дейтерозамещенных метанола считается весьма надежной. Гармоническое силовое поле является «эффективным», поскольку получено на основании решения обратной механической задачи.

Учитывая возможную неоднозначность решений таких задач, следует провести неэмпирические квантовые расчеты параметров адиабатического потенциала (силовых постоянных) метанола в ангармоническом приближении теории молекулярных колебаний.

Моделирование параметров адиабатического потенциала осуществлялось в рамках метода функционала плотности DFT-b2LYP для 12-ти различных базисных наборов от 6-31G(d) до 6-311++G(d,p). Результаты такого вычислительного эксперимента приведены в табл. 1–7.

Молекула метилового спирта (рисунок) имеет плоскость симметрии и принадлежит группе симметрии C_s . Колебания распределены по двум типам симметрии $\Gamma=8A'+4A''$. Геометрические параметры молекулы, определенные микроволновым методом, имеют значения [1]: $R_{\text{CO}}=1.43 \text{ \AA}$; $R_{\text{OH}}=0.96 \text{ \AA}$; $R_{\text{CH}}=1.10 \text{ \AA}$; $A_{\text{COH}}=108.9^\circ$; $A_{\text{HCH}}=109.1^\circ$.



Молекула метилового спирта

Оптимизация геометрии в любом из перечисленных базисов дает отклонение от эксперимента для длин связей не более 0.01 \AA , для валентных углов $\sim 0.7^\circ$.

Первый этап методики моделирования параметров адиабатического потенциала состоит в расчете гармонических силовых постоянных для указанного выше базисного набора и выявлении тех фундаментальных колебаний, для которых может иметь место резонансное взаимодействие (резонанс Ферми) [7]. Для метанола такие данные представлены в табл. 1.



Таблица 1

Влияние базиса на расчетные значения в гармоническом приближении фундаментальных частот колебаний

6-31G(d) – 6-311G(d,p)				6-31+G(d) – 6-311+G(d,p)				6-31++G(d) – 6-311++G(d,p)			
3755	3825	3790	3838	3763	3839	3788	3846	3760	3837	3787	3846
3132	3122	3116	3103	3142	3133	3124	3112	3141	3132	3124	3112
2997	2989	2980	2974	3011	3003	2994	2989	3010	3003	2994	2989
1542	1527	1528	1508	1527	1511	1522	1506	1526	1510	1521	1505
1511	1500	1501	1489	1496	1484	1491	1480	1495	1484	1491	1480
1400	1385	1395	1379	1369	1355	1370	1357	1369	1354	1368	1357
1097	1095	1089	1085	1077	1072	1072	1071	1077	1072	1071	1071
1067	1062	1060	1053	1052	1047	1049	1042	1051	1046	1048	1042
3039	3034	3020	3015	3059	3055	3041	3037	3059	3055	3041	3037
1525	1508	1512	1492	1517	1501	1511	1495	1516	1499	1509	1494
1183	1179	1177	1168	1178	1173	1177	1169	1176	1171	1176	1168
344	335	353	329	323	316	319	300	322	314	316	300

Достоверность найденного силового поля проверяется на расчете частот фундаментальных колебаний для дейтерозамещенных метилового спирта по методике, предложенной в [8]. Результаты приведены в табл. 2.

После масштабирования [9] набора вычисленных частот фундаментальных (ν_m) колебаний имеет место хорошее совпадение указанных частот с экспериментальным отношением.

Таблица 2

Интерпретация колебательных спектров метилового спирта и его дейтерозамещенных

Форма колебания	CH ₃ OH			CH ₃ OD			CD ₃ OH			CD ₃ OD		
	ν_{exp}	ν_h	ν_m	ν_{exp}	ν_h	ν_m	ν_{exp}	ν_h	ν_m	ν_{exp}	ν_h	ν_m
Колебания типа симметрии A'												
ν_{OH}	3687	3846	3627	2720	2780	2663	3690	3820	3627	2724	2782	2665
ν_{CH}	2973	3112	2973	2965	3115	2976	2235	2309	2221	2228	2308	2220
ν_{CD}	2845	2989	2859	2840	2972	2843	2077	2135	2057	2080	2135	2057
β_{OCH}	1475	1505	1458	1475	1515	1468	1081	1082	1052	1083	1090	1060
β_{OCH}	1425	1480	1434	1327	1484	1438	-	1151	1118	1071	1082	1052
β_{COH}	1345	1357	1316	865	882	859	1297	1327	1287	775	788	768
β_{OCH}	1070	1071	1041	1210	1260	1223	858	874	851	1029	1067	1038
ν_{CO}	1034	1042	1013	1041	1055	1026	988	1001	974	983	997	970
Колебания типа симметрии A''												
ν_{CH}	2973	3037	2903	2965	3025	2892	2235	2244	2160	2228	2244	2160
β_{OCH}	1455	1494	1447	1458	1497	1450	1134	1083	1053	1135	1160	1127
β_{OCH}	1160	1168	1135	1160	1165	1132	890	901	877	888	901	877
XX	270	300	294	-	261	256	-	311	304	-	239	234

Примечание. Отнесение основано на расчетах в базисе 6-311++G(d,p).

Как видно из табл. 1, для предварительной теоретической интерпретации колебательного спектра метилового спирта в гармоническом приближении можно пользоваться любым базисом, поскольку энергетическая щель между частотами колебаний зна-

чительно превышает величину смещения колебательного уровня за счет выбора базиса.

Отметим тот факт, что расчетные данные в табл. 1 практически не отличаются для соответствующих базисных наборов, учитывая диффузионные эффекты (+, ++).



Однако операция масштабирования не имеет четкого физического обоснования. Сами же коэффициенты масштабирующего соотношения [9] получены на основании статистической обработки экспериментальных и расчетных данных для соединений различных классов. Более того, возникает вопрос: является ли операция масштабирования корректной корректировкой результатов расчета гармонического силового поля молекулы квантовыми методами, или это метод учета ангармонизма колебаний? Ответ на данный вопрос могут дать модельные расчеты колебательных спектров в ангармоническом приближении. Это второй этап моделирования параметров адиабатического потенциала.

В технологии «Gaussian» [5] по умолчанию ферми-резонансы между фундаментальными (ν_i) и составными состояниями ($\nu_j + \nu_k$) рассматриваются в случае, если энер-

гетическая щель между ними не превышает 10 см^{-1} .

Как видно из табл. 1, резонансное взаимодействие имеет место для валентных колебаний связи СН метильной группы (ν_3 и ν_9) и составных тонов деформационных колебаний этих же связей ($\nu_4 + \nu_5$; $\nu_4 + \nu_{10}$; $\nu_5 + \nu_{10}$). Расчеты с использованием технологии «Gaussian-03», подтверждают сказанное. Указанные резонансы и базисы, в которых они учитываются по умолчанию, представлены в табл. 3. Кроме указанных резонансов имеются резонансы между основными состояниями ν_4 , ν_5 и обертоном $\nu_{11} + \nu_{12}$. Однако последние за счет возмущения, вносимого соответствующей кубической силовой постоянной F_{ijk} , расходятся на величину, не превышающую 15 см^{-1} , что меньше смещений, вызванных сменой базиса расчета. Поэтому мы их не приводим.

Таблица 3

Влияние резонансов Ферми на интерпретацию валентных колебаний связей СН

6_31_d	2974	1492	1492	3	10	10
9 5 10	2796	18.46	2901	2989	1495	1495
3039 1511 1525	6-31+_d_p			2863	19.51	2907
2877 18.42 2967	3	5	4	6-311+_d_p		
6_31_d_p	3003	1484	1511	3	5	4
9 4 10	2861	-10.91	2921	3003	1484	1510
3034 1527 1508	3	10	10	2853	-10.78	2919
2903 16.15 2961	3003	1501	1501	3	10	10
6_311_d	2861	20.50	2916	3003	1499	1499
9 5 10	6_311+_d			2853	21	2914
3020 1501 1512	9	4	10	6-311+_d_p		
2858 17.16 2948	3041	1522	1511	3	5	4
6_311_d_p	2897	17.23	2958	2989	1480	1505
3 5 5	6-311+_d_p			2858	-10.78	2909
2974 1489 1489	3	5	4	3	10	10
2796 39.68 2904	2989	1480	1506	2989	1494	1494
3 10 10	2863	-10.97	2910	2858	19.54	2904

Анализ данных, представленных в табл. 4, показывает, что резонансное взаимодействие приводит к расхождению взаимодействующих колебательных состояний до величины $\sim 110 \text{ см}^{-1}$, что находится в удовлетворительном согласии с предложенным в монографии [1] экспериментальным отношением для колебаний ν_3 и ν_9 .

Для ряда базисов энергетическая щель между фундаментальными состояниями ν_3 и ν_9 и обертонами $\nu_4 + \nu_5$; $\nu_4 + \nu_{10}$; $\nu_5 + \nu_{10}$ превышает 10 см^{-1} . По умолчанию, технология «Gaussian-03» не рассматривает взаимодействие между ними как учет резонансов Ферми, а смещение колебательных состояний рассчитывается в рамках адиабатической те-



Таблица 4

Влияние ангармонизма колебаний на смещение фундаментальных полос

v	6-31G(d) – 6-311G(d,p)				6-31+G(d) – 6-311+G(d,p)				6-31++G(d) – 6-311++G(d,p)			
	Xii	Xii	Xii	Xii	Xii	Xii	Xii	Xii	Xii	Xii	Xii	Xii
1	-203	-199	-219	-201	-204	-199	-219	-201	-203	-199	-219	-201
2	-131	-128	-129	-128	-128	-125	-125	-123	-128	-125	-125	-123
3	-63.5	-61.8	-64.9	-63.7	-61.9	-60.2	-62.2	-60.9	-62.0	-60.2	-62.3	-60.9
4	8.7	14.8	8.1	23.9	20.5	53.9	14.1	43.6	21.8	61.8	15.4	48.6
5	68.6	174	69.2	-7.8	-116	-68.8	-176	-75.0	-111	-67.5	-171	-73.8
6	-16.2	-15.1	-17.5	-16.0	-15.6	-14.8	-16.5	-15.6	-15.6	-14.8	-16.4	-15.6
7	-7.4	-8.9	-1.8	-3.6	-4.9	-6.0	-2.5	-3.5	-5.1	-6.1	-2.4	-3.4
8	-9.4	-7.8	-14.5	-13.2	-11.6	-10.4	-12.9	-12.8	-11.4	-10.3	-13.0	-12.8
9	-84.9	-83.4	-84.7	-84.1	-85.1	-84.1	-83.4	-82.6	-85.1	-84.1	-83.4	-82.6
10	-9.9	0.2	-7.0	-11.6	3.9	-11.3	-0.3	-11.4	5.2	-11.3	1.5	-11.2
11	-4.8	-5.0	-5.2	-4.9	-4.6	-4.7	-4.9	-4.6	-4.4	-4.6	-4.8	-4.5
12	-32.5	-30.3	-43.2	-33.2	-41.0	-36.5	-52.6	-38.3	-40.6	-36.2	-50.2	-37.4
v	Xi	Xi	Xi	Xi	Xi	Xi	Xi	Xi	Xi	Xi	Xi	Xi
1	2.2	2.3	-1.1	4.0	-4.9	-5.2	-3.7	2.0	-5.1	-5.6	-3.6	1.8
2	-32.1	-38.2	-33.1	-36.4	-46.1	-50.7	-45.7	-45.9	-46.3	-51.1	-46.1	-46.2
3	-265	-426	-264	-181	-58.1	-132	42.7	-107	-70.7	-144	32.5	-116
4	-67.8	-74.8	-75.4	-86.0	-88.1	-132	-79.5	-121	-90.1	-143	-80.9	-127
5	-139	-282	-139	-39.9	109	44.6	190	52.9	102	42.9	184	51.2
6	-40.0	-40.3	-39.1	-41.9	-44.8	-45.3	-44.1	-45.7	-44.8	-45.4	-44.8	-46.4
7	-16.5	-16.9	-17.8	-19.9	-18.1	-18.4	-16.0	-18.1	-17.9	-18.4	-16.1	-18.4
8	-24.5	-23.8	-24.5	-24.6	-25.7	-26.0	-24.4	-24.4	-25.4	-25.9	-24.4	-24.4
9	-130	-86.4	-130	-73.1	-62.8	-97.0	-105	-92.2	-68.1	-97.8	-63.1	-93.4
10	-41.8	-55.5	-43.4	-38.1	-61.0	-41.1	-52.3	-40.0	-62.8	-41.0	-54.2	-39.8
11	-31.4	-31.8	-31.3	-32.3	-33.0	-33.3	-32.9	-33.9	-32.8	-33.1	-32.7	-33.7
12	32.3	30.7	32.0	31.5	23.8	22.1	32.3	33.5	24.3	22.2	33.0	33.6

ории возмущения второго порядка. Данные приведены в табл. 5, 6. У колебательного состояния v_3 такое смещение для ряда базисов может достигать $\sim 250 \text{ см}^{-1}$. За рамки адиабатической теории Борна–Оппенгеймера [10] ($\Delta < 0.1 v_3$) этот результат не выходит, однако приводит к расхождению с экспериментом $\sim 100 \text{ см}^{-1}$.

Надо отметить, что и в этом случае расхождение с экспериментальным отнесением меньше, чем расчеты в гармоническом приближении. Остается выяснить, за счет чего в таких базисах имеет место расхождение с экспериментом все-таки существенное для

задач идентификации соединений по их колебательным спектрам. Это заключительный этап методики.

Обратимся к ангармоническим поправкам, определяющим сдвиг фундаментальных полос колебаний (см. табл. 4). Указанные поправки получаются из известного выражения [11] для колебательных состояний

$$E^{(v)} = \omega_s (v_s + g_s / 2) + \chi_{sr} (v_s + 1/2)(v_r + 1/2)(1 + 1/2 \delta_{sr}), \quad (1)$$

$$X_{ii} = 9/4 \chi_{ii}; \quad X_i = 3/4 \sum \chi_{ir}. \quad (2)$$



Таблица 5

**Влияние базиса на расчетные значения частот колебаний, см⁻¹,
и интенсивностей метилового спирта (ИК, Км/Моль, КР, Å⁴аеи)**

Форма колебаний	ν _{exp} [1] (ИК)	ν _h	ν _m	ν _{anh}	ИК	КР	ν _h	ν _m	ν _{anh}	ИК	КР
		6_31G_d; 6_31G_d,p;6_311G_d;6_311G_d,p									
		Минимум					Максимум				
φ _{OH}	3687с.	3755	3567	3575	7.99	71.1	3838	3644	3662	20.9	79.7
φ _{CH}	2973о.с.	3103	2964	2964	34.2	70.2	3132	2992	2994	38.6	77.6
φ _{CH}	2845с.	2974	2844	2649	63.9	119	2997	2866	2781	71.7	143
β _{CH3}	1475ср.	1508	1461	1472	3.87	14.6	1542	1493	1504	4.24	20.5
β _{CH3}	1425сл.	1489	1443	1454	5.38	5.89	1511	1464	1479	7.47	9.34
β _{COH}	1345с.	1379	1338	1337	25.2	2.53	1400	1357	1359	29.9	4.31
β _{CH3}	1070	1085	1055	1069	1.42	5.28	1097	1066	1079	7.59	7.23
Q _{CO}	1034о.с.	1053	1024	1025	116	0.69	1067	1038	1043	120	2.63
φ _{OH}	2973о.с.	3015	2883	2854	82.2	67.9	3039	2905	2898	93.2	79.2
β _{CH3}	1455ср.	1492	1445	1456	1.51	15.3	1525	1477	1488	2.93	21.9
β _{CH3}	1160сл.	1168	1134	1142	0.39	5.20	1183	1149	1158	0.62	8.36
xx	270	329	322	320	122	3.22	353	345	337	143	4.23
		6_31+G_d; 6_31+G_d,p;6_311+G_d;6_311+G_d,p									
φ _{OH}	3687с.	3763	3575	3579	12.6	71.4	3846	3650	3668	30.2	80.2
φ _{CH}	2973о.с.	3112	2973	2972	27.3	72.1	3142	3001	2996	30.4	73.7
φ _{CH}	2845с.	2989	2859	2853	68.0	134	3011	2879	2967	73.8	146
β _{CH3}	1475ср.	1506	1459	1464	5.11	11.5	1527	1479	1487	5.17	12.6
β _{CH3}	1425сл.	1480	1434	1448	4.99	4.06	1496	1449	1465	7.56	5.30
β _{COH}	1345с.	1355	1314	1311	20.9	2.37	1370	1328	1326	24.2	3.10
β _{CH3}	1070	1071	1041	1055	0.20	7.18	1077	1047	1060	2.33	7.92
Q _{CO}	1034о.с.	1042	1014	1015	127	1.70	1052	1023	1025	134	2.26
φ _{OH}	2973о.с.	3037	2903	2893	63.4	79.5	3059	2923	2941	71.5	83.3
β _{CH3}	1455ср.	1495	1448	1458	2.75	11.2	1517	1470	1480	3.67	12.5
β _{CH3}	1160сл.	1169	1136	1142	0.22	3.13	1178	1144	1152	0.33	4.08
xx	270	300	294	289	135	1.02	323	317	303	155.	1.62
		6_31++G_d; 6_31++G_d,p;6_311++G_d;6_311++G_d,p									
φ _{OH}	3687с.	3760	3572	3576	12.4	75.1	3846	3650	3668	30.0	82.4
φ _{CH}	2973о.с.	3112	2973	2972	27.3	74.3	3141	3000	2995	30.6	76.9
φ _{CH}	2845с.	2989	2859	2845	68.1	151	3010	2878	2960	74.3	159
β _{CH3}	1475ср.	1505	1458	1463	4.97	12.5	1526	1478	1486	5.18	13.7
β _{CH3}	1425сл.	1480	1434	1448	5.06	4.05	1495	1449	1465	7.72	5.39
β _{COH}	1345с.	1354	1313	1310	20.9	2.68	1369	1327	1325	24.1	3.26
β _{CH3}	1070	1071	1041	1055	0.20	7.46	1077	1047	1060	2.67	8.52
Q _{CO}	1034о.с.	1042	1013	1014	127	1.40	1051	1022	1024	133.	2.18
φ _{OH}	2973о.с.	3037	2903	2901	63.5	81.5	3059	2923	2937	72.3	86.8
β _{CH3}	1455ср.	1494	1447	1457	2.49	12.7	1516	1469	1479	3.31	13.96
β _{CH3}	1160сл.	1168	1135	1141	0.23	3.81	1176	1142	1150	0.37	4.88
xx	270	300	293	289	134	1.43	322	315	302	154	2.19

Примечание. с – сильная, о.с. – очень сильная, ср. – средняя, сл. – слабая. Интенсивности в ИК спектрах в Км/Моль, в КР – Å⁴аеи.



Таблица 6

Вычисленные значения кубических силовых постоянных F_{ijk} метилового спирта (в см^{-1}) для различных базисных наборов

I	J	K	6-31 G(d)	6-31 G(d,p)	6-311 G(d)	6-311 G(d,p)	6-31+ G(d)	6-31+ G(d,p)	6-311+ G(d)	6-311+ G(d,p)	6-31++ G(d)	6-31++ G(d,p)	6-311++ G(d)	6-311++ G(d,p)
1	1	1	2622	2635	2662	2620	2618	2625	2650	2612	2615	2624	2651	2612
2	2	2	-1827	-1803	-1818	-1802	-1790	-1758	-1768	-1745	-1789	-1755	-1768	-1744
3	2	2	-496.1	-521.6	-457.2	-472.4	-554.4	-589.1	-529.0	-551.6	-554.6	-591.7	-529.2	-552.6
3	3	2	228.5	228.5	218.2	220.7	234.0	233.3	225.9	227.7	234.0	233.3	226.0	227.7
3	3	3	-1250	-1244	-1251	-1237	-1235	-1227	-1229	-1214	-1235	-1226	-1228	-1214
5	5	3	165.7	165.4	157.7	158.7	174.3	177.2	168.4	172.6	174.8	177.7	169.1	173.4
9	9	2	366.8	379.1	339.7	349.5	403.9	422.8	383.4	397.8	404.0	424.4	383.6	398.4
9	9	3	-1386	-1377	-1373	-1363	-1380	-1371	-1359	-1350	-1380	-1370	-1359	-1350

Примечание. Даны кубические силовые постоянные, определяющие ангармоническое смещение валентных колебаний связей СН и ОН.

Таблица 7

Вычисленные значения квартичных силовых постоянных F_{ijkl} метилового спирта (в см^{-1}) для различных базисных наборов

I	J	K	L	6-31 G(d)	6-31 G(d,p)	6-311 G(d)	6-311 G(d,p)	6-31+ G(d)	6-31+ G(d,p)	6-311+ G(d)	6-311+ G(d,p)	6-31++ G(d)	6-31++ G(d,p)	6-311++ G(d)	6-311++ G(d,p)
1	1	1	1	1616	1616	1571	1558	1594	1585	1544	1536	1592	1585	1544	1536
2	2	2	2	1001	998	984	980	980	971	957	950	980	970	956	949
3	3	3	3	451	456	444	436	438	4409	429	420	438	4403	429	420
4	4	3	3	-165	-163	-156	-163	-160	-158	-152	-157	-161	-158	-152	-157
5	5	2	2	-216	-221	-218	-222	-208	-212	-209	-208	-208	-212	-207	-207
5	5	3	3	-133	-129	-127	-124	-140	-137	-134	-133	-140	-137	-134	-134
9	9	3	3	522	522	505	502	513	511	494	491	512	510	494	491
9	9	4	4	-234	-237	-228	-231	-230	-233	-226	-228	-230	-234	-226	-227
9	9	5	5	-142	-137	-136	-133	-151	-148	-144	-144	-151	-148	-145	-145
9	9	9	9	591	595	570	570	590	593	567	567	590	593	566	567
10	10	2	2	-258	-253	-245	-248	-256	-253	-244	-246	-257	-254	-245	-247

Примечание. Даны квартичные силовые постоянные, определяющие ангармоническое смещение валентных колебаний связей СН и ОН.

Видно, что диагональные поправки X_{ii} существенно зависят от базиса только для деформационных колебаний связей СН (ν_4 , ν_5). Для поправок X_i такая зависимость имеет место для колебаний ν_3 , ν_4 , ν_5 , ν_9 . Это как раз те колебания, для которых возможно резонансное взаимодействие с обертонами.

Выражение для ангармонических постоянных χ_{ii} состоит из трех слагаемых [11]:

$$\chi_{ii} = 1/4 \{ 6F_{iii} - 15(F_{iii})^2/\nu_i - \Sigma(F_{ijj})^2/\nu_j(8\nu_i^2 - 3\nu_j^2)/(4\nu_i^2 - \nu_j^2) \} \quad (3)$$

Последнее слагаемое имеет резонансный знаменатель, за счет которого проявляется существенный разброс значений поправок X_{ii} для колебаний связей СН (ν_4 , ν_5).

Схожая ситуация и для ангармонических постоянных χ_{ij} :

$$\chi_{ij} = 1/4 \{ F_{ijj} - 6(F_{ijj}F_{ijj}/\nu_i) - 4F_{ijj}^2[\nu_i/(4\nu_i^2 - \nu_j^2)] - \Sigma(F_{iik} - F_{kjj}/\nu_k) - F_{ijk}\nu_k(\nu_k^2 - \nu_i^2 - \nu_j^2) / [(v_i + \nu_k + \nu_k)(v_i + \nu_k - \nu_k)(v_i - \nu_k + \nu_k)(v_i - \nu_k - \nu_k)] \} \quad (4)$$

Второе и четвертое слагаемые содержат резонансные знаменатели, что отражается на величинах ангармонических поправок, приведенных в табл. 4.

Для колебательных состояний, энергетическая щель между которыми меньше 10 см^{-1} , как сказано выше, теория возмущений сводится к учету резонанса Ферми. Рас-



хождение резонирующих уровней определяется соотношением [12]

$$E = \{(v_i + v_j + v_k) \pm (K_{ijk}^2(1 + \delta_{jk})/2 + ((v_i - v_j - v_k)^2)^{1/2})\} / 2. \quad (5)$$

Приведенные в табл. 3 расчетные данные иллюстрируют применение соотношения (5). Для базисов, которые не вошли в табл. 3, расхождение с экспериментом для частот валентных колебаний связей СН (ν_3 , ν_9) достигает $\sim 100 \text{ см}^{-1}$, для остальных не превышает 50 см^{-1} (см. табл. 5, 6).

Интересным представляется сравнение вычисленных в различных базисах кубических и квартичных силовых постоянных, входящих в выражения для ангармонических постоянных χ_{ij} . Такие данные приведены в табл. 6, 7. Влияние базиса явно несущественно. Следовательно, основная причина расхождения экспериментальных значений фундаментальных состояний с модельными расчетами заключается в выборе барьера учета резонансного взаимодействия. Его увеличение исключит имеющиеся существенные отклонения расчетных значений фундаментальных частот колебаний от экспериментальных данных.

Иными словами, учет резонансного взаимодействия для определенной группы колебаний надо осуществлять в любом базисе. В этом случае выбор базиса для теоретической интерпретации фундаментальных колебательных состояний не будет иметь решающего значения. Для предсказательных расчетов подобный ответ может быть дан только после проведения модельных расчетов для конкретного класса соединений. Тем не менее для метилового спирта предпочтение следует отдать базису 6-311++G (d,p).

Выводы

1. Неэмпирические квантовые методы позволяют дать достоверную оценку гармонической системы силовых постоянных метилового спирта. Операцию масштабирования следует рассматривать как возможность качественного учета эффектов ангармоничности.

2. Выбор атомного базиса в рамках метода функционала плотности DFT-b3LYP несущественно сказывается на значениях ангармонических параметров разложения адиабатического потенциала (кубические и квартичные силовые постоянные). Подбор энергетической щели для учета резонансного взаимодействия (резонанса Ферми) колебательных состояний позволяет устранить имеющееся расхождение экспериментальных и расчетных значений валентных фундаментальных колебаний метильной группы, осуществить корректное использование адиабатической теории возмущения второго порядка, получить достоверные значения ангармонических постоянных для оценки обертоновых состояний.

3. Выбор базиса не сказывается на оценке геометрии молекулы метилового спирта. Расхождение экспериментальных данных по геометрии с соответствующими вычисленными значениями длин валентных связей и валентных углов не выходит за рамки точности микроволновых методов в оценке геометрии молекул.

4. Расчетные значения интенсивностей в спектрах ИК и КР зависят от выбора базиса. Однако качественная оценка указанных молекулярных параметров при этом не меняется.

Список литературы

1. Свердлов Л.М., Ковнер М.А., Крайнов Е.П. Колебательные спектры многоатомных молекул. М.: Наука, 1970. 559 с.
2. Минкин В.И. Теория строения молекул. Ростов н/Д: Феникс, 1997. 386 с.
3. Грибов Л.А., Дементьев В.А. Методы и алгоритмы вычислений в теории колебательных спектров молекул. М.: Наука, 1981. 356 с.
4. Березин В.И. Прямые и обратные задачи спектроскопии циклических и комплексных соединений: Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. Саратов, 1983. 336 с.
5. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B et al. Revision A.7. Gaussian. Inc., Pittsburgh (PA), 2003.
6. Yoshida H., Takeda K., Okamura J., Ehara A., Matsuura H. A New Approach to Vibrational Analysis of Large Molecules by Density Functional Theory: Wavenumber-Linear Scaling Method // J. Phys. Chem. A. 2002. Vol.106, №14. P.3580–3586
7. Лисица М.П., Яремко А.М. Резонанс Ферми. Киев: Наук. думка, 1984. 250 с.



8. Элькин П.М. Квантовомеханический анализ эффектов ангармоничности в многоатомных молекулах: Дис. ... канд. физ.-мат. наук. Саратов, 2005. 176 с.
9. Краснощеков С.В., Степанов Н.Ф. Масштабирующие множители как эффективные параметры для коррекции неэмпирического силового поля // Журнал физ. химии. 2007. Т.81, №4. С.680–689.
10. Браун П.А., Киселев А.А. Введение в теорию колебательных спектров. Л.: Изд-во ЛГУ, 1983. 223 с.
11. Nielsen H.H. The vibration-rotation energies of molecules and their spectra in the infrared // Handbook der Physik. 1957. Bd.37, №1. S.173–313.
12. Герцберг Г. Электронные спектры и строение многоатомных молекул. М.: Мир, 1969. 772 с.



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

Представлена работа круглого стола «Человек и свет в естественно-научной картине мира» на секции по истории, методологии и философии оптического образования XII Международной школы для молодых ученых и студентов по оптике, лазерной физике и биофотонике, прошедшей в Саратове 23–26 сентября 2008 года.

Ключевые слова: оптическое образование, методология, философия.

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

Moderator B.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 XII International School for Young Scientists and Students on Optics, Laser Physics and Biophotonics, which was of September 23–26, 2008, 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;

Доцент кафедры геометрии СГУ, канд. физ.-мат. наук Шимельфениг Олег Владимирович;

Заведующий кафедрой философии и методологии науки СГУ, профессор, д-р филос. наук Позднева Светлана Павловна;

Профессор кафедры философии и методологии науки СГУ, д-р филос. наук Афанасьева Вера Владимировна;

Заведующий кафедрой культурологии Саратовского государственного технического университета (СГТУ), профессор, д-р филос. наук Волошинов Александр Викторович;

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

Профессор кафедры патологической физиологии Саратовского государственного медицинского университета (СГМУ), д-р мед. наук Бриль Игорь Ефимович;

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

Заведующий кафедрой лазерной и компьютерной физики СГУ, профессор, д-р физ.-мат. наук Мельников Леонид Аркадьевич;

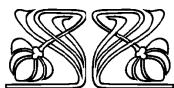
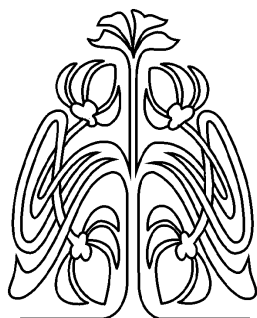
Заведующий кафедрой теоретической и ядерной физики СГУ, профессор, д-р физ.-мат. наук Дербов Владимир Леонардович;

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

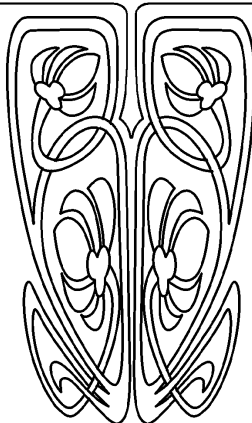
Профессор кафедры общей и теоретической физики Самарского государственного университета, д-р физ.-мат. наук Горохов Александр Викторович;

Профессор кафедры общей физики и волновых процессов Московского государственного университета, д-р физ.-мат. наук Приезжев Александр Васильевич;

Профессор кафедры истории российской цивилизации Института истории и международных отношений СГУ, д-р филос. наук Михель Дмитрий Викторович.



ПРИЛОЖЕНИЯ





Б.А. Медведев
ВСТУПИТЕЛЬНОЕ СЛОВО

Уважаемые коллеги! Тема нашего заседания настолько широка, что позволяет всем без исключения и в соответствии со своими профессиональными интересами, внести свой вклад в её раскрытие. Именно поэтому менее всего хотелось бы, даже в нашей первой встрече, выступить в качестве строителей Вавилонской башни. Поэтому, думая о цели нашего заседания, не будем забывать пророческих слов Э. Ласло о том, что XXI век явится веком междисциплинарных исследований. В этом контексте в Саратовском университете, который готовится к своему столетнему юбилею, мы работаем в формате XII Международной школы для молодых ученых и студентов по оптике, лазерной физике и биофотонике – школы, имеющей в качестве одного из приоритетных направлений повышение творческого потенциала будущих исследователей, их способности к нестандартным решениям проблем на стыках наук и к созданию новейших технологий.

Широта темы круглого стола, на наш взгляд, инициирует:

- преодоление «варварства узкой специализации» (Ортега-и-Гассет);
- формирование «дальних пределов человеческой психики» (А. Маслоу);
- использование принципа дополнительности Н. Бора применительно к искусству и науке;
- понимание того, что «...суждения, устанавливаемые путем рациональных формулировок, никогда нельзя считать единственно возможными предпосылками человеческого разума» (В. Паули).
- принятие тезиса о том, что степень эстетического восприятия мира задает высоту научного поиска – «физические законы должны обладать математической красотой» (Поль Дирак);
- развитие креативного мышления, использующего согласно Лейбницу отдалённые аналогии;
- развитие метафоричности мышления, фантазии, воображения, интуиции – всего того, что позволяет понять, насколько нам близки следующие мысли: «Случайные открытия делают только подготовленные умы» (Блез Паскаль). и «Мы воздухоплаватели ума» (Фридрих Ницше).

Я начинаю нашу работу с демонстрации картин «Афинская школа» Рафаэля и «Апофеоз Гомера» Ж. Энгра – яркой символики единства нау-

ки и искусства, а также снимков спутников в туманности Андромеды и туманности Рыбачья сеть в созвездье Водолея, сделанных с помощью телескопа Хаббла. Вглядываясь в космические глубины, невольно вспоминаешь слова Ф. Ницше: «Если ты смотришь на бездну, то и она смотрит на тебя», и мысль Иосифа Бродского: «Мы мыслим себя, мягко говоря, центрами своих собственных вселенных».

Предоставим слово представителям точных наук.

А.В. Горохов
ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ
СОВРЕМЕННОЙ КВАНТОВОЙ ОПТИКИ

В докладе представлен краткий обзор становления современной квантовой оптики. Выделено три основных этапа:

- Формирование основных понятий от А. Эйнштейна (фотоэффект) до создания квантовой теории излучения (Дирак, Ферми и др.) (1905–1955).
- Создание квантовой теории когерентности, квантовой теории лазера и основ квантового подхода в нелинейной оптике, сжатый свет, использование динамических алгебр Ли (Глаубер, Мандель, Басов, Прохоров, Шавлов, Таунс, Хохлов, Ахманов, Клышко, Барут, Сударшан, Клаудер, Переломов, Манько, Шелепин, Джейнс и Каммингс и др.) (1955–1985).
- Современный этап – квантовая электродинамика полостей, одноатомный мазер, ридберговские атомы, квантовые вычисления и компьютеринг, декогеренция, запутанные состояния, атомные конденсаты и атомные лазеры (Вальтер, Аарош, Летохов, Цайлингер, Дойч, Цоллер, Менский и многие другие) (1985 – ?).

Современный этап интересен тем, что новые эксперименты возродили интерес к «парадоксам» и к проблемам интерпретации квантовой механики, выявлению тонких особенностей проявлений перехода от квантового описания к классическому. Именно в квантовой оптике следует ждать самых неожиданных открытий, которые потенциально могут привести к глубоким изменениям в технологии и повседневной жизни.

Возникает сложная проблема перед лектором, стремящимся ввести студентов и аспирантов в круг новых идей и проблем. В рамки сравнительно небольшого курса (большого не дают!)



нужно втиснуть все упомянутые три этапа. Как это сделать, не впадая либо в упрощенчество, либо идя по соблазнительному пути резкого крена в сторону математизации изложения. В наше время эта проблема особенно остра, так как практически нигде в наших университетах нет экспериментальных групп, работающих на переднем крае. Поэтому для наших студентов новые идеи сродни чему-то вроде «квантовой магии», им очень сложно их прочувствовать. Некоторый выход может быть найден на пути установления научных и педагогических контактов с активно работающими зарубежными группами. Очень важным также является проведение семинаров и школ по проблемам квантовой оптики с участием как маститых ученых, так и студентов.

Именно в такой школе мне и посчастливилось участвовать в Саратове, за что я очень благодарен ее организаторам! Хотелось бы, правда, чтобы в аудитории было больше молодых лиц. Думаю, что в будущем образовательные лекции и секция стендовых докладов будут проходить в разное время.

В.В. Розен

К ФУНДАМЕНТАЛЬНОЙ КОНЦЕПЦИИ СОВРЕМЕННОЙ НАУЧНОЙ КАРТИНЫ МИРА

Цель сообщения – кратко проследить догадки, представления и принципы, сформировавшиеся в ходе многовекового осмысления природы света, которые переросли рамки собственно физической науки и превратились в фундаментальные концепции современной научной картины мира.

1. Еще в начале V в. до н.э. Эмпедокл высказал априорное утверждение о том, что свет распространяется с конечной скоростью. Эмпирическое подтверждение этого пришло лишь в конце XVII в. — первым измерил скорость света датский астроном Олаф Рёмер. Исключительную роль и исторически, и содержательно, вопрос о природе и свойствах света играет в специальной теории относительности Эйнштейна, основным из постулатов которой является постулат постоянства скорости света.

2. Один из результатов опытов Герона Александрийского состоял в том, что при отражении от зеркала свет распространяется по кратчайшему пути. Дальнейшие открытия в этом направлении, принадлежащие выдающимся математикам XVII в.

(среди которых Пьер Ферма, Рене Декарт, Христиан Гюйгенс), привели к формулировке принципа наименьшего действия, носящему основополагающий философский характер: все явления Вселенной протекают по принципу наибольшей экономии.

3. Размышления о природе света сыграли решающую роль в создании квантовой механики. Как известно, в 1900 г. Макса Планка привлекла проблема теплового излучения электромагнитных волн. «Квант действия» (постоянная Планка) был введен именно для описания свойств теплового излучения и превратился впоследствии в одно из фундаментальных понятий картины мира.

4. Еще одна основополагающая концепция физической картины мира – корпускулярно-волновой дуализм. Он был впервые сформулирован Эйнштейном в 1905 г. на примере фотонов в рамках созданной им теории фотоэффекта и оказался впоследствии всеобщим свойством материи.

5. Реликтовое излучение, обнаруженное в 1965 г. (Пензиас и Вильсон), наряду с явлением разбегания галактик, явилось экспериментальным подтверждением концепции Большого взрыва – базовой концепции космологии.

6. Наконец, еще одно фундаментальное представление современной научной картины мира – связь пространства и времени. Научный подход к этому вопросу может быть основан как на математике, так и на физике. Математически «неразрывная» связь пространства и времени видна уже из преобразований Лоренца: нельзя выразить пространственные координаты только через пространственные и временные – только через временные, их надо объединять в рамках единой структуры 4-мерного пространства – времени. Но данное обстоятельство не дает физического понимания сущности связи пространства и времени. В этом феномене решающую роль играют электромагнитные волны. Именно они быстрее всего разносят в пространстве информацию о произошедшем в какой-либо точке пространства события. Образно говоря, река времени движется со скоростью света. А так как каждый наблюдатель тоже движется в пространстве с определенной скоростью, то он всегда находится не только в определенной точке пространства, но и в определенной точке движущейся реки времени. В итоге получается, что именно свет (точнее, электромагнитные волны) связывает пространство и время в единую структуру.



В.П. Рябухо

ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА СВЕТА

Поляризационные свойства света наиболее интересны при его взаимодействии с веществом, в особенности с анизотропным веществом. Человек без использования специальных устройств практически не в состоянии непосредственно ощутить состояние поляризации света. Известны эксперименты, в которых визуально различались направления колебаний в линейно поляризованном свете. Эта возможность объясняется определенной анизотропией в структуре сетчатки глаза человека. Однако этот эффект очень слабо выражен. Другое дело с чувствительностью к поляризации у некоторых насекомых – пчел, муравьев, дафнии, которые используют поляризацию света в навигационных целях, ориентируясь в пространстве по направлению линейной поляризации рассеянного в атмосфере света.

Термин «поляризация света» не совсем удачен, поскольку в свете нет той полярности, с которой ассоциируется этот термин. Да и представление о поляризации среды, в которой распространяется световая волна, не только не проясняет, но и в определенной мере запутывает понимание этого качества оптического поля.

Под поляризацией света понимается определенная упорядоченность колебаний, возбуждаемых световой волной в определенной точке пространства в течение определенного времени наблюдения. При линейной поляризации эти колебания совершаются вдоль одной прямой, при круговой – колебания не изменяются по величине, а меняется только направление создаваемого возмущения, при эллиптической – меняется и величина и направление возмущения. Можно представить и создать в натурном эксперименте более сложное состояние поляризации – векторного возмущения, создаваемого световым полем, рассматривая, например, суперпозицию монохроматических волн разной частоты с ортогональными направлениями колебаний. При кратных частотах, как в фигурах Лиссажу, будут формироваться стационарные во времени формы колебаний, в которых направление и величина колебаний имеет более сложную форму по сравнению с эллиптической.

В оптических полях состояние поляризации может меняться в различных точках пространства, принимая все формы от линейной до круговой.

Например, такое имеет место при суперпозиции под некоторым углом двух плоских волн с ортогональными направлениями линейной поляризации. Результирующее поле в каждой его точке поляризовано, а в среднем по достаточно протяженной области пространства поляризация не наблюдается. При объемном рассеянии монохроматического света, например, на поверхности белой бумаги, рассеянное поле имеет определенное состояние поляризации в пределах некоторой области пространства – области корреляции, и меняется случайным образом на расстояниях, превышающих размер этой области (превышающих радиус корреляции). В среднем такой рассеянный пучок света не поляризован, но полностью поляризован в отдельных областях пространства.

В оптике для многих эффектов можно установить пространственно временные аналогии – если имеет место пространственный эффект, то аналогичный эффект можно наблюдать и во времени. Состояние поляризации света – не исключение. Действительно, монохроматическая волна всегда поляризована. При суперпозиции двух волн различной частоты с ортогональными направлениями линейной поляризации состояние поляризации результирующей волны непрерывно строго периодически меняется с периодом обратно пропорциональным разности частот. В световом пучке естественного света состояние поляризации также непрерывно меняется, но теперь, по стохастическому закону, и с характерным временем полного изменения, равным времени корреляции (когерентности) колебаний, которое обратно пропорционально ширине частотного спектра. Поэтому естественный свет также всегда поляризован, но состояние поляризации изменяется по случайному закону. Такой свет следует называть случайно поляризованным.

Таким образом, рассматривая состояние поляризации светового поля, необходимо всегда иметь в виду, по какой области пространства и за какой промежуток времени в среднем определяется это состояние поляризации оптического поля.

А.Г. Роках

РАЗМЫШЛЕНИЯ О ЧЕЛОВЕКЕ И СВЕТЕ В НАУЧНОЙ КАРТИНЕ МИРА

Здесь был затронут вопрос о спектральной чувствительности глаза, т. е. его способности различать цвета. Он важен как для науки, техники,



так и для искусства. Последнее призывает нас любоваться природой, не вдаваясь в физические детали, на языке ощущений и эмоций, открывая целый мир прекрасного. А между тем чувствительность глаза лежит в узком спектральном диапазоне от 400 до 700–760 нанометров.

Естественный отбор (или Господь Бог?) отобрал те энергии световых квантов, которые, с одной стороны, в достаточном количестве содержатся в солнечном излучении, с другой – производят необходимые для реализации зрительного процесса фотохимические реакции. При движении в фиолетовую область и далее мы получили бы большие кванты света, которые привели бы к разрушению белка, коль скоро смогли бы дойти до сетчатки. Но в ближней ультрафиолетовой области это по большей части невозможно из-за сильного поглощения света веществом глаза. Однако в области рентгеновских лучей, которые имеют большую проникающую способность и доходят до сетчатки, это возможно и очень опасно.

Когда энергия светового кванта недостаточна для осуществления фотохимических реакций, мы имеем ограничение чувствительности с красной стороны. Однако у некоторых живых существ граница лежит дальше, чем у человека, захватывая ближнюю часть инфракрасной области спектра. Подумаем, что было бы, имел человек такую чувствительность?

Речь ведь идет о той области спектра, в которой свет может более глубоко и притом безопасно проникать в живые ткани и, следовательно, нести информацию о протекающих там физиологических процессах. При этом человек смог бы видеть кровоток в поверхностных кровеносных сосудах, возможно, даже и биение собственного сердца. Но не была ли бы «излишней» вся эта информация, все эти детали бытия? Не помешали бы они наслаждаться цветовой гаммой окружающей природы, не приземлили бы интересы человека, ограничив их сферой материального?

Кроме того, обладающий дополнительными физическими возможностями человек не ограничился бы позицией стороннего наблюдателя, а стал бы то и дело вмешиваться в физиологические процессы как собственного, так и чужого организма, которые пока что выполняются автоматически, что называется на автопилоте. И неизбежно стал бы «расхлебывать» последствия этого вмешательства. Такая деятельность (сейчас мы

оставляем ее врачам) заняла бы все его свободное время, не оставив его для духовного роста, наслаждения искусством, реализации своих способностей и возможностей.

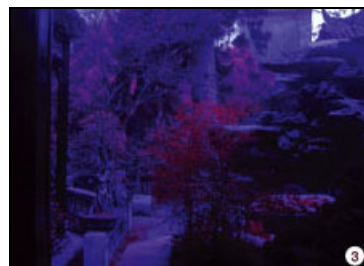
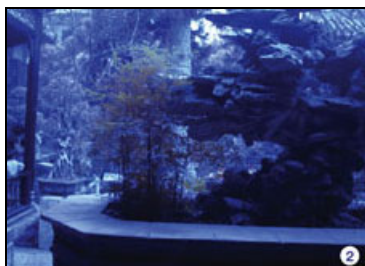
Короче говоря, изменение физических возможностей человеческого организма привело бы к изменению культуры человеческого общества, причем для этого достаточно лишь незначительно расширить область чувствительности человеческого глаза.

Л.А. Мельников

ОБ ОБЪЕКТИВНОСТИ И СУБЪЕКТИВНОСТИ ЗРЕНИЯ: ЗРИТЕЛЬНЫЕ ИЛЛЮЗИИ

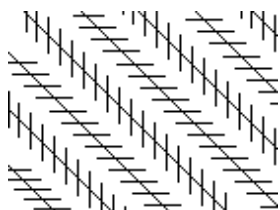
В процессе зрения, кроме собственно физических и биохимических процессов формирования изображения, формирования электрохимического сигнала, огромную роль играет процесс или совокупность процессов обработки сигнала. Не вдаваясь в детали этих сложных процессов, которые являются предметом интенсивного исследования (укажу лишь книгу *Хьюбелл Д. Глаз. Мозг. Зрение*. М.: Мир, 1990), заметим, что существуют подсказки, которые говорят о том, что наше познание мира с помощью зрения далеко не объективно. В качестве примера приведу тот факт, что наше собственное изображение в зеркале относится к реально несуществующему объекту. Дело в том, что наше изображение и мы сами не могут быть совмещены никаким поворотом – если мысленно зайти к своему изображению за спину, то мы обнаружим, что наше правое ухо находится за левым ухом изображения, то есть асимметрия правой и левой половин нашего лица у зеркального изображения изменяет знак. Так как мы себя видим в зеркале, нас никто не видит. Наше представление о себе, полученное из наблюдений в зеркале, заметно отличается от изображения, наблюдаемого в видеокамере или на фотографии.

Приведем пример искажения цвета, взятый из журнала «Optics and Photonics News» 2008, №3 (<http://www.osaopn.org/Archives/0308/Departments/letters.aspx>), где один и тот же пейзаж сфотографирован без фильтра (рис. 1), с голубым фильтром (рис. 2) и с двумя последовательно поставленными голубыми фильтрами (рис. 3), такими же точно, как и использованный при изготовлении рис. 2.

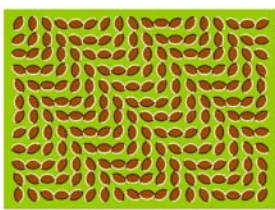


Видно, что на рис. 1 – «летний» пейзаж, на рис. 2 – «зимний», а на рис. 3 – «осенний». Этот пример не представляет зрительную иллюзию, но показывает, как цветовая фильтрация изменяет восприятие картинки.

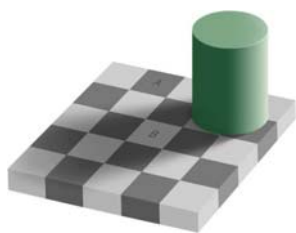
Следующие примеры – различные зрительные иллюзии, взятые с сайтов [http://www.psu.msu.ru/illusion/](http://www.psy.msu.ru/illusion/) и <http://www.xopoiiiio.ru/>



Иллюзия непараллельности прямых



Иллюзия движения (если увеличить картинку, то зерна «двигаются»)



Иллюзии цветового восприятия – квадратов одного цвета



Несуществующие объекты

Существует большое число и других иллюзий – иллюзий восприятий глубины, иллюзии кажущихся размеров, эффекты последствия и т.д. Заметим, что практически все люди попадают на все эти иллюзии. Это означает, что несмотря на субъективность зрения, что-то все-таки можно считать объективным, хотя бы наши общие заблуждения.

**Б.А. Медведев
КОММЕНТАРИЙ**

Я попытаюсь привести к некоторому общему знаменателю озвученные здесь выступления. В первую очередь, я хотел бы отметить постановку фундаментальных проблем в каждом из выступлений. В частности, дидактический аспект преподавания в докладе А.В. Горохова. Как рассказать о широкой панораме картины развития квантово-оптических представлений всего XX века? Как в сжатом лекционном курсе донести до студента исследования, находящиеся на границе научного знания? Можно ли совместить строгость сложного математического описания квантовых явлений с доступностью их восприятия? Не пойти ли нам вслед за Р. Фейнманом в его блестящих лекциях по физике? Не оставить ли для курсов по выбору и только для сильных студентов изложение теоретической физики в духе курса Л.Д. Ландау и Е.М. Лифшица? Не прибегнуть ли нам к самоиронии, вспомнив Ф. Ницше: «К гуманности учителя принадлежит предостерегать ученика от себя самого». Не подумать ли нам о лекции как приглашению к размышлению?

Видению физической картины мира мы обязаны глубокой проработке её отдельных фрагментов. Это блестяще продемонстрировано в выступлении В.П. Рябуха в его размышлении о понятии поляризации света. И вновь здесь нельзя не вспомнить Ницше, его мысль о «дальтонизме» мыслителей: «Каждый мыслитель рисует свой мир и всякую вещь меньшим количеством красок, чем есть на самом деле...»

Осмысление сложной природы света продолжается. Эта мысль была образно выражена в лекции мастер-класса В.Л. Дербовым, посвятившим свое выступление памяти профессора МГУ Д.Н. Клышко, его исследованиям природы света, понятию фотона...



В этом же контексте представления фундаментальных концепций о природе света от античных мыслителей до Эйнштейна выдержано интересное выступление В.В. Розена, акцентирующее наше внимание на еще не понятой фундаментальной роли света в качестве связующего звена пространства и времени.

Наша человеческая культура претерпела бы коренные изменения в случае небольшого расширения диапазона видимого света в инфракрасную область спектра. Об этом шла речь в выступлении А.Г. Рохаха. И как здесь не вспомнить Гёте: «Фантазия и есть то чуть-чуть, с которого начинается искусство и с которого должна начаться наука».

В выступлении Л.А. Мельникова, посвященном оптическим иллюзиям, обращает на себя внимание парадоксально высказанная мысль: «...несмотря на субъективность зрения, что-то всё-таки можно считать объективным, хотя бы наши общие заблуждения», созвучная афоризму Блеза Паскаля: «Истина так нежна, что чуть только отступил от неё, впадаешь в заблуждение, но и заблуждение это так тонко, что стоит только немного отклониться от него и оказываешься в истине».

Коллеги! Что же все-таки объединяет все предшествующие выступления? Я думаю – это движение мысли, это декартовское сомнение в процессе размышления над природой, это вопросительные знаки, которые, по словам Бальзака, и «являются ключом ко всякой науке».

Предоставим теперь слово философам.

Ю.М. Дуплинская

ФЕНОМЕНЫ СОЗНАНИЯ И КВАНТОВЫЕ ФЕНОМЕНЫ

Существует глубокая аналогия между феноменами сознания и квантовыми феноменами. В обоих случаях мы наталкиваемся на нечто, что абсолютно неделимо и неразложимо на составные части. На это сходство обратил внимание Шредингер, заметив, что «Я», подобно квантовым феноменам, – это дискретная и неразложимая единица. Если «Я» присутствует, то только вся сразу и целиком, а если отсутствует, то опять же, только вся сразу и целиком: как бы ни менялись обстоятельства жизни или содержание памяти, это не уничтожает некоего самотождественного ядра личности, называемого словом «Я». На упомянутое сходство обращает внимание также И.З. Цехмистро, полагающий, что «тайна» сознания заключена именно в неделимости квантовых

феноменов. В самом деле, количество информации и интенсивность ее переработки никак не влияет на наличие или отсутствие сознания. Например, у лунатика, идущего по краю карниза, процессы переработки информации от внешних раздражителей налицо, а вот сознание у него отсутствует. А у человека, находящегося в состоянии оцепенения, наоборот, информационные процессы не протекают, а сознание, тем не менее, есть. Очень трудно уловить суть этого «нечто», называемого сознанием, которое присутствует у первого и отсутствует у второго, но в любом случае оно, подобно квантовым феноменам, если присутствует, то все сразу и целиком, а если отсутствует, то опять же все сразу и целиком.

Обратим внимание на аналогию между принципом соотношения неопределенностей Гейзенберга и аналитикой сознания в философии экзистенциализма. Энергия и импульс микрообъекта не могут быть зафиксированы в точке «здесь» и «теперь» – в момент актуального настоящего: чем меньше времени занимает процедура измерения, тем большую неопределенность они приобретают. Аналогично, наше «Я» тоже невозможно застать «здесь» и «теперь». «Я» всегда «там» – либо в прошлом (в воспоминаниях), либо в будущем (в проектах), а наше «настоящее» – это лишь «мнимое настоящее», которое состоит из очень быстрых «флуктуаций» из прошлого в будущее и из будущего в прошлое, в которых миг настоящего всегда проскальзывает. Основоположник экзистенциализма С. Кьеркегор описывает темпоральность сознания в эссе с характерным названием «Несчастнейший». Несчастнейший – это тот, кто не живет в настоящем времени. Одна разновидность несчастных существ – те, которые всегда находятся в «прошлом», то есть живут воспоминаниями. Другая – те, которые всегда «в будущем», то есть живут несбыточными мечтами. «Несчастнейший» же – это синтез первого и второго. Он живет воспоминаниями о прошлом, но в прошлом он занимался лишь тем, что мечтал о будущем. Мечты же его, в свою очередь, содержали лишь проекты исправления того, что не состоялось в прошлом. Интересно, что существование микрообъектов в квантовой физике описывается фактически в той же темпоральной схеме, правда, без трагических интонаций С. Кьеркегора. Микрообъект постоянно берет «в кредит» энергию и импульс в масштабах времени и пространства,



которые не выходят за рамки соотношения неопределенностей Гейзенберга. Квантовый хаос состоит из бесконечных «займов» и «платежей по займам»: у будущего для прошлого, а у прошлого – для будущего. Чем не «несчастнейший» С. Кьеркегора, воспоминания которого авансируются из мечтаний, а мечтания – из воспоминаний? И так, в мире, где мы существуем, «настоящее» отсутствует во всех смыслах: и в прямом, и в переносном, и в «физическом», и в «метафизическом». Так лучший ли это из «всех возможных миров» или «несчастнейший из миров»?

С.П. Позднева
ГЛАЗ, СВЕТ И ЦВЕТ

Цветовые ощущения – комплекс сложной цепи физических, химических, нейрофизиологических и психических процессов. Основы современной науки о цвете заложены Исааком Ньютоном. В 1672 г. он в печати доложил о преломлении солнечных лучей в стеклянной призме. Белый свет разлагается на ряд цветных компонентов.

Через 140 лет с возражениями выступил Иоганн Вольфганг Гете. Из всех его работ «К учению о цвете» – самая объемная. Гете считал, что белый цвет – не есть смесь спектральных составляющих. Цвет изучают с естественно-научной (физической и нейробиологической), и психологической, и эстетической точек зрения.

Цветовое зрение связано с одним из основных органов чувств человека – глазом (70% информации человек получает через зрение), и с главным его раздражителем – светом. Птицы и насекомые прекрасно различают цвета. А хищники (кошки) к цвету безразличны.

У человека цветовое зрение развито превосходно, но не так важно для выживания, как у животных, особенно сейчас в связи с техническим прогрессом. За интерпретацию зрительных ощущений ответственны определенные участки мозга, что достаточно хорошо изучено. А природа восприятия пока не известна, ибо осложнена прошлым опытом и эмоциями. Мозг человека превзошел мозг животных. И только одному человеку из млекопитающих свойственна речь, которой человек овладевает в детстве.

В начале XIX в. Томас Юнг предложил трехкомпонентную теорию – все цвета получаются при смешивании трех цветов. Это важно для техники – цветной печати, цветной фотографии и цветного

телевидения. В сетчатке глаза у человека имеются светочувствительные клетки – палочки и колбочки. Палочки различают градации света и темноты, а колбочки воспринимают свет. Им соответствуют три пика чувствительности и их называют синими, зелеными и красными по положению в спектре.

Трехкомпонентная схема действует на первом уровне, далее уже действуют более сложные схемы (принцип оппонентных цветов). Естественники нейтральны по «отношению» к цвету, культурологи – наоборот. В лингвистике даже существует расовая гипотеза, что люди с разным цветом кожи могут видеть и называть цвета по-разному, хотя это спорно. Любопытно, что в словаре многих народов отсутствует цвет «бирюза». Простейший цветовой словарь содержит лишь белое и черное. Третье принадлежит красному. Четвертый – смесь зеленого и желтого. Черное и белое – основа различения света и тьмы, красное – неотделимо от жизни (кровь), желтое и зеленое – от пищи. Синий (по принципу оппонентных цветов) стоит особняком – небо или вода.

Вывод: физиологические механизмы, с помощью которых глаз и мозг анализируют световые стимулы и создают цветовые восприятия, находят свое отражение в психологических следствиях как цветовая лексика различных языков (Цоллинггер Г. Цветовое зрение: особенности ощущения и восприятия // Красота и мозг. Биологические аспекты эстетики. М., 1995).

И в заключение приведу слова философа М. Мерло-Понти в книге «Око и дух», который называет глаз человека зеркалом:

«Загадочность моего тела основана на том, что оно сразу и видящее и видимое. Вещи теперь уже инкрустированы в плоть моего тела, составляют часть его полного определения... Можно говорить о появлении человеческого тела, когда между видящим и видимым, осязающим и осязаемым, одним и другим глазом образуется своего рода скрещивание и пересечение, и занимает огонь... Глаз видит мир и то, чего недостает миру, чтобы быть картиной, и то, что не хватает картине, чтобы быть самой собой... Видеть – значит обладать на расстоянии... Дух выходит через глаза, чтобы отправиться на прогулку в вещах... Зрение есть зеркало... Призрак зеркала выволакивает наружу мою плоть, и тем самым, то невидимое, что было и есть в моем теле, сразу же



приобретает возможность наделять собой другие видимые мной тела... Зрение – это род мышления, которое строго и однозначно дешифрует знаки, запечатленные в теле... Мир, в конечном счете, находится вокруг нас, а не перед нами...».

О.В. Шимельфениг

ЧЕЛОВЕК И СВЕТ. К ЧЕМУ МЫ ИДЕМ?

...люди предпочитают отстранить феномены с помощью какого-нибудь общего теоретического воззрения, какого-нибудь способа объяснения, вместо того чтобы дать себе труд изучить единичное и построить нечто целое.

Гёте. Очерк учения о свете

Разумеется, я не призываю, как и Гёте, отбросить все науки, технологии и возвращаться в пещеры, – хотя бы потому, что пещер на всех уже не хватит. **Но** нашей цивилизацией потеряно чувство меры – равновесия между виртуальными, абстрактными суррогатами мира и способностью непосредственной органичной и гармоничной вписываемости в поток событий живой во всех своих проявлениях природы. Гёте – один из немногих выдающихся творцов науки и культуры в целом – обладал этим чувством и применял его в изучении, в том числе и света: «Цвета – деяния света, деяния и страдания. В этом смысле мы можем ожидать от них раскрытия природы света. Цвета и свет стоят, правда, в самом точном взаимоотношении друг с другом, однако мы должны представлять их себе как свойственные всей природе, ибо посредством их вся она готова целиком открыться чувству зрения ... так говорит природа, обращаясь и к другим чувствам, к знакомым, непризнанным, незнакомым чувствам; так говорит она сама с собой и с нами посредством тысячи явлений. Для внимательного она нигде не мертва, не нема» [1]. А далее он замечает, что «символические вспомогательные средства, иероглифический способ выражения, который мало-помалу начинает подменять подлинное явление, становятся на место природы и мешают настоящему познанию, вместо того, чтобы помогать ему» [1, с.129].

Этот, на первый взгляд, не столь уж судьбоносный «перекос» в научном познании и в соответствующей ему практике, в конце концов, приведёт человечество к глобальной катастрофе. Достаточно подробно и аргументированно этот сюжет рассмотрен в работе Н.В. Мотрошиловой, посвящённой философии Гуссерля [2]. Автор на-

чинает с посылки Галилея о том, что природа «написана на языке математики» и что это не метафора, а исходное убеждение в принципиальной изоморфности «рациональной» в себе природы и построенном на *ratio* естествознании.

Кстати, и современный нам нобелевский лауреат В.Л. Гинзбург, полностью в духе этой традиции, на вопрос о необъяснимых проблемах жизни и смерти отвечает, что нужно лишь составить подходящее уравнение и работать с ним (!) [3].

Я сам – математик и с удовольствием занимаюсь этой наукой, а преподавая, вовлекаю слушателей в формирование понятий, постановку задач, поиск и нахождение их решений; при этом, естественно, даю возможность им ошибаться и, в конце концов, найти правильный путь, испытав чувство радости от интеллектуального восхождения. Показываю, как виртуальный мир математики переключается с задачами мира физического и помогает в их разрешении, ибо, в силу целостности мироздания, любые его части, аспекты подобны в чём-то друг другу и целому. (В соответствии с известной скрижалю Гермеса Трисмегиста – «всё, что внизу, подобно тому, что наверху»). Но тут же предостерегаю и от «объективизации» математических и других абстракций, их мистификации и «оживления», вспоминая по этому поводу слова Гёте: «как чисто и надёжно ни может быть обработана математика сама в себе, на почве опыта она на каждом шагу спотыкается и, подобно всякому иному разработанному принципу, может привести к заблуждению и даже довести его до чудовищных размеров» [1, с.162]. Постоянно напоминаю вслед за этим глубочайшим мыслителем, «как трудно не ставить знак на место вещи, всё время, имея перед собой живую сущность, и не убивать её словами» [1, с.141].

Автор предлагает в качестве более сбалансированного между абстрактными замещениями жизни и самой жизнью более адекватный образ Универсума – **сюжетно-игровую картину мира** – как общей, межиндивидуальной реальности, каждое мгновение творимой всеми её участниками.

Тогда, при опоре на сюжетно-игровой подход, тема «человека и света» будет носить более индивидуальный, дифференцированный, живой характер, выводя исследование из пут замороженных абстрактных отношений химерических «человека вообще» и «света вообще». Участник нашей конференции И.Е. Бриль – специалист по



лазерной медицине, отвечая на вопрос о действии лазерного излучения на раковую опухоль, обозначил, по существу, предлагаемый мной подход. Он заметил, что ответ на этот вопрос «в общем» не имеет смысла: всё зависит от характера опухоли, стадии её развития или момента послеоперационного периода, от особенностей организма пациента и, наконец, от того или иного типа лазерного излучения*.

Таким образом, разнообразные сюжеты взаимодействий конкретного типа человека и конкретного типа света ещё ждут своих исследователей и своего языка описания, а сведение его лишь к привычным, обезличенным, абстрактным схемам только обедняет человеческую культуру и подталкивает её к бездуховной «машинной могиле» – «самоапокалипсису».

Список литературы

1. Гёте. Избранные философские произведения. М., 1964.
2. Мотрошилова Н.В. Понятие и концепция жизненного мира в поздней философии Эдмунда Гуссерля // *Вопр. Философии*. 2007. №7.
3. Гинзбург В. Интервью // *Независимая газета*. 2003. 5 нояб.
4. Шимельфениг О.В. Живая Вселенная. Сюжетно-игровая картина мира. XXI век: «Самозавет», или «Самоапокалипсис». Саратов: Науч. книга, 2005.

Д.В. Михель

ТЕЛО И СВЕТ У РЕМБРАНДТА: КУЛЬТУРНЫЙ КОНТЕКСТ «ТРАКТАТА О СВЕТЕ»

30-е годы XVII в. были временем, когда на Западе уже развернулась научная революция, сколь бы дискуссионным не было это понятие с точки зрения современной истории науки [1]. Характерной чертой этого времени был перенос центров научного знания с берегов Средиземного моря на север Европы, главным образом из Италии в Нидерланды [2].

В те годы в Италии стареющий Галилей изучал «поведение» твердых тел в различных средах, разрабатывая основы теоретической механики. Однако это не было единственным его занятием. Галилея интересовали также вопросы космологии, что привело к появлению в 1632 г. «Диалога о двух главнейших системах мира». В результате – вызов в Рим и суд инквизиции с последующим отречением. После этого – возвращение в Арчетри, слепота и завершение – с помощью Торричелли – главного труда по вопросам механики. Так появились «Беседы и математические доказательства, касающиеся двух новых отраслей науки,

относящихся к механике и местному движению», вышедшие в 1638 г. в Нидерландах. Как исследователь, Галилей работал в основном с математическими моделями, но прибегал и к помощи физических тел – пушечным ядрам, свинцовым пулям, наклонным плоскостям, деревянным и костяным шарам и пр. В его научном арсенале не было места только для света, который тогда еще едва начал обретать статус закономерного объекта интереса для механической философии.

Это произошло у Декарта. В 1630 г. Декарт начал писать свой знаменитый «Мир, или Трактат о свете». Книга была закончена в 1634 г., через год после суда над Галилеем. Декарт работал над ней в Нидерландах, но ее напечатали в Париже только в 1664 г. [3].

В своей книге Декарт предложил механическую трактовку света, повествуя о мельчайших частицах, отрывающихся от Солнца и других светящихся тел. В 14-й главе трактата он перечисляет 12 свойств света. При этом 11-е и 12-е свойства касаются того, что у Декарта называется «силой света». В частности, он пишет: «(11) сила их [лучей. – Д.М.] может увеличиваться или (12) уменьшаться в зависимости от различного расположения или различных качеств материи, принимающей эти лучи» [4]. Пару страниц спустя он поясняет, что имеется в виду: «Сила света не только зависит от количества собирающихся в данном месте лучей, но и может увеличиваться или уменьшаться вследствие различного расположения тел, находящихся, где проходит свет. Подобно этому, скорость мяча или камня, брошенного в воздух, может увеличиваться от ветра, дующего в ту сторону, куда движется мяч, или уменьшиться от встречного ветра» [5].

В истории науки традиционно подчеркивается, что Декарт был в курсе всех дел Галилея. Важным каналом получения новой научной информации для него, как и для многих ученых на севере Европы, был Мерсенн, добровольно игравший роль организатора переписки между главными героями научной революции. Мы не собираемся здесь опровергать это мнение, но хотим обратить внимание еще на одну тему – возможность культурного влияния на Декарта со стороны нидерландской живописи.

После обретения независимости от Испании Нидерланды стремительно превратились в могущественную морскую державу. В городах бурно



развивалась коммерция, промышленность, искусства. Амстердам, Лейден и другие голландские города стали местом художественных новаций для целой плеяды великих художников, лидером среди которых в 30-е гг. был, безусловно, Рембрандт (1606–1669).

В истории изобразительного искусства Рембрандт считается мастером техники светотени. Подчеркивая этот факт, искусствоведы обычно говорят о том, что светотень является у Рембрандта средством для выражения психологических и моральных коллизий.

В 1632 г. 25-летний Рембрандт написал «Урок анатомии доктора Тюльпа». Композиция этой картины проста. В центре лежит мертвое тело, вокруг которого расположились 8 хирургов, включая самого доктора Николааса Тюльпа. Доктор Тюльп проводит вскрытие и дает объяснение. Его лицо ярко освещено, и от него исходит свет. Это свет медицинского разума. Он освещает лица остальных семи докторов, которые приобщаются к силе знания. Тень на лице трупа обозначает смерть и зло. И это не случайно. Анатомируемое тело принадлежало преступнику, чей труп после казни в соответствии с традицией этого времени власти передали университетским докторам [6]. Рембрандт до предела насыщает всю сцену символами. В частности, Тюльп анатомирует именно руку трупа. В соответствии с господствующими религиозными взглядами того времени, «рука воспринималась в качестве символа божьей мудрости, потому как знать руку – значит знать Бога» [7]. Доктор Тюльп, подобно многим своим современникам, из числа анатомов, находился под влиянием Андрея Лаурентиса (1558–1609), поэтому для него всякий урок анатомии имел, прежде всего, моральную цель: рассказать о том, как лучше всего познать мудрое в самом себе. «Урок анатомии» у Рембрандта – это нравственное повествование.

В 1636 г. художник создал «Даная», где представил на суд зрителей двух главных героев – Зевса, явленного в виде Золотого дождя, и нагую красавицу. У Рембрандта история свидания Зевса с Данайей представлена как история сближения света с телесной материей. Свет выхватывает тело Данаи из мрака и заставляет его светиться. Даная, словно Луна, превращается в добычу света. Мифологический Зевс спасает Даная, вырывая ее из мрака заточения, куда она броше-

на злой волей своего отца. Как и свет разума, свет любви творит чудеса. Он спасает грешную плоть.

Спустя тридцать лет, уже перед самой смертью, Рембрандт доведет этот технический прием до предела совершенства. В 1668–1669 гг. он создает «Возвращение блудного сына» – картину, посвященную библейской истории отеческой любви, покаяния и спасения грешника. Как и в предыдущих случаях, свет и тень у Рембрандта выполняют великую нравственную миссию. Свет, исходящий от рук и лица отца-спасителя, падает на тело вернувшегося сына-бродяги и освобождает его от власти мрака, в котором пребывают некоторые другие герои повествования.

Мы не хотим утверждать здесь, что художественные образы Рембрандта повлияли на конкретные идеи Декарта. В хронологическом плане, скорее, именно Декарт мог повлиять на Рембрандта и других мастеров живописи в этой самой передовой стране западного мира того времени. Ясно одно, что творчество Рембрандта и натурфилософские представления Декарта существовали в одном и том же культурном пространстве. Верно, что работы Рембрандта можно считать иллюстрацией для 11-го и 12-го тезисов о свете в «Трактате о свете» Декарта. Но верно и другое. Тема света у Декарта, жившего в 1630–1640-е гг. в голландской культурной среде, была не случайной. Живописцы Нидерландов были настоящими реформаторами своего времени, и их язык был понятен широкой публике.

Еще несколько замечаний о работах Рембрандта. Если лицо доктора Тюльпа, божественный Золотой дождь и лик отца из библейской притчи выступают в качестве источников света – «светящихся тел», то труп из «Урока анатомии», Даная и Блудный сын выступают в качестве тел, которые оказываются у них на пути. Примечательно, что так называемая «сила света» в работах Рембрандта набирала силу с каждой картиной. Тело преступника из «Урока» освещено все целиком, кроме верхней части лица, которое остается напоминанием о былых прегрешениях. Даная обращена к свету лицом, но мрак продолжает торжествовать в покоях, где она томилась долгое время. Блудный сын открывает свету не только свое лицо, обращенное к любящему отцу, но и спину, которая остается повернутой к зрителю: он прощен и спасен силой света любви.



Свет у Рембрандта движется в воздушной среде и далее сталкивается с препятствием – греховной человеческой плотью. Казалось бы, свету не удастся преобразить такую материю. Но Рембрандт настаивает на том, что такое возможно. Свет разума и особенно свет любви способен совершить такое преобразование. Мельчайшие, невидимые глазу частицы света, наполняя воздух, передадутся непрозрачным телам и заставят их сиять отраженным светом.

Рембрандт показывает, что свет всегда побеждает. Если на его пути оказывается тело, оно обязательно будет извлечено из тьмы. С характерной декартовой оговоркой: «в зависимости от различного расположения или различных качеств материи, принимающей эти лучи». Иначе говоря, живые и ищущие света существа будут спасены и прощены. Для Декарта, нашедшего в Нидерландах свое земное спасение от бурь Тридцатилетней войны и иных потрясений века барокко, тема спасительной силы света превратилась в один из лейтмотивов всего его творчества.

Список литературы

1. *Shapin S.* The Scientific Revolution. Chicago: The Chicago University Press, 1996.
2. *Бернал Дж.Д.* Наука в истории общества. М.: Изд-во иностр. лит., 1956.
3. *Декарт Р.* Сочинения: В 2 т. М.: Мысль, 1989. Т.1. С.630 (примеч.).
4. Там же. С.237.
5. Там же. С.240.
6. *Heckscher W.S.* Rembrandt's Anatomy of Dr. Nicolaas Tulp. New York: New York University Press, 1958.
7. *Turner B.S.* Regulating Bodies: Essays in Medical Sociology. London: Routledge, 1992. P.205.

Б.А. Медведев КОММЕНТАРИЙ

Выступления философов возвращают нас к теме круглого стола, акцентируя наше внимание на целостном восприятии картины под названием «Человек и свет в естественно-научной и художественной картине мира». Человек... Он не бездушный наблюдатель, он участник космической эволюции.

Доклад Ю.М. Дуплинской посвящен фундаментальной попытке понять природу человека, феномен его сознания в контексте квантово-механического описания поведения частиц в микромире. Проводится аналогия между неопределенностью сознания человека «здесь» и «теперь»

и неопределенностью измерения координаты и импульса, энергии и времени жизни частицы. Как не сказать здесь о мышлении отдаленными категориями, которое по Лейбницу и определяет искусство открытия, и как же не вспомнить К.Г. Юнга: «Сознание – дискретный феномен». В картине мира у Ю.М. Дуплинской человек близок нам своими эмоциями и переживаниями.

В ярком выступлении С.П. Позднейвой представлен исторический фрагмент развития представления о цветовом зрении. «Цветовые восприятия находят свое отражение в психологических следствиях – как цветовая лексика различных языков». Еще не измеренная глубина таится в процитированных Светланой Павловной словах М. Мерло-Понти: «...Зрение – это род мышления...».

Эмоциональный доклад О.В. Шимельфенига обращает наше внимание не только на авторский подход к обсуждаемой проблеме, но и на аксиологический и нравственный аспекты познания природы. Разве Гёте своими строчками из Фауста: «О, как с природой наравне, быть человеком, человеком мне?», не современен размышлениям о науке и гуманности в выступлениях и статьях Эйнштейна, Шредингера, Де Бройля и Пригожина? Неужели, спросим мы себя, над нами всегда будет тяготеть ветхозаветное: «Во многом знании много печали...»? Я не могу здесь не обратиться к В. Далю: «Просвещение одною наукою, одного только ума, односторонне, и не ведет к добру», и далее у него же: «Просвещение – свет науки и разума, согреваемый чистою нравственностью». Таким образом, наша проблема не только в выпуске профессионалов, но и в умении воспитать гражданина с понятиями по Далю «об истине, доблести и долге».

Эссе Д.В. Михеля посвящено исследованию «возможности культурного влияния на Декарта со стороны нидерландской живописи». Не доклад, а именно эссе, на мой взгляд, поражает своей чистотой и высокой нравственностью. И здесь вспоминается обращение Нильса Бора «к вопросу о том, существует ли поэтическая, или духовная, или культурная истина, отличная от истины научной...» и слова Ф. Ницше, предлагающего «взглянуть на науку под углом зрения художника, на искусство же – под углом зрения жизни».



Б.А. Медведев
ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Уважаемые коллеги! Завершая работу нашего круглого стола, я возвращаюсь к его началу, вновь вспоминая мысль И. Бродского о том, что «человек ... является центром своей собственной вселенной» и, продолжим мы, поразительно, что эта вселенная излучает. Исследование физических полей человека Ю.В. Гуляевым и Э.Э. Годиком (Физические поля биологических объектов // Вестн. АН СССР. 1983. №8 С.118–125) привело к обнаружению излучения человека не только в радио и ИК диапазоне, но и в видимой области спектра с максимумом на длине волны зеленого света в 500 нм. И этот свет, обусловленный люминесценцией, сопутствующей процессам биохимических реакций на клеточном уровне и промодулированный всеми биологическими ритмами человека, попадает в область прозрачности атмосферы. Что же дальше? Да, человек уходит... Но не летит ли его свет к звездам? – Свет Леонардо да Винчи и Рафаэля, Шекспира и Сервантеса, Галилея и Ньютона...

Тема нашего круглого стола обращена не только к тем, кто видит в ней истоки развития креативности будущих специалистов в области междисциплинарных исследований, но и невольно к оппонентам гуманитаризации физического знания. И не пытаюсь кого-либо переубедить, тем не менее, хочется обратиться к строчкам Ф. Тютчева:

«Не то, что мните вы, природа,
Не слепок, не бездушный лик.
В ней есть душа, в ней есть свобода,
В ней есть любовь, в ней есть язык».

Не согласиться ли нам с Львом Шестовым: «Претензия разума на всеобъемлемость имеет вкус к ограниченности». И с Нильсом Бором: «Причина, почему искусство может нас обогатить, заключается в его способности напоминать нам о гармониях, недостижимых для систематического анализа». В творческом состоянии сознания ученого Разум – на границе Чувства, «мы воздухоплаватели ума» (Фридрих Ницше).

СТЕПАНЧУК ВИКТОР ПЕТРОВИЧ: к 80-летию со дня рождения

И.Н. Салий

Саратовский государственный университет,
кафедра радиотехники и электродинамики
E-mail:



Степанчуку Виктору Петровичу, доктору технических наук, профессору кафедры радиотехники и электродинамики физического факультета Саратовского государственного университета им. Н.Г. Чернышевского, 10 января 2009 года исполнилось 80 лет.

Виктор Петрович родился в деревне Новая Липовка Саратовского района Саратовской области в семье крестьянина. После окончания в 1947 г. Саратовского нефтяного техникума был направлен в г. Харьков для работы на нефтебазе сгонщиком регенеративного завода.

В мае 1948 г. он вернулся в Саратов и был принят в НИИ механики и физики при Саратовском госуниверситете (НИИМФ СГУ) на должность лаборанта. С этого момента вся трудовая жизнь Виктора Петровича связана с Университетом: без малого 61 год (пока!) он отдал служению науке, образованию и воспитанию молодежи! В 1949–1954 гг. В.П. Степанчук – студент физического факультета СГУ. Проработав один год старшим научным сотрудником НИИМФ СГУ, он в октябре 1955 г. поступает в аспирантуру по кафедре электроники, проучившись в которой два года, переводится на заочное отделение и работает старшим инженером проблемной лаборатории ядерной физики СГУ. А далее – педагогическая деятельность: старший



преподаватель, доцент кафедры общей физики (1966–1970 гг.); доцент кафедры электроники (1970–1973 гг.); заведующий кафедрой электро- и радиотехники (1973–1999); с сентября 1999 г. по настоящее время – профессор кафедры радиотехники и электродинамики. С 1976 г. по 1982 г. – декан физического факультета СГУ.

Еще в студенческие годы Виктор Петрович начал заниматься научной работой. «Исследование ленточного магнетрона», «исследование системы связанных клистронов», «исследование вывода энергии из электронных приборов сверхвысоких частот» – вот некоторые темы в области сверхвысоко-частотной электроники студенческих и аспирантских работ, в которых были получены первые серьезные научные результаты.

С 1961 г. открывается новая страница научной деятельности В.П. Степанчука: исследование циклического резонансного ускорителя электронов – микротрона. Эти работы выполнялись в тесном творческом контакте с руководителем микротронного направления в Институте физических проблем АН СССР проф. С.П. Капицей.

При активном творческом участии В.П. Степанчука и под его научным руководством достигнуты важные результаты по изучению физических процессов в микротроне и созданию действующих установок для научных и прикладных целей. В частности, получены соотношения для максимального коэффициента стабилизации частоты магнетрона ускоряющим резонатором микротрона, полосы захвата и мощности потерь в стабилизирующей системе. Составлены таблицы, содержащие соотношения для определения коэффициента стабилизации, полосы захвата и ВЧ мощности в резонаторе для различной длины линии связи при последовательной и параллельной нагрузке, а также различных типов развязки между магнетроном и ускоряющим резонатором (аттенюатор, ферритовый вентиль) и без развязки.

Особый интерес представляют теоретические и экспериментальные исследования микротрона на базе платинотрона. Получены соотношения для приближенного расчета и

анализа электрических характеристик системы возбуждения ускоряющего резонатора, использующей платинотрон с внешней цепью положительной обратной связи. Проведено исследование параметров ускоряющего резонатора с двумя элементами связи; установлена оценка максимальной длины цепи обратной связи, при которой обеспечивается работа СВЧ системы и другие исследования. Результаты экспериментальных исследований полностью подтвердили теоретические.

Важное место занимают исследования по созданию микротронов 3-сантиметрового диапазона длин волн; важным аспектом этого направления явился поиск новых режимов ускорения с более низким приростом энергии за оборот. Были предложены и рассчитаны режимы ускорения в цилиндрическом и прямоугольном резонаторах с термокатодом с приростом энергии за оборот примерно в 250 КэВ; проведено экспериментальное изучение этих режимов. Показана возможность осуществления в 3-сантиметровом микротроне внешней инжекции электронов с использованием пушки Кайно, что позволило решить проблему увеличения срока службы катода. Сформулированы требования к установке резонатора относительно магнитного поля и установке катода относительно резонатора, отработана методика совмещения медианной плоскости электромагнита со средней плоскостью резонатора. Экспериментально найден коэффициент захвата электронов для предложенного режима ускорения. Вычислено положение орбит электронов относительно центра резонатора; измерены поперечные размеры электронного пучка на 4, 8, 12, 16-й орбитах. Важным этапом явилось создание специальной конструкции электромагнита: на диаметре 37 см и зазоре между полюсами, равном 36 мм, была достигнута однородность магнитного поля не хуже 0.08%. Это позволило ускорить электроны до 35-й орбиты. Кроме этого была исследована зависимость ускоренного тока от числа орбит, разработана система вывода и осуществлен отбор электронов из вакуумной камеры с помощью выводного канала с компенсирующими обмотками.



Созданные под руководством В.П. Степанчука микротроны были поставлены в Ленинградский Центральный научно-исследовательский рентгено-радиологический институт Минздрава СССР, Саратовский онкологический диспансер, Ядерный Центр (г. Арзамас-16), Химико-технологический институт (г. Люберцы, Московской области) и в другие научные организации и промышленные предприятия.

Проведенные под руководством В.П. Степанчука совместно с ФГУП «НПП «Алмаз»» (г. Саратов) научно-исследовательские работы по применению микротрона в качестве имитатора электронного компонента и проникающей радиации космических ионизирующих излучений для изучения радиационной стойкости электронных приборов и материалов позволили получить результаты, внесшие весомый вклад в обеспечение надежности космических спутников связи серии «Молния», «Орбита» и «Радуга», многие из которых и сегодня активно функционируют на околоземной орбите. За заслуги перед отечественной космонавтикой Федерация космонавтики России наградила В.П. Степанчука медалью «К.Э. Циолковский» – одной из высших наград Федерации!

Выдающиеся работы В.П. Степанчука в области циклических резонансных ускорителей электронов стали классическими и широко известны в России и за рубежом. Косвенным подтверждением этого служит то, что 1-е Всесоюзное совещание по микротронам в рамках Научного Совета по ускорителям АН СССР было проведено в СГУ (1977 г.).

На протяжении ряда лет В.П. Степанчук был научным руководителем лаборатории ускорителей. С 2000 г. – научным руководителем созданного по его инициативе приказом ректора СГУ «Научно-учебного центра ядерной физики и ускорителей СГУ». В разные годы он был членом секции микротронов и индукционных ускорителей Научного Совета по ускорителям Академии наук СССР, членом правления Координационного Совета при Министерстве высшего образования РФ и председателем секции «Электроника СВЧ» этого Совета.

Научные исследования, выполненные В.П. Степанчуком и его учениками, координировались постановлениями Государственного Комитета по науке и технике СМ СССР, постановлениями Правительства и директивных органов, грантами РФФИ и другими программами. Под его научным руководством защищено 5 кандидатских диссертаций, им опубликовано свыше 120 работ, получено около 40 авторских свидетельств на изобретения и патентов России. Его изобретательская деятельность отмечена Знаком «Изобретатель СССР», а разработанные приборы – серебряными и бронзовыми медалями ВДНХ СССР.

Нет возможности в краткой заметке охарактеризовать в полном объеме педагогическую деятельность В.П. Степанчука: за более чем 50-летний стаж работы преподавателем он читал и читает общие лекционные курсы не только студентам физического, но и других факультетов; им разработаны и успешно прочитаны специальные курсы, основу многих из них составили результаты собственных научных исследований, написаны и изданы учебно-методические пособия, поставлены новые лабораторные работы и практикумы; руководство курсовыми и дипломными работами, привлечение студентов к научной работе... Всего не перечесать! Важно, что учебные поручения В.П. Степанчук рассматривает как главную составляющую своей работы. И выполняет ее с присущей ему полной самоотдачей и качественно, сначала учась у своих старших коллег, а потом показывая пример своим младшим товарищам.

Часто в подобного рода заметках используется речевой штамп: «... успешно сочетал научно-педагогическую деятельность с общественной работой...» Применительно к Виктору Петровичу ни о каком сочетании речи нет. Нужно говорить об активной жизненной позиции В.П. Степанчука, его принципиальности, честности и скромности, ибо это его органическая сущность. Видимо, по этой причине он (в разные годы) избирается секретарем бюро ВЛКСМ студентов и сотрудников факультета, членом и секретарем



партбюро факультета и парткома университета, первым секретарем Кировского райкома ВЛКСМ и членом Саратовского горкома ВЛКСМ, депутатом Кировского районного Совета депутатов трудящихся...

В.П. Степанчук был председателем секции «Электроника СВЧ» и членом правления Головного Совета при Министерстве общего и профессионального образования СССР, председателем научно-методического Совета по физике, математике, астрономии и космонавтике областного правления общества

«Знание», председателем правления Саратовского областного отделения Объединенного физического общества РФ, руководителем студенческого строительного отряда в ЧССР (лето 1968 г.), членом редколлегии университетской газеты «Ленинский путь»...

Многочисленные ученики, коллеги выражают свое восхищение и искреннее почтение Виктору Петровичу Степанчуку, желают ему долгих лет жизни, крепкого здоровья, семейного счастья и благополучия, успехов в работе, новых открытий и свершений.