



ФИЗИКА

УДК 537.86:519.2

СИНХРОННАЯ ДИНАМИКА НЕФРОННЫХ АНСАМБЛЕЙ

О. Н. Павлова, А. А. Анисимов, А. И. Назимов, А. Н. Павлов

Саратовский государственный университет
E-mail: pavlov.lesha@gmail.com

В работе изучается эффект синхронизации колебаний в динамике ансамблей нефронов. Показано, что в формировании кластеров синхронизации принимает участие большое число структурных элементов, расположенных на поверхности почки. Установлено, что размер кластеров меняется во времени и захват частот ритмов колебаний в коллективной динамике нефронов происходит только на определенных участках экспериментальных записей.

Ключевые слова: синхронизация, ритмические процессы, вейвлет-анализ.

Synchronous Dynamics of Nephrons Ensembles

O. N. Pavlova, A. A. Anisimov, A. I. Nazimov, A. N. Pavlov

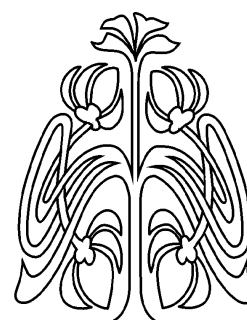
In this work, the phenomenon of synchronization of oscillations in the dynamics of nephronic ensembles is studied. It is shown that a large number of structural units on the kidney's surface participate in the formation of synchronous clusters. It is stated that the cluster's size changes in time and the frequency locking for rhythmic processes in the cooperative dynamics of nephrons occurs only during some parts of experimental recordings.

Key words: synchronization, rhythmic processes, wavelet-analysis.

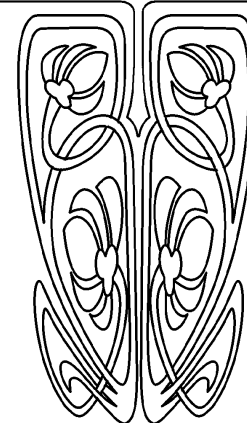
Введение

Синхронизация колебаний представляет собой наиболее важный механизм самоорганизации в динамике взаимодействующих систем [1–3]. Данный механизм проявляется в подстройке ритмов колебаний, которые приводят к эффектам захвата частот и фаз [4, 5]. С точки зрения классических представлений синхронизация состоит либо в стабилизации фазового сдвига между взаимодействующими колебательными процессами, либо в подавлении собственной динамики одной из систем. Взаимодействие нелинейных систем с хаотическим поведением способно демонстрировать значительно более широкий спектр явлений, которые можно рассматривать как частные случаи синхронной динамики.

Примерами служат полная синхронизация, обобщенная синхронизация, фазовая синхронизация и так называемая *lag*-синхронизация [3]. Поскольку любые системы в природе функционируют в присутствии шума, который может играть как негативную, так и конструктивную роль, приводя к качественно новым эффектам, в последние годы значительное внимание уделяется обобщению явления синхронизации на случай стохастических систем, в динамике которых принципиальное значение отводится флуктуациям [6]. Сегодня ясно, что синхронизация автоколебательных систем в присутствии шума представляет собой важный эффект с точки зрения биомедицинских приложений, давая ключ к разработке новых методов диагностики.



НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ





Эффекты синхронизации играют важную роль в функционировании нефронов – структурных элементов почки. Нефрон представляет собой объект размером порядка 100 мкм, принимающий участие в фильтрации крови, регуляции кровяного давления, контроле уровня электролитов и метаболитов, а также в поддержании постоянного уровня рН [7]. Для сравнения можно отметить, что почка человека содержит примерно 1000000, а почка крысы – около 30000 нефронов. Расположение нефронов визуально напоминает дерево [8], на «ветках» которого обычно находятся от одного до трех таких элементов. Организация нефронных «деревьев» в виде параллельных структур приводит к тому, что общий почечный кровоток делится между большим числом нефронов и на каждый из них приходится только очень малая часть потока крови, поступающего через почечную артерию [9].

Известно несколько механизмов авторегуляции почечного кровотока на уровне отдельных нефронов, одним из которых является так называемая канальцево-гломерулярная обратная связь (КГОС) [10, 11]. Данный механизм приводит к генерации автоколебаний с периодом примерно 30–40 с, которые регистрируются как в малых кровеносных сосудах (артериолах), так и в фильтрате, протекающем по канальцам нефрона. Согласно результатам экспериментальных исследований на крысах, соответствующие колебания отличаются в норме и при гипертонии – при нормальном артериальном давлении они являются почти периодическими, а при повышенном давлении (генетическая форма гипертонии или искусственно вызванная гипертония Голдблетта) эти колебания становятся сильно нерегулярными (хаотическими) [12–15].

Наряду с отличиями режима колебаний существенно отличаются и эффекты синхронизации в динамике парных нефронов нормотензивных и гипертензивных крыс – при повышенном давлении длительность участков захвата частот уменьшается примерно в 3–4 раза: с 12 периодов колебаний до 3–4 периодов [16, 17]. Кроме того, режим полной синхронизации, типичный для случая нормы,

сменяется режимом частичной синхронизации при патологии [17]. Учитывая существенные изменения, которые происходят в почечной авторегуляции кровотока при гипертонии, хаотизация колебаний нефронов и изменение эффектов взаимодействия ритмов их колебаний в последние годы вызывали значительный интерес исследователей. Однако до сих пор рассмотрение синхронизации в функционировании структурных элементов почки ограничивалось малыми ансамблями (парные нефроны и триплеты). Попытки изучения функционирования больших групп нефронов (в рамках нефронного дерева) осуществлялись лишь в рамках математического моделирования процесса авторегуляции [8]. Это объясняется сложностью экспериментальной процедуры одновременной регистрации сигналов большого числа структурных элементов.

В настоящей работе впервые предпринята попытка изучения синхронизации нескольких десятков нефронов, расположенных на поверхности почки. Показано, что эффект подстройки частот больших групп нефронов носит кратковременный характер, и впервые приведены данные экспериментов, согласно которым в формировании кластеров синхронной динамики принимают участие нефроны, относящиеся к различным «деревьям».

1. Методика исследования

1.1. Регистрация сигналов

Для изучения коллективного поведения больших ансамблей в институте Панум (университет Копенгагена, Дания) под руководством N.-H. Holstein-Rathlou была проведена серия экспериментов на крысах, в рамках которых проводилась регистрация динамики структурных элементов на поверхности почки. С этой целью использовалась инфракрасная камера, позволяющая по изменению температурного режима регистрировать скорость потока крови в артериолах. В результате получалась видеозапись динамики значительной части верхней поверхности почки (около 2/3); время эксперимента составляло 30 минут. Сложность извлечения информации из полученного видеофайла связана с



тем, что по нему нельзя установить, где находятся отдельные нефроны. Чтобы корректно идентифицировать расположение структурных элементов на поверхности почки, с помощью микроскопа была сделана фотография этой поверхности, позволяющая их идентифицировать. Путем наложения фотографии на изображение, регистрируемое видеокамерой, можно установить координаты расположения нефронов (в пикселях) и тем самым получить информацию, какие координаты выбрать для извлечения из видеофайла временной динамики, соответствующей каждому обнаруженному нефрону.

В ходе такой довольно сложной процедуры идентифицировались сигналы больших групп структурных элементов почки (от 40 до 100 в зависимости от эксперимента). Были зарегистрированы данные для 12 нормотензивных крыс с тем, чтобы вначале исследовать эффекты синхронизации и образования структур для случая нормы. Шаг дискретизации был выбран равным 1 с, поэтому на характерный период колебаний (ритм КГОС) приходилось от 30 до 40 отсчетов. Длительность записи (порядка 50 характерных периодов) была достаточной для отслеживания эволюции характеристик колебаний во времени. Данные были предоставлены для анализа проф. N.-H. Holstein-Rathlou и проф. D.J. Marsh.

1.2. Вейвлет-анализ экспериментальных данных

В качестве инструмента численного исследования структуры экспериментальных данных был выбран вейвлет-анализ. В отличие от классического спектрального анализа, основанного на преобразовании Фурье и оперирующего с гармоническими функциями, он допускает значительное разнообразие выбора базиса, по которому проводится разложение сигнала. В рамках широко используемой интерпретации вейвлет-анализа как метода «математического микроскопа» можно говорить о том, что выбор солитоноподобной функции $\psi(t)$, рассматриваемой в качестве базисной, аналогичен заданию разрешения для объектива микроскопа: если выбранное разрешение позволяет увидеть нужные детали, то вейвлет подходит для целей проводимого исследования.

Гармонические функции, применяемые в классическом спектральном анализе, заданы в диапазоне $t \in (-\infty, +\infty)$ и не позволяют изучать локальные изменения структуры сигналов. Расчет спектра мощности сигнала $x(t)$ обеспечивает возможность определения частотного состава рассматриваемого процесса и выявления характерных ритмов колебаний. Такой расчет позволяет установить сам факт наличия колебаний определенной частоты, но не дает ответа на вопрос: когда существовали эти колебания – на протяжении всего времени регистрации сигнала или только на каком-то участке? Бесконечно осциллирующие функции не могут использоваться при проведении локализованного спектрального анализа [18, 19].

Вейвлеты обладают рядом характерных признаков, включающим: 1) локализацию функции и по времени, и по частоте; 2) конечную энергию; 3) автомодельность (самоподобие) базиса. Эти признаки определяют большой класс вещественных и комплексных функций, которые применяются при решении различных задач. Например, при проведении локального спектрального анализа процессов с меняющимися во времени характеристиками применяют комплексные вейвлеты, наиболее популярным из которых является вейвлет Морле, хорошо локализованный как по времени, так и по частоте:

$$\psi(t) = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{j2\pi f_0 t} e^{-t^2/2}. \quad (1)$$

В этой формуле f_0 – параметр, называемый центральной частотой. После выбора «материнского вейвлета» $\psi(t)$ на его основе формируется базис путем масштабных преобразований и смещений данной функции:

$$\psi_{a,b}(t) = \frac{1}{\sqrt{a}} \psi\left(\frac{t-b}{a}\right), \quad (2)$$

где $a \in R$, $a \neq 0$ – масштабный коэффициент, $b \in R$ – параметр смещения. Множитель $1/\sqrt{a}$ осуществляет нормировку энергии каждой функции $\psi_{a,b}(t)$ для обеспечения неизменного значения энергии при изменении масштаба.



Непрерывное вейвлет-преобразование сигнала $x(t)$, определенного во временной области $-\infty < t < \infty$, имеет следующий вид:

$$W(a, b) = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} x(t) \psi^* \left(\frac{t-b}{a} \right) dt = \quad (3) \\ = \int_{-\infty}^{\infty} x(t) \psi_{a,b}^*(t) dt.$$

В результате преобразования (3) получается поверхность коэффициентов $W(a, b)$ в трехмерном пространстве. Чтобы получить информацию об особенностях структуры исследуемого сигнала, используют разные варианты ее визуализации. Традиционный подход состоит в рассмотрении проекции поверхности коэффициентов на плоскость ab и изображении интенсивности амплитуд вейвлет-преобразования различными оттенками цвета. Более простой (но весьма информативный) способ визуализации применяется для идентификации мгновенных характеристик (амплитуды, частоты, фазы) ритмических процессов. Его называют построением «хребтов» вейвлет-преобразования [19]. Хребты строятся для поверхности плотности энергии сигнала $E(a, b) = |W(a, b)|^2$, представляя собой линии локальных максимумов этой поверхности (идентифицируемые в каждый фиксированный момент времени $b = t^*$).

При анализе динамики мгновенных частот вместо поверхности $E(a, b)$ удобно рассматривать $E(f, b)$, то есть осуществлять переход к частотному представлению энергетического спектра. В случае вейвлета Морле (1) выполняется приближенное равенство $f \approx f_0 / a$, если $f_0 \gg 0$. Так как каждая точка хребта ассоциируется с локальным энергетическим спектром, нахождение мгновенных частот колебательных процессов одновременно обеспечивает и определение мгновенных амплитуд этих процессов. Именно такой вариант визуализации вейвлет-преобразования будет использоваться в данной работе.

2. Результаты

2.1. Формирование кластеров когерентных колебаний

Рассмотрим вначале усредненную динамику – поведение средних частот генерации колебаний различными нефронами, рас-

положенными на поверхности почки. На рис. 1 изображена плотность распределения вероятности частоты КГОС для одного из экспериментов, в ходе которого были зарегистрированы данные 63 структурных элементов почки. Процедура построения плотности распределения вероятности состояла в следующем: вначале по экспериментальным данным вычислялись энергетические спектры (с помощью вейвлет-преобразования), затем определялось положение максимума каждого энергетического спектра (пика на частоте колебаний КГОС), после чего полученные значения использовались для построения функции $P(f)$.

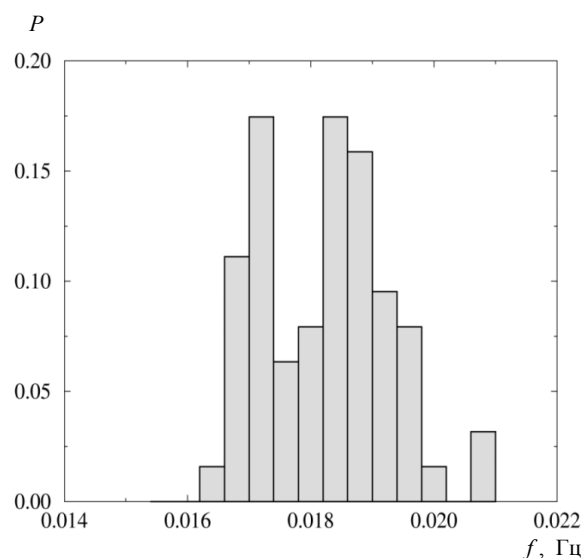


Рис. 1. Распределение частоты TGF-колебаний для 63 нефронов, расположенных на поверхности почки

Согласно рис. 1 можно идентифицировать, по крайней мере, две группы нефронов, которые демонстрируют колебания с разными частотами. Однако рис. 1 не дает оснований говорить о наличии синхронной динамики для этих двух групп. Чтобы вести речь о синхронизации, необходимо проиллюстрировать наличие эффекта захвата частот или фаз колебаний (что будет сделано позднее). Поэтому на данном этапе целесообразно использовать терминологию когерентности рассматриваемых колебаний.

Наличие двух четко выраженных пиков в распределении позволяет провести разделение нефронов на две группы (кластеры, в



пределах которых наблюдается когерентная динамика). Это можно сделать либо вручную, задав диапазон частот для каждого кластера, либо воспользовавшись стандартными алгоритмами кластеризации, например методом k -средних [20]. Отметим, что воспользовавшись этими подходами, мы получили идентичные результаты, представленные на рис. 2. На этом рисунке по осям отложены координаты нефронов на поверхности почки в пикселях (идентифицируемые по фотографии, сделанной с помощью микроскопа), а разными символами показаны нефроны, демонстрирующие колебания с отличающимися средними значениями частоты ритма, обусловленного механизмом КГОС. Изображенная на рис. 2 область включает значительную часть верхней поверхности почки (примерно 2/3).

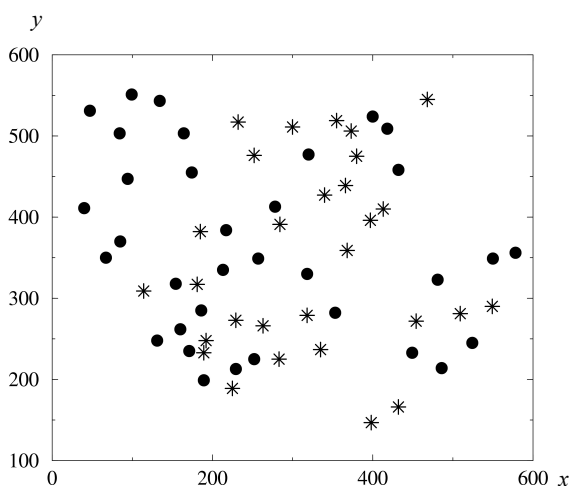


Рис. 2. Идентификация двух кластеров когерентной динамики с помощью алгоритма k -средних. Кластеры обозначены разными символами

Обращают на себя внимание следующие обстоятельства:

- 1) кластеры когерентной динамики нефронов не являются локализованными на поверхности почки и могут включать нефроны, расположенные на значительном расстоянии друг от друга;
- 2) в формировании одного кластера участвует большое количество нефронов (несколько десятков).

Отмеченные эффекты до сих пор были неизвестны – считалось, что подстройка ритмов колебаний возможна лишь для соседних

элементов, расположенных на одном нефронном «дереве». Обнаружение когерентных колебаний больших ансамблей нефронов свидетельствует о возможном существовании механизмов взаимодействия между разными «деревьями». Разделение нефронов на кластеры синхронной динамики может сталкиваться с некоторыми проблемами (на самом деле принадлежность нефронов различным кластерам может меняться в зависимости от правил, по которым мы разделяем структурные элементы). Однако это не принципиально влияет на выводы проводимых исследований.

Анализ средних значений частоты ритма КГОС является не очень показательным, поскольку не позволяет установить, как ведут себя во времени мгновенные характеристики колебательных процессов, и демонстрируют ли они эффект подстройки своих значений. В связи с этим далее рассмотрим динамику мгновенных частот колебаний.

2.2. Анализ эффекта синхронизации нефронных ансамблей

Поведение во времени мгновенных значений частоты колебаний, обусловленных механизмом КГОС, и коллективное поведение ансамблей нефронов изучались с помощью вейвлет-анализа, включая описанную в параграфе 1.2 методику вычисления энергетических спектров и построения «хребтов». На рис. 3 для наглядности изображен пример вычислений только для трех нефронов из числа тех, для которых наблюдаются когерентные колебания. Как видно из этого рисунка, мгновенные частоты меняются случайным образом на участке до 600 с и показывают синхронную динамику на временах более 600 с.

Наряду с иллюстрацией динамики отдельных нефронов важно провести статистический анализ, показывающий, какая часть нефронов может принимать участие в синхронизации колебаний и насколько длительные участки синхронной динамики могут быть зарегистрированы в экспериментах.

На рис. 4 изображена динамика 40 выделенных нефронов с поверхности почки (данные другого эксперимента). Черными точками показан случай синхронного режима, а имен-

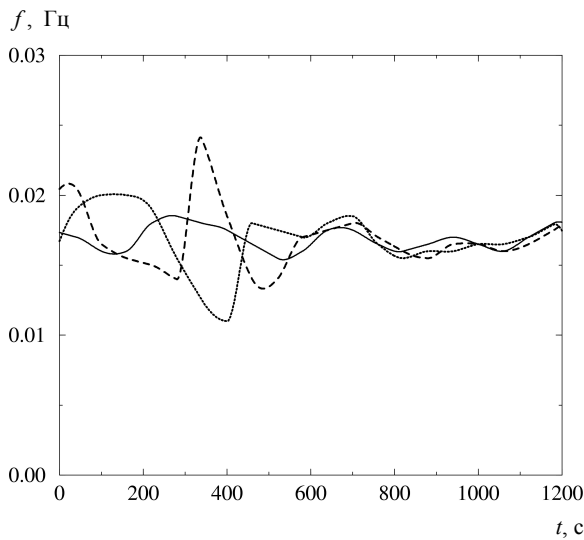


Рис. 3. Динамика мгновенных частот трех нефронов, расположенных на поверхности почки

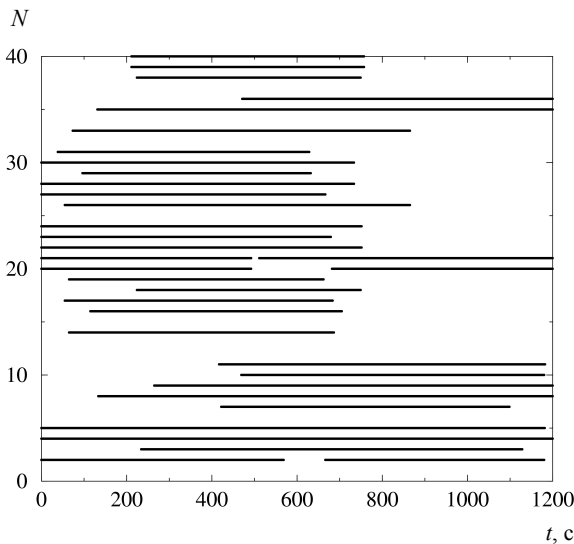


Рис. 4. Длительности участков синхронизации для каждого индивидуального нефрона (черные линии). По оси ординат отложен номер нефрона

но ситуация, когда каждый индивидуальный нефрон синхронизирует колебания, по крайней мере, еще с одним нефроном в течение не менее 10 периодов колебаний (при этом возможно, что синхронизация наблюдается с несколькими нефронами или даже несколькими десятками нефронов). Отметим, что большинство нефронов принимает участие в формировании синхронных кластеров. Полностью несинхронное поведение структурных элементов почки представляет собой редкий случай.

Рассмотрим теперь поведение мгновенных частот колебаний для большой группы нефронов (всех, которые удается зарегистрировать в эксперименте). Пример динамики большого ансамбля представлен на рис. 5, где показано, что в рассматриваемом случае (в отличие от эксперимента, результаты которого были изображены на рис. 1), можно говорить о существовании одного кластера, который формируется в окрестности 400 с и 900 с. Причем важно отметить, что в его формировании участвуют несколько десятков нефронов (около 40–50 из сигналов 58 зарегистрированных структурных элементов почки). Это служит основанием для того, чтобы считать, что в синхронизации колебаний участвуют нефроны, относящиеся к разным «деревьям». Кроме того, из результатов, представленных на рис. 5, следует, что формирование кластеров и их разрушение может происходить с определенной периодичностью, приблизительно соответствующей диапозону очень медленных ритмов авторегуляции кровотока [21, 22].

Подход, основанный на выделении мгновенных частот ритмов колебаний с помощью вейвлетов для группы нефронов, является весьма информативным и эффективным. Он позволяет определить длительность участков синхронизации для больших групп нефронов, интервалы времени между последовательными группировками (подстройкой) мгновенных частот ритмов колебаний. Учи-

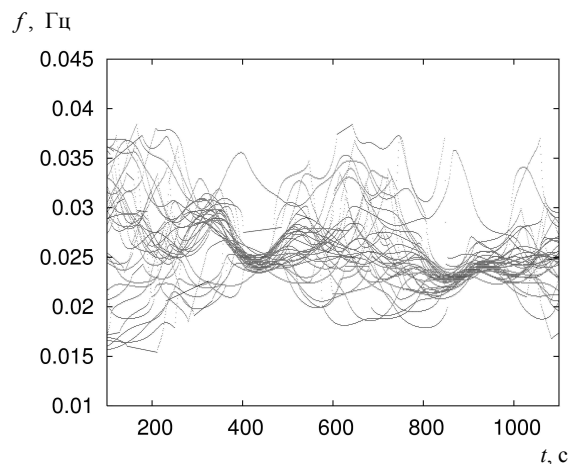


Рис. 5. Эволюция во времени мгновенных частот колебаний ансамбля нефронов. Четко видно формирование кластеров синхронных колебаний в окрестности 400 и 900 с



тывая, что периоды между участками синхронизации (см. рис. 5) приближенно соответствуют периодике очень медленных ритмов, отмеченных в работе [22], можно предложить возможную интерпретацию очень медленных колебательных процессов как ритмов, вызванных коллективной динамикой больших нефронных ансамблей. Обоснование данной гипотезы требует более детального дальнейшего исследования и набора статистики.

Заключение

В рамках данной работы проводилось исследование коллективной динамики больших групп нефронов, расположенных на поверхности почки. В ходе специальных экспериментов, проводившихся в институте Панум (университет Копенгагена, Дания), были зарегистрированы сигналы потока крови в артериолах нефронов с помощью инфракрасной камеры, позволившие выделить по 40–100 нефронов в каждом эксперименте. Далее с помощью метода вейвлет-анализа были получены частотно-временные спектры, по которым можно было выделить мгновенные частоты ритмов колебаний, обусловленных механизмом КГОС. Построение полученных частотных зависимостей на одном графике позволяет определить участки времени, в течение которых часть нефронов синхронизует свои колебания, и мгновенные частоты соответствующих ритмов подстраиваются. Основные результаты проводившихся исследований состоят в следующем:

1) установлено существование кластеров синхронной динамики нефронов на поверхности почки, в формировании которых участвуют структурные элементы, относящиеся к разным нефронным «деревьям»;

2) показано, что размер кластеров меняется во времени, и захват частот ритмов колебаний в коллективной динамике нефронов происходит только на определенных участках экспериментальных записей;

3) показано, что формирование кластеров может происходить с некоторой периодичностью, приближенно соответствующей динамике очень медленных ритмов колебаний [22].

Это позволяет выдвинуть гипотезу о том, что появление очень медленных ритмов почечной авторегуляции может быть обусловлено коллективной динамикой больших нефронных ансамблей.

Авторы выражают признательность N.-H. Holstein-Rathlou и D. J. Marsh за предоставленные данные, а также О. В. Сосновцевой за многочисленные дискуссии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Федерального агентства по образованию в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы.

Список литературы

1. Блехман И. И. Синхронизация динамических систем. М. : Наука, 1971.
2. Kuramoto Y. Chemical oscillations, waves and turbulence. Berlin : Springer-Verlag, 1984.
3. Pikovsky A., Rosenblum M., Kurths J. Synchronization: a universal concept in nonlinear sciences. Cambridge nonlinear science. Ser. 12. Cambridge : Cambridge University Press, 2001.
4. Anishchenko V. S., Vadivasova T. E., Postnov D. E., Safonova M. A. Synchronization of Chaos // Intern. J. of Bifurcation and Chaos. 1992. Vol. 2. P. 633–644.
5. Rosenblum M., Pikovsky A., Kurths J. Phase synchronization of chaotic oscillations // Phys. Rev. Lett. 1996. Vol. 76. P. 1804–1807.
6. Anishchenko V. S., Astakhov V. V., Neiman A. B., Vadivasova T. E., Schimansky-Geier L. Nonlinear dynamics of chaotic and stochastic systems. Berlin : Springer-Verlag, 2002.
7. Физиология человека / под ред. Р. Шмидта, Г. Тевса. М. : Мир, 1996.
8. Marsh D. J., Sosnovtseva O. V., Mosekilde E., Holstein-Rathlou N.-H. Vascular coupling induces synchronization, quasiperiodicity, and chaos in a nephron tree // Chaos. 2007. Vol. 17. P. 015114.
9. Layton H. E., Pitman E. B., Moore L. C. Limit-cycle oscillations and tubuloglomerular feedback regulation of distal sodium delivery // Amer. J. Physiol. Renal Physiol. 2000. Vol. 278. P. F287–F301.
10. Leyssac P.P. Further studies on oscillating tubuloglomerular feedback responses in the rat kidney // Acta Physiol. Scand. 1986. Vol. 126. P. 271–277.
11. Dilley J.R., Arendshorst W.J. Enhanced tubuloglomerular feedback activity in rats developing spontaneous hypertension // Amer. J. Physiol. Renal Fluid Electrolyte Physiol. 1984. Vol. 247. P. F672–F679.
12. Holstein-Rathlou N.-H., He J., Wagner A. J., Marsh D. J. Patterns of blood pressure variability in normotensive and hypertensive rats // Amer. J. Physiol. Regul. Integr. Comp. Physiol. 1995. Vol. 269. P. R1230–R1239.
13. 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.



14. Yip K.-P., Holstein-Rathlou N.-H., Marsh D. J. Chaos in blood flow control in genetic and renovascular hypertensive // Amer. J. Physiol. Renal Fluid Electrolyte Physiol. 1991. Vol. 261. P. F400–F408.
15. Yip K.-P., Marsh D. J., Holstein-Rathlou N.-H. Low dimensional chaos in renal blood flow control in genetic and experimental hypertension // Physica D. 1995. Vol. 80. P. 95–104.
16. Sosnovtseva O. V., Pavlov A. N., Mosekilde E., Holstein-Rathlou N.-H. Synchronization phenomena in multimode dynamics of coupled nephrons // Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика. 2003. Т. 11, № 3. С. 133–147.
17. Sosnovtseva O. V., Pavlov A. N., Mosekilde E., Yip K.-P., Holstein-Rathlou N.-H., Marsh D. J. Synchronization among mechanisms of renal autoregulation is reduced in hypertensive rats // Amer. J. Physiol. Renal Physiol. 2007. Vol. 293. P. F1545–F1555.
18. Mallat S. G. A wavelet tour of signal processing. N. Y. : Academic Press, 1998.
19. Addison P. S. The illustrated wavelet transform handbook : applications in science, engineering, medicine and finance. Bristol ; Philadelphia : IOP Publishing, 2002.
20. Hartigan J. A. Clustering algorithms. N. Y. : John Willey & Sons, 1975.
21. Pavlov A. N., Makarov V. A., Mosekilde E., Sosnovtseva O. V. Application of wavelet-based tools to study the dynamics of biological processes // Briefings in Bioinformatics. 2006. Vol. 7. P. 375–389.
22. Pavlov A. N., Sosnovtseva O. V., Pavlova O. N., Mosekilde E., Holstein-Rathlou N.-H. Characterizing multimode interaction in renal autoregulation // Physiological Measurement. 2008. Vol. 29. P. 945–958.

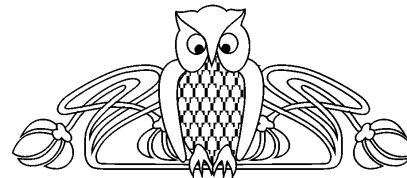
УДК 535.345.1

АНАЛИЗ НЕСТАЦИОНАРНЫХ СВОЙСТВ КОГЕРЕНТНОГО ПЛЕНЕНИЯ НАСЕЛЁННОСТЕЙ В ЧАСТОТНО-МОДУЛИРОВАННЫХ ПОЛЯХ

В. Л. Дербов, И. Л. Пластун*, А. А. Оруджев*

Саратовский государственный университет
E-mail: derbovvl@gmail.com

* Саратовский государственный технический университет
E-mail: inna_pls@mail.ru



На основе численного моделирования исследуется динамика населённости уровней трёхуровневой Λ -системы в условиях проявления резонанса когерентного пленения населённости (КПН). Численная модель основана на уравнениях для матрицы плотности в приближении вращающегося поля с учетом релаксации. Рассматривается случай, когда одно из резонансных полей модулировано по частоте. Медленная модуляция частоты поля равносильна пошаговому изменению частоты накачки. Поскольку период модуляции сравним с атомными временами релаксации, то возникает задержка отклика среды, вызывающая, в свою очередь, сдвиг и деформацию резонанса КПН, а также появление нестационарных осцилляций населённости энергетических уровней.

Ключевые слова: когерентное пленение населённости, Λ -система, частотная модуляция, матрица плотности, нестационарное поведение, населённости уровней.

Non-Stationary Coherent Population Trapping in Frequency-Modulated Fields

V. L. Derbov, I. L. Plastun, A. A. Orudjev

Coherent population trapping (CPT) resonance formation is modeled numerically in a three-level Λ -system with one of the near-resonance fields being frequency-modulated. The model is based on density matrix equations in RW approximation with atomic relaxation properly taken into account. Slow modulation is shown to be equivalent to CW excitation with the frequency changed point by point. As the modulation

period approaches the relaxation times, the delayed response of the system is shown to cause the CPT resonance shift and reshaping, as well as the appearance of transient oscillations of the energy level populations.

Key words: coherent population trapping, Λ -system, frequency modulation, density matrix, non-stationary behavior, energy level populations.

Когерентное пленение населённости (КПН), наблюдаемое в трёхуровневых системах с двойным резонансом, представляет собой такое состояние, когда система практически не взаимодействует с полем, в результате чего атомы не могут поглощать или испускать резонансные фотоны и в спектре флуоресценции появляется провал, или так называемая «чёрная линия» (см., например, [1–4]). Это особое суперпозиционное состояние достигается только при определенных значениях частотных расстроек и интенсивностях световых волн и присуще только системам, в которых есть условия для интерференции нескольких каналов возбуждения.



Эффект КПН используется в методах спектроскопии сверхвысокого разрешения [2], основанных на нелинейном когерентном взаимодействии атомной системы с падающим электромагнитным излучением и последующем анализе тонкой структуры отклика, несущего информацию о спектральных характеристиках квантовой системы, при построении атомных часов [3] и в других применениях.

Одной из простейших трёхуровневых систем, где наблюдается резонанс КПН, является так называемая Λ -схема энергетических уровней среды, взаимодействующая с двумя световыми волнами. При этом поле накачки резонансно с переходом 1–3, а зондирующее поле – с переходом 2–3 (рис. 1).

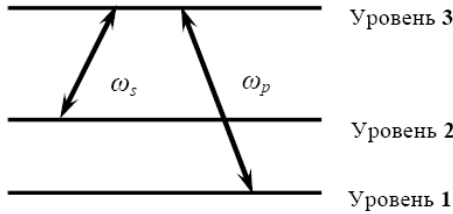


Рис. 1. Λ -схема энергетических уровней среды

Резонанс КПН возникает в случае, когда отстройки частот световых волн от частот соответствующих смежных переходов равны друг другу [1].

Таким образом, для наблюдения резонанса КПН можно зафиксировать частоту

одного лазера и изменять частоту другого. В данном исследовании мы рассматриваем это изменение как процесс, происходящий в реальном времени, иначе говоря, излучение второго лазера модулируется по частоте и населённость верхнего энергетического уровня исследуется в зависимости от времени и мгновенного значения частоты. Было обнаружено, что когда период модуляции приближается к величинам порядка времён атомной релаксации, задержка отклика атомной системы проявляется в виде нестационарных явлений и во временной, и в частотной зависимостях заселённости верхнего уровня. Такие явления могут служить источником дополнительной информации о релаксационных свойствах системы.

Рассматривалась трёхуровневая система с энергетическими уровнями $E_1 < E_2 < E_3$ (Λ -схема уровней (см. рис. 1)), возбуждаемая двумя лазерными полями на частотах $\omega_p \approx \omega_{31}$ и $\omega(t) = \omega_s + \omega_1 \sin \Omega t \approx \omega_{32}$, где $\omega_{ij} = (E_i - E_j)/\hbar$ – частоты переходов, ω_s – несущая частота частотно-модулированного лазера, ω_1 и Ω – амплитуда и частота модуляции соответственно.

Состояние трёхуровневой квантовой системы, взаимодействующей с внешним электромагнитным полем, описывается системой уравнений для элементов матрицы плотности ρ_{ij} в приближении вращающегося поля:

$$\dot{\tilde{\rho}}_{21} = \frac{1}{i}(\omega_{21} - (\omega_p - \omega_s) - i\gamma_{12})\tilde{\rho}_{21} + \frac{1}{\hbar i}((\tilde{\rho}_{31}(V_s^-)_{23} - \tilde{\rho}_{32}^*(V_p^+)_{31}), \quad (1)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{31} = \frac{1}{i}(\omega_{31} - \omega_p - i\gamma_{13})\tilde{\rho}_{31} + \frac{1}{\hbar i}((\rho_{11} - \rho_{33})(V_p^+)_{21} + \tilde{\rho}_{21}(V_s^+)_{32}), \quad (2)$$

$$\dot{\tilde{\rho}}_{32} = \frac{1}{i}(\omega_{32} - \omega_s - i\gamma_{32})\tilde{\rho}_{32} + \frac{1}{\hbar i}((\rho_{22} - \rho_{33})(V_s^+)_{32} + \tilde{\rho}_{21}^*(V_p^+)_{31}), \quad (3)$$

$$\dot{\rho}_{11} = \frac{1}{\hbar i}((V_p^-)_{13}\tilde{\rho}_{31} - (V_p^-)_{13}^*\tilde{\rho}_{31}^*) + W_{21}\rho_{22} + W_{31}\rho_{33}, \quad (4)$$

$$\dot{\rho}_{22} = \frac{1}{\hbar i}((\tilde{\rho}_{32}(V_s^-)_{23} - \kappa.c.) + W_{32}\rho_{33} - W_{21}\rho_{22}), \quad (5)$$

$$\dot{\rho}_{33} = \frac{1}{\hbar i}((-\tilde{\rho}_{31}(V_p^-)_{13} + \kappa.c. - \tilde{\rho}_{32}(V_s^-)_{23} + \kappa.c.) - W_{32}\rho_{33} - W_{31}\rho_{33}), \quad (6)$$



где *к.с.* означает величину, комплексно сопряженную по отношению к предыдущему слагаемому.

Данная система уравнений отличается корректным учетом релаксации во всех каналах, то есть в ней учтены как все ширины линий переходов, связанные с временами поперечной релаксации, так и все вероятности спонтанных переходов, ответственные за релаксацию заселенностей. Такая модель описывает замкнутую систему атомных уровней, у которой нижний уровень является основным состоянием, а полная заселенность (сумма диагональных элементов матрицы плотности) сохраняется и равна единице.

В системе (1)–(6) медленные огибающие недиагональных элементов матрицы плотности определяются как $\rho_{21} = \tilde{\rho}_{21} \exp(-i(\omega_p - \omega_s)t)$, $\rho_{31} = \tilde{\rho}_{31} \exp(-i\omega_p t)$, $\rho_{32} = \tilde{\rho}_{32} \exp(-i\omega_s t)$, γ_{ij} – ширины линий переходов, W_{ij} – скорости релаксации переходов. Медленные огибающие операторов взаимодействия выражаются через элементы матрицы дипольных моментов переходов d_{ij} и комплексные амплитуды полей $E_{p,s}^0$: $(V_{p,s}^+)_{ij} = -d_{ij} E_{p,s}^0$, $(V_{p,s}^-)_{ij} = -d_{ij} E_{p,s}^{0*}$. В начальный момент времени предполагается, что атом находится в основном состоянии: $\rho_{11}(0) = 1$, $\rho_{ij}(0) = 0$, $i, j \neq 1$. Поле E_s^0 модулировано по фазе: $E_s^0 = A \exp[i(\omega_1/\Omega) \cos \Omega t]$, в то время как E_p^0 остаётся постоянным.

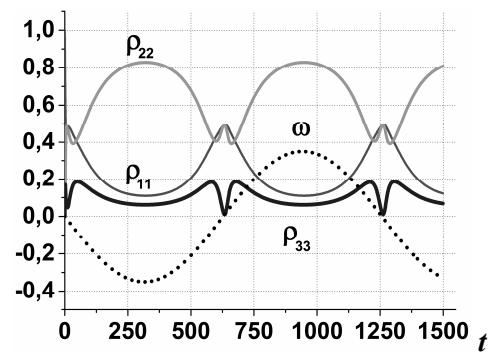
Система уравнений (1)–(6) решалась численно при помощи метода Рунге–Кутты 4-го порядка.

После включения полей и последующего нестационарного переходного процесса мы наблюдаем установление периодических изменений населённостей уровней, синхронизированных с модуляцией частоты. В используемой численной модели частотные изменения измерялись в единицах γ_{31} , поэтому $\gamma_{31} = 1$ и единицей времени является $2\pi/\gamma_{31}$. Мы полагаем $\hbar = 1$, в этом случае легко убедиться, что при $d_{13} = 1$ амплитуда $E_p^0 = 0.5$ соответствует интенсивности насыщения, то есть интенсивности, которая вызывает уменьшение разницы заселённостей в два раза.

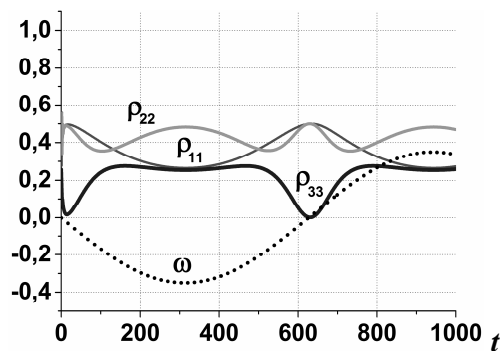
Для удобства сравнения результатов расчета стационарного и нестационарного

КПН выбор численных значений параметров квантовой системы осуществлялся в соответствии с примерами, рассмотренными в обзоре [1], а именно частоты переходов $\omega_{21} = 4$, $\omega_{31} = 6$, $\omega_{32} = 2$, дипольные моменты всех переходов $d_{ij} = 1$, параметры релаксации: $\gamma_{31} = \gamma_{32} = 1$, $\gamma_{21} = 0,0001$, $W_{31} = W_{32} = 0,5$, $W_{21} = 0,0001$. Значения несущих частот полей $\omega_p = 6$, $\omega_s = 2$ соответствовали условию точного резонанса обоих полей с соответствующими переходами.

Для сравнения с результатами расчета резонансов КПН в стационарном режиме начнем с рассмотрения очень медленной модуляции, период которой гораздо больше, чем характерные времена релаксации в системе. В примере, показанном на рис. 2, частота модуляции $\Omega = 0,005$, амплитуда модуляции $\omega_1 = 3,5$. Амплитуды полей взяты одинаковыми. На рис. 2, *а* показан случай относительно слабого насыщения $E_p = A = 0,5$, а на рис. 2, *б* – случай умеренного насыщения $E_p = A = 1,5$.



а



б

Рис. 2. Зависимость от времени заселённостей уровней ρ_{33} , ρ_{22} , ρ_{11} и частотной отстройки $\omega(t) - \omega_s = \omega_1 \sin \Omega t$ в случае слабого ($E_p = A = 0.5$) (*а*) и среднего ($E_p = A = 1.5$) (*б*) насыщения



Проследим за показанной на рис. 2 зависимостью населенностей уровней от времени. Видно, что населенность $\rho_{33}(t)$ резко падает в момент прохождения частотной отстройки через ноль (резонанс КПН) и плавно снижается между нулями (уход частоты на крыло линии). При увеличении амплитуды поля (см. рис. 2, б) резонансы КПН уширяются вместе со всей линией резонансной флуоресценции по причине эффекта насыщения. Глубина резонанса КПН увеличивается, и в его минимуме достигается почти идеальное пленение населенностей, то есть почти нулевая населенность верхнего уровня 3.

Рассмотрим эффекты, возникающие с увеличением частоты модуляции до значений, сравнимых со скоростями релаксационных процессов. Оставив без изменения параметры, соответствующие точному резонансу несущих частот и умеренному насыщению $E_p = A = 0,5$, а также амплитуду частотной модуляции $\omega_1 = 3,5$, увеличим в десять частоту модуляции и положим $\Omega = 0,05$ (рис. 3, а). Хорошо видно, что острые минимумы $\rho_{33}(t)$ теперь появляются с запаздыванием относительно моментов прохождения переменной добавки к частоте поля E_s через нулевые значения. Так как амплитуда сканирования частоты достаточно велика, время прохождения сканируемой частоты через резонанс с атомами среды составляет небольшую часть периода модуляции. Поэтому эффект в определенной степени аналогичен действию периодической последовательности коротких импульсов, за каждым из которых следует затухающий переходный процесс типа оптической нутации. При общем усложнении временной картины взаимодействия нужно отметить, что минимальное значение ρ_{33} , характеризующее степень КПН, с ростом частоты модуляции растет, то есть быстрая модуляция частоты ухудшает условия для КПН. Провалы в зависимости $\rho_{33}(t)$ не только сдвигаются, но и сглаживаются. При высоких частотах модуляции $\Omega = 0,05$ эффект КПН практически исчезает (рис. 3, б).

Из рис. 3, а видно, что острые минимумы $\rho_{33}(t)$ появляются с запаздыванием относительно моментов прохождения переменной добавки к частоте поля E_s через нулевые зна-

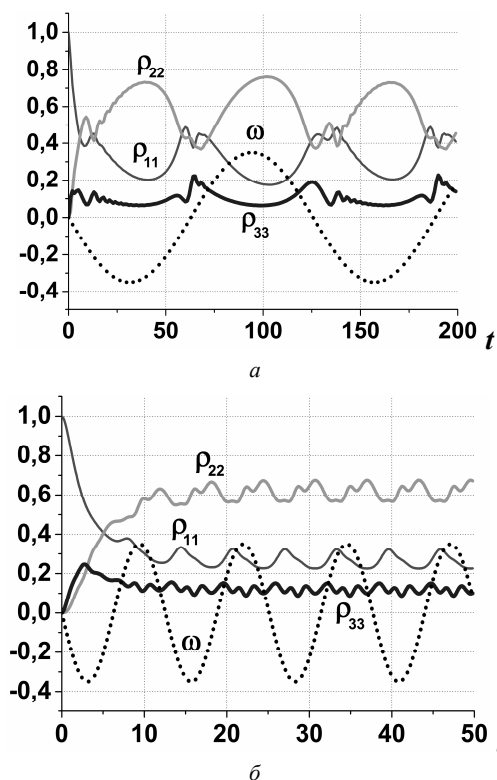


Рис.3. Зависимость от времени заселённости уровней ρ_{33} , ρ_{22} , ρ_{11} и частотной отстройки $\omega(t) = \omega_s + \omega_1 \sin \Omega t$ в случае слабого насыщения ($E_p = A = 0,5$) при высокочастотной модуляции $\Omega = 0,05$ (а) и $\Omega = 0,5$ (б)

чения. Эффект в этом смысле похож на действие серии коротких импульсов, за каждым из которых следует затухающий переходный процесс типа оптической нутации. При общем усложнении временной картины взаимодействия нужно отметить, что минимальное значение ρ_{33} , характеризующее степень КПН, с ростом частоты модуляции растет, то есть быстрая модуляция частоты ухудшает условия для КПН, провалы в зависимости $\rho_{33}(t)$ не только сдвигаются, но при этом еще становятся менее острыми и глубокими. При высоких частотах модуляции $\Omega = 0,5$ эффект КПН практически исчезает (рис. 3, б).

Таким образом, на основе численного решения уравнений для матрицы плотности известный эффект формирования резонанса когерентного пленения населенностей в трехуровневой квантовой системе, возбуждаемой двумя квазирезонансными полями по Λ -схеме, впервые рассмотрен как нестационарный процесс, происходящий при модуляции частоты одного из полей в реальном времени. В случае медленной модуляции



воспроизведены ранее описанные другими авторами особенности формирования резонанса КПН. При росте частоты модуляции продемонстрированы нестационарные эффекты, связанные с запаздыванием отклика среды на изменение мгновенной частоты модулированного поля. В дальнейшем планируется исследование резонансов КПН в случае пространственно-временной модели [5], реализующей распространение модулированных лазерных сигналов в среде с насыщением поглощения и дисперсии.

Отличием от предыдущих исследований является частотная модуляция одного из полей в реальном времени. При медленной модуляции воспроизведены эффекты формирования резонанса КПН. При росте частоты модуляции продемонстрированы нестационарные эффекты, связанные с запаздыванием отклика среды на изменение мгновенной частоты модулированного поля. В дальней-

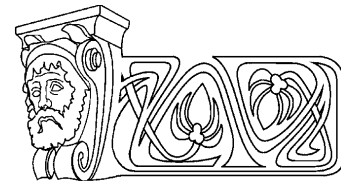
шем планируется исследование резонансов КПН в случае пространственно-временной модели [5], реализующей распространение модулированных лазерных сигналов в среде с насыщением поглощения и дисперсии.

Список литературы

1. Агапьев Б. Д., Горный М. Б., Матисов Б. Г., Рождественский Ю. В. Когерентное пленение населенностей в квантовых системах // УФН. 1993. Т. 163, № 9. С. 1–36.
2. Arimondo E. Coherent population trapping in laser spectroscopy // Progress in Optics. 1996. Vol. 35. P. 257–354.
3. Vanier J. Atomic clocks based on coherent population trapping: a review // Appl. Physics B. 2005. Vol. 81, № 4. P. 421–442.
4. Huss A., Lammegger R., Windholz L. et al. Polarisation-dependent sensitivity of level-crossing, coherent-population-trapping resonances to stray magnetic fields // J. of Optical Society of America B. 2006. Vol. 23, № 9. P. 1729–1736.
5. Пластун И. Л., Дербов В. Л. Исследование влияния нестационарных когерентных эффектов и резонансного самовоздействия на характеристики лазерного пучка, модулированного по частоте // Компьютерная оптика. 2009. Т. 33, № 3. С. 233–239.

УДК 535.345.1

ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННАЯ ДИНАМИКА МОДУЛИРОВАННОГО ЛАЗЕРНОГО ПУЧКА В ПРОТЯЖЁННОЙ НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКОЙ СРЕДЕ



И. Л. Пластун, А. Г. Мисюрин

Саратовский государственный технический университет
E-mail: inna_pls@mail.ru

На основе пространственно-временной численной модели была исследована динамика поведения протяженного лазерного пучка, модулированного по частоте, в условиях резонансного самовоздействия, возникающего при достаточно высокой интенсивности излучения в случае, когда частота распространяющегося пучка близка к частоте атомного перехода. На основе анализа временных зависимостей интенсивности и размера пятна на выходе из среды, а также фазовых портретов и спектров мощности для данной системы были найдены различные динамические режимы.

Ключевые слова: резонансное самовоздействие, распространение лазерного пучка, удвоение периода, частотная модуляция, отклик среды, разность населенностей.

Spatio-Temporal Dynamics of Modulated cw Laser Beam in Spatial-Extended Nonlinear Medium

I. L. Plastun, A. G. Misurin

On the basis of spatio-temporal numerical model the dynamics of frequency-modulated cw laser beam propagating in resonance conditions is investigated. At modulation periods comparable with the

atomic relaxation times the time and frequency dependence of the output intensity exhibits the manifestations of delayed medium response and resonance self-action. Time dependence of output intensity and spot size are measurement parameters. On the basis of phase portraits and power spectrum analysis we found a different dynamical regimes.

Key words: resonance self-action, laser beam propagation, non-stationary, frequency modulation, medium response, population difference, period doubling.

Распространение интенсивного лазерного излучения в нелинейно-оптических средах с насыщением поглощения и дисперсии в условиях, когда частота распространяющегося излучения близка к частоте атомного перехода, как известно (см., например, [1–3]), приводит к возникновению неоднородного распределения по поперечному сечению показателя преломления и коэффициента по-



глощения среды (так называемых эффектов наведённых линзы и диафрагмы). Вследствие такого поведения среды могут возникнуть эффекты резонансного самовоздействия, проявляющегося в виде резонансной самофокусировки [2, 3], самоканалирования [4] или самодиафрагмирования распространяющегося пучка. Подобные эффекты могут быть весьма полезными при передаче лазерных сигналов в оптических системах связи или при оптическом зондировании атмосферы, предохраняя сигнал, распространяющийся на большие расстояния, от дифракционного расплывания и способствуя увеличению длины его прохождения. Многие исследования, посвященные анализу резонансного самовоздействия в протяженных лазерных пучках (см., например, [2–4]), касаются только пространственного поведения пучка, не учитывая его эволюцию во времени и динамические свойства. Данная работа представляет собой полный пространственно-временной анализ поведения распространяющегося лазерного пучка, модулированного по частоте, в условиях резонансного самовоздействия.

Используемая численная модель является достаточно традиционной для подобных задач, решаемых в рамках скалярной паракиальной оптики, и основывается на решении системы уравнений Максвелла – Блоха, которую составляют два уравнения Блоха [1] для поляризации среды и разности заселенностей уровней, выводятся из уравнений для матрицы плотности и описывающих отклик среды, и параболическое волновое уравнение [1], которое описывает пространственно-временную эволюцию распространяющегося лазерного пучка. Подобные пространственно-временные численные модели достаточно удовлетворительно описывают проявления самофокусировки при распространении коротких импульсов (см., например, [5]), однако для описания эволюции протяженного лазерного пучка подобный подход был использован впервые.

Таким образом, решаемая система уравнений имеет вид

$$2i\left(\frac{\partial E}{\partial z} + \frac{1}{c} \frac{\partial E}{\partial t}\right) + \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}\right)E = gP, \quad (1)$$

$$\frac{\partial D}{\partial t} = -\gamma [D - 1 + i(E^* P - E P^*)], \quad (2)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -(\Gamma + i\Delta)P - \frac{i}{2}\Gamma DE, \quad (3)$$

где g – коэффициент поглощения, γ , Γ – скорости релаксации заселенности и поляризации соответственно, $D(z, \rho, \varphi, t)$ – разность заселенностей, нормированная на её величину в отсутствие насыщения, $E(z, \rho, \varphi, t)$, $P(z, \rho, \varphi, t)$ – медленно меняющиеся амплитуды электрического поля и поляризации соответственно, Δ – отстройка несущей частоты от частоты атомного перехода. При решении уравнений (1)–(3) использовалось традиционное для исследований самовоздействия лазерного излучения приближение медленно меняющихся амплитуд (см., например, [6]). Это связано с тем, что в исходном состоянии среда является слабо нелинейной и слабо поглощающей, и амплитуды волн будут изменяться на малую величину при прохождении волной расстояния порядка длины волны, т.е. амплитуды волн будут медленно изменяющимися функциями эволюционной координаты z и времени t . Медленность амплитуд означает, что исследуется поведение огибающей модулированного лазерного сигнала, а не колебания вектора напряженности электрического поля.

Поскольку рассматривается случай, когда несущая частота ω_0 равна частоте атомного перехода, то $\Delta = 0$ в (3). Единица амплитуды поля соответствует уровню насыщения $D = 0.5$. Продольная координата z измеряется в единицах дифракционной длины L_d , представляющей собой характерное расстояние, на котором свободный пучок с данным радиусом и частотой удваивает своё сечение из-за дифракции. Поперечная координата r нормирована на начальный радиус пучка a , который во всех рассматриваемых случаях был взят равным 1.

Уравнения (1)–(3) решались при начальных условиях:

$$\begin{aligned} E(z=0, \rho, \varphi, t) &= E^0(\rho, \varphi, t); \\ E(z, \rho, \varphi, t=0) &= 0; \\ D(z, \rho, \varphi, t=0) &= 1; \\ P(z, \rho, \varphi, t=0) &= 0. \end{aligned}$$



Для решения уравнений (1)–(3) нами была использована неявная разностная схема второго порядка, основанная на разложении поля по поперечной координате по модам Гаусса–Лагерра, подробно описанная в [7]. Были рассмотрены пучки, симметричные относительно оси распространения с начальным гауссовым профилем. Частота пучка на входе в среду гармонически модулирована по времени, $\omega = \omega_0 + \omega_1 \sin \Omega t$, где ω_0 – несущая лазерная частота, ω_1 – амплитуда модуляции частоты, Ω – частота модуляции. В этом случае комплексная амплитуда входного поля представляется в виде

$$E(0, \rho, \varphi, t) = E_0 \exp\left(-\frac{\rho^2}{2a^2}\right) \exp\left[i \frac{\omega_1}{\Omega} \cos(\Omega t)\right]. \quad (4)$$

В случае точного резонанса ($\Delta = 0$) частота модулированного поля осциллирует симметрично по отношению к несущей. Время и частота нормированы на времена релаксации заселенностей γ и поляризации Γ . Для упрощения были взяты $\gamma = \Gamma = 1$.

Исследуемыми физическими параметрами, представленными на рис. 1, являются интенсивность пучка на выходе из среды $I(z, r, t, \omega)$, выражающаяся как квадрат модуля комплексной амплитуды поля E : $I(z, \rho, \varphi, t, \omega) = |E(z, \rho, \varphi, t, \omega)|^2$, и размер пятна $w(t)$, определяемый как второй момент поперечного распределения нормированной интенсивности:

$$w^2(t) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} \rho^3 d\rho |E(Z, \rho, \varphi, t)|^2 \times \left\{ \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} \rho d\rho |E(Z, \rho, \varphi, t)|^2 \right\}^{-1}. \quad (5)$$

В соответствии с правилами исследования нелинейно-динамических систем для анализа нестационарного поведения лазерного сигнала были проанализированы фазовые диаграммы на плоскости «поляризация среды P – разность заселенностей D », иллюстрирующие динамику отклика среды на воздействующее излучение, а также спектры мощности, рассчитанные по реализации интенсивности на оси пучка на выходе из среды.

Рассматривался режим слабой, низкочастотной модуляции ($\Omega = 0.25$), когда спонтанные эффекты отклика среды пренебрежимо малы, при этом амплитуда частотной модуляции ω_1 была взята равной 1.

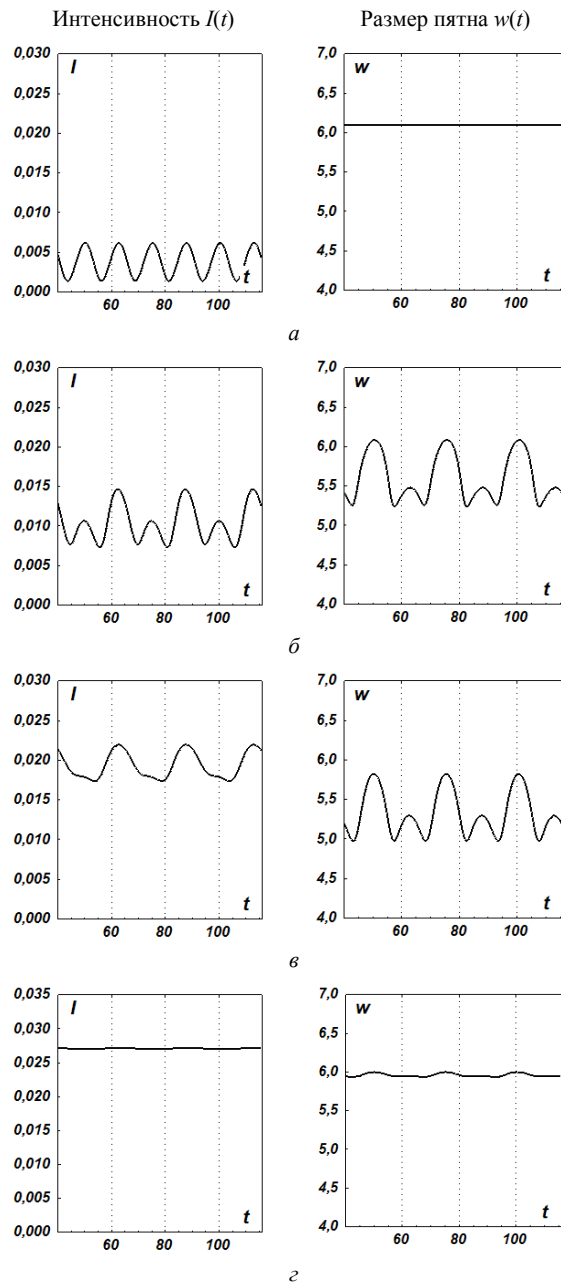


Рис. 1. Зависимость от времени выходной интенсивности $I(t)$ (слева) и размера пятна $w(t)$ (справа) при $E_0 = 0.1$ (а); $E_0 = 5$ (б); $E_0 = 10$ (в); $E_0 = 100$ (з) в среде без усиления ($g = 1$)

Были исследованы режимы слабого насыщения, вызываемого полем невысокой интенсивности ($E_0 = 0.1$) (рис. 1, а), когда эффекты резонансного самовоздействия пучка не возникают; среднего насыщения ($E_0 = 5$) (рис. 1, б), когда начинается проявление эффектов резонансного самовоздействия сильного насыщения ($E_0 = 10, E_0 = 20$) (рис. 1, в, г), когда эффекты резонансного самовоздействия



вия весьма значительны; сверхсильного насыщения ($E_0 = 100$) (рис. 1, δ), когда происходит выравнивание заселенностей уровней и эффекты резонансного самовоздействия уже отсутствуют.

Распространяясь в резонансной поглощающей среде, пучок постепенно приобретает модуляцию интенсивности, которая вызывается разницей поглощения на различных частотах. Этот эффект возникает даже при низких интенсивностях и низких частотах модуляции и исчезает при сверхсильном насыщении, что легко объясняется выравниванием заселенностей уровней и, как следствие, – равенством поглощения на разных частотах. Это, в свою очередь, приводит к исчезновению эффектов наведенной рефракции и режиму самоканалирования в среде (см. рис. 1, δ), когда поведение пучка напоминает случай слабого поля (см. рис. 1, a).

В линейном режиме (см. рис. 1, a , $E_0 = 0.1$) модуляция выходной интенсивности близка к гармонической, её частота равна удвоенной частоте модуляции. Это следует из того факта, что симметричные сдвиги лазерной частоты в обе стороны от резонанса вызывают одинаковые изменения линейного поглощения.

Размер пятна в этом случае не зависит от частотной модуляции, так как отсутствует наведенная линза. На фазовом портрете поляризации среды P и разности заселенностей D , а также на спектре мощности интенсивности выходного сигнала (см. рис. 2, a) можно наблюдать режим периодических колебаний с частотой модуляции $1/T$.

В режиме насыщения (см. рис. 1, δ , $E_0 = 5$) полупериоды модуляции становятся неравными, так как наведенная линза является положительной при частоте выше атомного перехода и отрицательной при частоте ниже перехода. Таким образом, увеличение интенсивности из-за слабого поглощения на частоте ниже резонанса сглаживается дефокусировкой. Прослеживается явная зависимость изменений интенсивности и поведения размера пятна – возникает периодическая пульсация пучка, вызванная фокусировкой и дефокусировкой на различных частотах.

При этом возникает субгармоника, хорошо заметная и на фазовом портрете, и на спектре мощности (рис. 2, δ), что свидетельст-

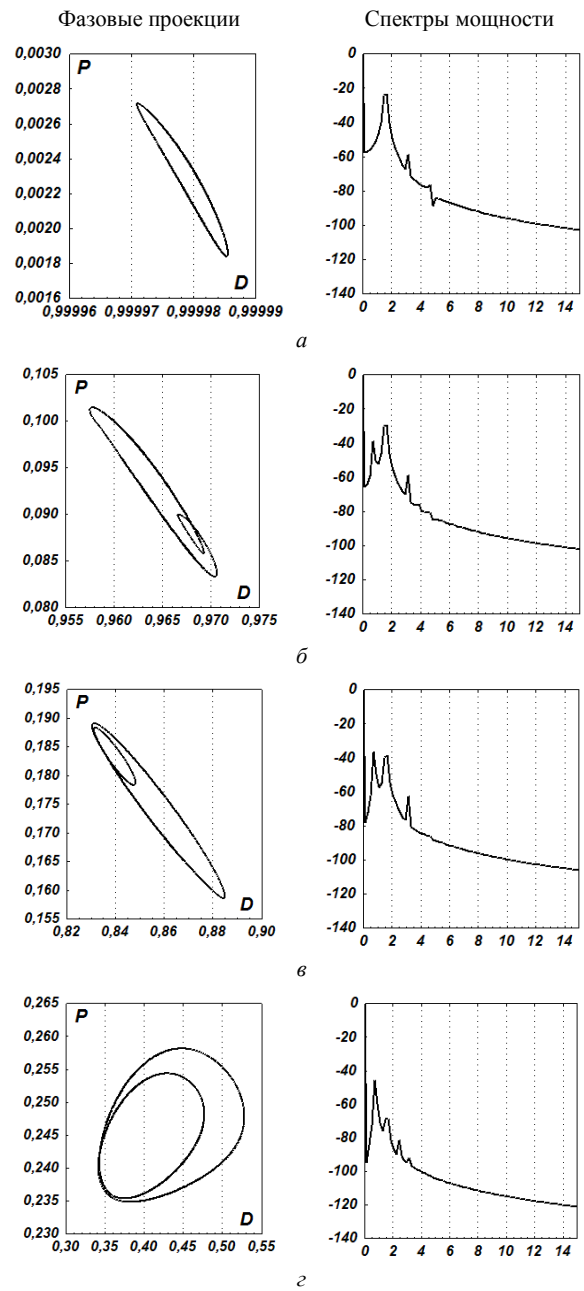


Рис. 2. Проекция фазового пространства системы на плоскость «поляризация среды P – разность заселенностей D » (слева) и спектры мощности, рассчитанные по реализации интенсивности на оси пучка на выходе из среды (справа) при $E_0 = 0.1$ (a); $E_0 = 3$ (b); $E_0 = 5$ (c); $E_0 = 10$ (z) в среде без усиления ($g = 1$)

ует о постепенно возрастающем влиянии эффектов резонансного самовоздействия, вызывающих понижение частоты наведенной амплитудной модуляции и удвоение периода $2T$.

В фокусирующей области пики интенсивности становятся больше. Размер пятна демонстрирует пульсации, вызванные резо-



нансной фокусировкой и дефокусировкой, причем в центре каждой фокусирующей области заметно увеличение после спада (см. рис. 1, б).

С увеличением интенсивности поля происходит подавление первой гармоники и рост амплитуды субгармоники, что объясняется постепенным уменьшением разности заселенностей D и нарастающим влиянием эффекта дефокусировки на частотах ниже резонансной. Колебания на основной частоте постепенно сглаживаются и при $E_0 = 20$ частота колебаний уменьшается вдвое, при этом на спектре мощности наблюдается только субгармоника $2T$ (рис. 2, д).

Дальнейшее увеличение интенсивности приложенного поля приводит к выравниванию заселенностей уровней и просветлению среды, когда поглощение столь незначительно, что становится практически одинаковым при любой частоте. Как следствие этого эффекта, мы наблюдаем отсутствие наведенной амплитудной модуляции интенсивности (см. рис. 1, д) и режим колебаний периода T .

С точки зрения нелинейной динамики данная система является диссипативной, даже в случае полей высоких интенсивностей и резонансного самовоздействия. Поэтому, рассматривая возможности перехода к хаотическим режимам, необходимо отметить, что при подобных условиях может реализоваться только режим удвоения периода $2T$ и появление субгармоники.

Для уменьшения степени диссипации рассматриваемой системы необходимы дополнительные условия подкачки энергии. В качестве такого источника может быть использован либо другой лазерный пучок (пучок накачки), либо среда, обладающая свойствами усиления распространяющегося излучения за счет электрического разряда, химических реакций, бомбардировки электронным пучком или иным способом.

Рассмотрим распространение лазерного пучка в среде, где коэффициент поглощения $g = -2$, что соответствует усилению интенсивности пучка в два раза на одной дифракционной длине. Наличие усиливающей среды играет роль дестабилизирующего фактора, вследствие чего увеличивается продолжительность переходного процесса пример-

но вдвое по сравнению с распространением пучка в обычной поглощающей среде.

Динамика поведения лазерного пучка меняется на прямо противоположную: наибольшая интенсивность пучка после прохождения расстояния в шесть дифракционных длин достигается при распространении слабых полей ($E_0 = 0.1$), поскольку именно в этом случае отсутствует эффект насыщения усиления. Так же как и в случае поглощающей среды, модуляция выходной интенсивности близка к гармонической (рис. 3, а), при этом интенсивность поля возрастает почти в семь раз. Такая высокая интенсивность, естественно, приводит к резкой самофокусировке пучка, хорошо заметной на временной зависимости размера пятна (см. рис. 3, а). При уходе от резонанса и уменьшении интенсивности поля самофокусировка сменяется диф-

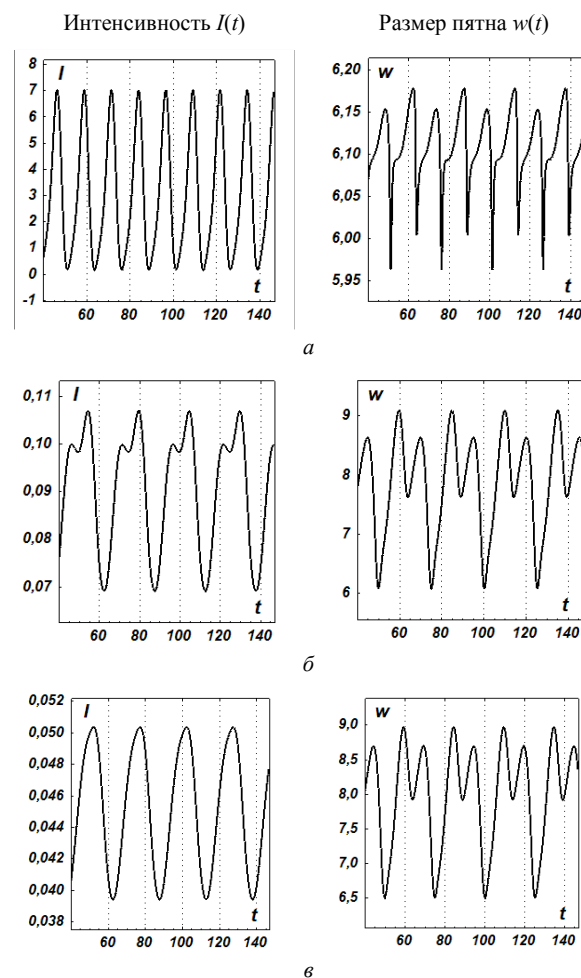


Рис. 3. Зависимость от времени выходной интенсивности $I(t)$ (слева) и размера пятна $w(t)$ (справа) при $E_0 = 0.1$ (а); $E_0 = 5$ (б); $E_0 = 10$ (в) в условиях усиливающей среды ($g = -2$)



ракцией, причем хорошо заметны эффекты, связанные с различным знаком наведенной линзы, наблюдавшиеся нами и в режиме насыщенного поглощения в среде без усиления (см. рис. 1, б). Дальнейшее увеличение интенсивности поля приводит к насыщению усиления и ослаблению интенсивности выходного пучка (см. рис. 3, б, в). Необходимо отметить, что в этом случае, так же как и для поглощающей среды, возникает периодическая пульсация пучка, вызванная фокусировкой и дефокусировкой на различных частотах. Данный эффект находит своё отражение в возникновении субгармоники, заметной на фазовом портрете и в спектре мощности (рис. 4, б, в).

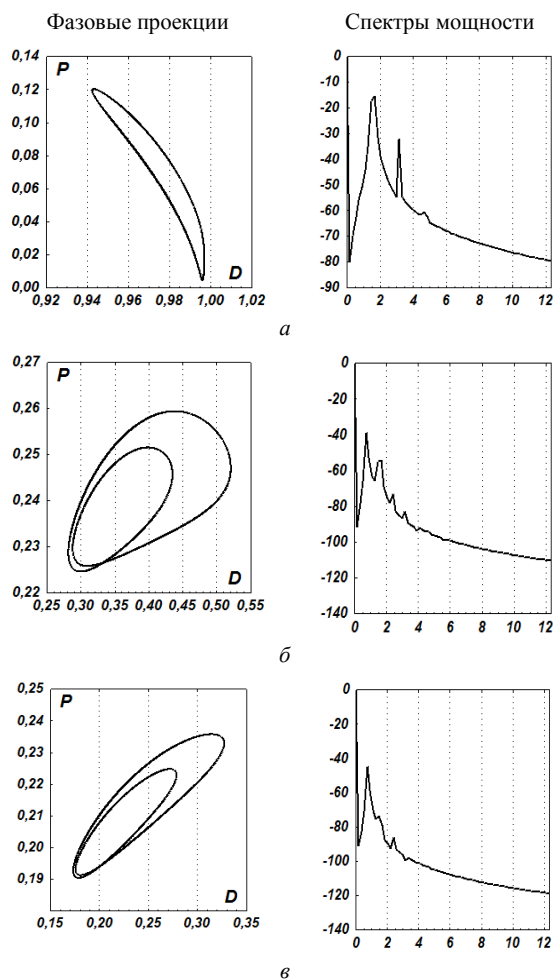


Рис. 4. Проекция фазового пространства системы на плоскость «поляризация среды P – разность заселенностей D » (слева) и спектры мощности, рассчитанные по реализации интенсивности на оси пучка на выходе из среды (справа) при $E_0 = 0.1$ (а); $E_0 = 5$ (б); $E_0 = 10$ (в) в условиях усиливающей среды ($g = -2$)

Подобное поведение динамических характеристик системы говорит о том, что с точки зрения динамики заселённости и поляризации среды и усиливающая, и поглощающая системы ведут себя идентично.

Таким образом, проанализировав пространственно-временную динамику протяженного лазерного пучка в условиях резонансного самовоздействия, можно сделать вывод, что насыщение поглощения (усиления), играющее роль дестабилизирующего фактора в случае обычной нелинейно-оптической среды, в случае усиливающих сред приводит к уменьшению степени нестационарности системы. Кроме того, необходимо отметить, что даже несмотря на такой сильный дестабилизирующий фактор, как усиливающая среда, в системе всё равно сохраняется свойство периодичности колебаний, что свидетельствует о её высокой степени устойчивости.

Список литературы

1. Шен И. П. Принципы нелинейной оптики / пер. с англ. М.: Наука, 1989. 560 с.
2. Dowell M. L. Self-focused light propagation in fully saturable medium: experiment // Phys. Rev. Appl. 1996. Vol. 53, № 3. P. 1775–1781.
3. Observation of continuous-wave on-resonance «self-focusing» / K. Tai, H. Gibbs, M. C. Rushford et al. // Optics Lett. 1984. Vol. 9, № 6. P. 243–245.
4. Dutton Z., Bashkansky M., Steiner M., Reintjes J. Analysis and optimization of channelization architecture for wideband slow light in atomic vapors // Optics Express. 2006. Vol. 14, № 12. P. 4978–4991
5. Melnikov L. A., Derbov V. L., Veshneva I. V., Konukhov A. I. Numerical studies of beam and pulse propagation in lasers and nonlinear media: transverse pattern dynamics and nonparaxial effects // Computers Math. Appl. 1997. Vol. 34, № 7/8. P. 881–909.
6. Виноградова М. Б., Руденко О. В., Сухоруков А. П. Теория волн. М.: Наука, 1979. 384 с.
7. Пластун И. Л., Дербов В. Л. Исследование влияния нестационарных когерентных эффектов и резонансного самовоздействия на характеристики лазерного пучка, модулированного по частоте // Компьютерная оптика. 2009. Т. 33, № 3. С. 233–239.



2УДК 539.193/.194;535.33/.34

УЧЕТ АНГАРМОНИЧЕСКОГО СМЕЩЕНИЯ ПОЛОС В МОДЕЛЬНЫХ РАСЧЕТАХ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ ДИМЕРОВ С ВОДОРОДНОЙ СВЯЗЬЮ

М. Д. Элькин, Л. М. Бабков*

Саратовский государственный технический университет

E-mail: elkinmd@mail.ru

* Саратовский государственный университет

E-mail: babkov@sgu.ru



В рамках гибридного метода функционала плотности DFT/B3LYP на примере различных димеров карбоновых кислот описана методика учета ангармонического смещения полос в колебательных спектрах димеров с водородной связью.

Ключевые слова: димеры карбоновых кислот, адиабатический потенциал, ангармонизм колебаний, водородная связь.

Angarmonic Shift of Lines in Modelling Calculations of Vibrational Spectra for Carbonic Acid Dimer with Hydrogen Bond

M. D. Elkin, L. M. Babkov

Using by DFT/B3LYP methods scheme of value for angarmonic shift of vibrational lines in carbonic acid monomer and dimer is described.

Key words: carbonic acid dimer, adiabatic potential, anharmonic shift, hydrogen bond.

Введение

Спектральное проявление межмолекулярного взаимодействия в димерах с водородной связью до настоящего времени является предметом научных публикаций. Сошлемся для примера на различную интерпретацию [1–4] колебательного спектра димеров карбоновых кислот в диапазоне 2700–3100 см⁻¹, куда попадают валентные колебания связей ОН карбоксильного фрагмента и связей СН базового фрагмента карбоновых кислот.

Попытки систематизировать результаты модельных расчетов колебательных состояний для различных представителей класса карбоновых кислот были предприняты в работах [5, 6] и диссертации [7], которые следует рассматривать как начальный этап в исследовании возможностей метода функционала плотности DFT/B3LYP для оценки ангармонического смещения полос фундаментальных колебаний в кислородосодержащих соединениях [8, 9].

Основной проблемой в задачах молекулярного моделирования является выбор ме-

тода и атомного базиса неэмпирического квантового расчета параметров адиабатического потенциала. Доминирующим следует признать метод функционала плотности DFT/B3LYP [10]. Рекомендации по выбору базиса в периодической литературе исследователи зачастую связывают с исследуемым классом соединений. Выбор базиса практически не влияет на результаты оптимизации геометрических параметров. Расхождение для вычисленных в гармоническом приближении частот фундаментальных колебаний может достигать ~ 100 см⁻¹. Очевидно, что операция масштабирования [11], осуществляемая для предварительного учета ангармонического смещения полос в колебательных спектрах молекул, проблемы не решает, если не привязывать параметры масштабирующего соотношения к базису.

Цель данной публикации – изложение методики оценки ангармонического смещения колебательных полос, использующей результаты модельных расчетов кубических и квартичных силовых постоянных.

Ангармоническая модель молекулярных колебаний

В теории молекул для интерпретации колебательных спектров используются следующие два подхода [12]. Первый подход использует нормальные координаты, линейно связанные с декартовыми смещениями атомов [13]:

$$2H = v_s(P_s^2 + (Q_s^2)^2)/2 + \mu^{1/4} P_\alpha \mu^{-1/4} P_\beta \mu^{1/4} + 1/3 F_{rst} Q_r Q_s Q_t + 1/12 F_{rstu} Q^r Q^s Q^t Q^u + \dots, \quad (1)$$

где $P_\alpha = L(\alpha; sr) Q_s P_r$; $L(\alpha; sr)$ – постоянные Кориолиса, v_s – частоты гармонических колебаний, см⁻¹; Q_s – безразмерные нормальные колебательные координаты, линейно



связанные с декартовыми смещениями атомов; F_{srt} и F_{srts} – кубические и квартичные силовые постоянные (параметры разложения адиабатического потенциала молекулы).

Модельный гамильтониан, записанный в системе естественных колебательных координат, принимает вид [14]

$$H = 1/2 v_s (P_s^2 + (Q^s)^2) + F_{rst} Q_r Q_s Q_t + C(rs; t) P_r Q^t P_s + F_{rstu} Q^r Q^s Q^t Q^u + C(rs; tu) P_r Q^t Q^u P_s + \dots, \quad (2)$$

где $C(rs; t)$, $C(rs; tu)$ – параметры кинематической ангармоничности [15].

Решение уравнения (1) и (2) методами теории возмущения приводит к известному выражению для энергий колебательных состояний [16]

$$E^V = v_s (V_s + 1/2) + \chi_{sr} (V_s + 1/2)(V_r + 1/2) \dots, \quad (3)$$

где V_s – квантовые числа колебательного состояния.

Второе слагаемое в выражении (3) позволяет оценить ангармоническое смещение фундаментальных частот колебаний при отсутствии ангармонических резонансов. Сдвиг фундаментальных полос колебаний определяется ангармоническими поправками $X_{ss} = 2 \chi_{ss}$ и $X_s = 1/2 \chi_{sr}$.

В программном продукте «Gaussian» используется модель (1). Выражения для ангармонических постоянных χ_{sr} в выражении (3) заимствованы из работы [13]. Для решения поставленной задачи анализа ангармонического смещения полос в высокочастотной части спектра получим явные выражения для ангармонических постоянных χ_{sr} . Воспользуемся обычной схемой теории возмущения квантовой механики

$$\Delta E_V = \langle V | \Delta E | V \rangle + \langle V | \Delta E | V' \rangle \langle V' | \Delta E | V \rangle / (E_V - E_{V'}), \quad (4)$$

где ΔE – второе и третье слагаемое правой части уравнения (1), а также известным рекуррентным соотношением для волновых функций (функций Эрмита–Гаусса [13]) гармонической части уравнения (1)

$$Q^s | V_s \rangle = ((V_s + 1)/2)^{1/2} | V_s + 1 \rangle + (V_s/2)^{1/2} | V_s - 1 \rangle. \quad (5)$$

Несложные алгебраические преобразования приводят к следующим соотношениям для ангармонических постоянных χ_{sr} в выражении (2):

$$\chi_{ss} = 3/2 (F_{ssss}/24) - 15/4 (F_{sss}/6)^2 / v_s + 1/8 (F_{ssr}/2)^2 (1/(2v_s - v_r) - 1/(2v_s + v_r) - 4/v_r) (1 - \delta_{sr}). \quad (6)$$

$$\chi_{sr} = 1/4 (F_{ssrr}/4) - 1/2 (F_{ssr}/2)^2 (1/(2v_s - v_r) + 1/(2v_s + v_r)) (1 - \delta_{sr}) + 3/8 (F_{srt})^2 (1/(v_s + v_r + v_t) + 1/(v_t - v_r - v_s) + 1/(v_s + v_t - v_r) + 1/(v_t + v_r - v_s)) (1 - \delta_{sr}) (1 - \delta_{st}) (1 - \delta_{rt}) + L(\alpha; sr)^2 (1/(v_s + v_r) + 1/(v_s - v_r))/2. \quad (7)$$

Резонансные слагаемые в соотношениях (6) и (7) ограничивают область их использования. К примеру, в компьютерной технологии «Caussian» при величине энергетической щели между фундаментальными (v_s) и обертонами ($v_r + v_t$) состояниями менее 10 см^{-1} по умолчанию предполагается наличие резонанса типа Ферми [13], а расхождение взаимодействующих колебательных состояний вычисляется с помощью соотношения [16]

$$2E = (v_s + v_r + v_t) \pm ((F_{srt})^2 (2 - \delta_{rt}) / 16 + (v_s - v_r - v_t)^2)^{1/2}. \quad (8)$$

Резонансное взаимодействие между фундаментальными состояниями v_s и v_r снижает квартичная силовая постоянная F_{ssrr} :

$$2E = (v_s + v_r) \pm ((F_{ssrr}/8)^2 + (v_s - v_r)^2)^{1/2}. \quad (9)$$

Отметим, что полученные выражения для ангармонических постоянных несимметричны по индексам. Это позволяет оценить роль каждого слагаемого в выражениях (6) и (7) в ангармоническом смещении частот в различных диапазонах спектра.

Проиллюстрируем сказанное на различных представителях класса карбоновых кислот. К ним относятся муравьиная, уксусная, бензойная кислоты, изомеры акриловой кислоты. Для модельных расчетов использованы базы 6-311G** и 6-311+G**.

Оптимизация геометрических параметров приводит к следующим результатам для карбоксильного COOH фрагмента (длины связей в Å, значения валентных углов в градусах): $R_{CO} = 1.34-1.36$, $R_{C=O} = 1.21$, $R_{OH} = 0.97-0.98$, $A_{OC=O} = 122.4-125.3$, $A_{COH} = 105.5-108.6$, $A_{XCO} = 109.2-113.5$. Длина связи между основным и карбоксильным фрагментами (R_{CX}) равна 1.1 для муравьиной кислоты (X–H) и меняется в диапазоне 1.48–1.52 для остальных рассматриваемых соединений (X–C). Эти данные хорошо согласуются с эксперимен-



том для муравьиной и уксусной кислоты, представленным в монографии [17]. Учет диффузионных эффектов атомного базиса (+) приводит к изменению лишь третьего знака мантиссы.

Образование циклических димеров приводит к изменению длин валентных связей карбоксильного фрагмента не более чем 0.02 \AA , углов в пределах 3° . Длины водородных связей лежат в диапазоне $1.68\text{--}1.71 \text{ \AA}$.

Интерпретация колебаний гидроксильного фрагмента в различных мономерах и димерах ряда карбоновых кислот представлена в табл. 1, 2. Полная интерпретация колебательных состояний исследуемых молекул на основании неэмпирических квантовых расчетов параметров адиабатического потенциала дана в работах [5–7].

Результаты модельных расчетов колебательных состояний для мономеров исследуе-

мых карбоновых кислот указывают на необходимость учета ангармонического смещения частот. При этом для качественной оценки ангармонического смещения можно использовать процедуру масштабирования с параметрами из работ [5, 6]. Характер поведения ангармонических силовых постоянных, определяющих ангармоническое смещение валентных и неплоских деформационных колебаний связи ОН, отражен в табл. 2.

Частота валентного колебания связи ОН в мономерах отделена значительной щелью даже от ближайшего обертона, поэтому ангармоническое смещение для нее полностью определяется первыми двумя слагаемыми выражений (6) и первым слагаемым выражения (7). Доминирующий вклад ($\sim 200 \text{ см}^{-1}$) в ангармоническое смещение полосы валентного колебания гидроксильной группы вносит кубическая силовая постоянная F_{qqq} .

Таблица 1

Интерпретация колебаний гидроксильного фрагмента в мономерах карбоновых кислот

Форма колебания	ν_{exp} [7, 17, 18]	Базис 6-311G**				Базис 6-311+G**			
		ν_h	ν_{anh}	ИК	КР	ν_h	ν_{anh}	ИК	КР
Муравьиная кислота									
ν_{OH}	3570	3735	3533	49.9	77.6	3736	3535	62.3	76.4
ρ_{OH}	638	703	658	150	2.10	680	637	160	0.70
Уксусная кислота									
ν_{OH}	3583	3759	3560	51.03	101	3759	3561	62.8	95.8
ρ_{OH}	642	679	659	102	1.50	662	644	99.7	0.25
Бензойная кислота									
ν_{OH}	3570	3771	3573	87.8	152	3771	3577	99.4	137.8
ρ_{OH}	560	597	564	64.2	7.30	577	576	70.5	2.52
Акриловая кислота (транс-изомер)									
ν_{OH}	3552	3774	3574	72.1	100	3773	3576	84.4	91.7
ρ_{OH}	609	604	564	89.3	8.63	585	557	89.6	3.20
Акриловая кислота (цис-изомер)									
ν_{OH}	3552	3764	3565	70.6	117	3765	3567	83.6	100
ρ_{OH}	609	655	613	82.1	9.00	637	602	84.2	3.30

Примечание. Интенсивность в спектрах ИК в км/моль, в спектрах КР $\text{\AA}^4/\text{a.e.m.}$

Таблица 2

Ангармонические силовые постоянные гидроксильного фрагмента мономеров карбоновых кислот. см^{-1}

F	Муравьиная		Уксусная		Акриловая Т		Акриловая Ц		Бензойная	
	G**	+G**	G**	+G**	G**	+G**	G**	+G**	G**	+G**
F_{qqq}	2565	2561	-2568	-2567	-2570	-2567	-2568	-2564	-2566	-2563
F_{rrq}	-1602	-1666	1318	1214	1877	1890	1625	1649	1840	1959
F_{qqq}	1498	1492	1489	1490	1496	1493	1492	1487	1489	1489
F_{rrq}	-1476	-1526	-1200	-1105	-1707	-1711	-1482	-1495	-1669	-1763
F_{rrr}	1990	2176	1411	1211	2766	2887	2056	2162	2653	3210



Характер поведения ангармонических силовых постоянных, определяющих ангармоническое смещение валентных (ρ_{OH}) и неплоских деформационных (ρ_{OH}) колебаний связи OH в мономерах карбоновых кислот, демонстрирует табл. 2. Следует отметить близость значений ангармонических силовых постоянных F_{qqq} и F_{qqqq} . Значения остальных ангармонических постоянных претерпевают заметные изменения в ряду исследуемых соединений, а для ангармонической силовой постоянной F_{pppp} , связанной с неплоским деформационным колебанием связи OH (ρ_{OH}), имеет место существенная зависимость от базиса расчета. На интерпретации колебаний этот факт не оказывает влияния. Сравнение с данными, приведенными в табл. 3, позволяет оценить влияние межмолекулярного взаимодействия на значение соответствующих ангармонических силовых постоянных в димерах исследуемых карбоновых кислот (нумерация индексов соответствует номерам колебаний табл. 4). Особенно заметное изменение

претерпевают ангармонические силовые постоянные, связанные с неплоскими деформационными колебаниями связей OH.

Таблица 3

Ангармонические силовые постоянные гидроксильного фрагмента в димерах карбоновых кислот, см⁻¹

F	МК	УК	АКТ	АКЦ	БК
F ₁₁₁	2054	-2061	2110	2105	2125
F ₂₂₁	-523	749	-766	-745	-463
F ₃₃₁	-726	801	-841	-806	-808
F ₄₃₂	-599	770	-786	-759	-498
F ₄₄₁	1898	-1962	1950	1958	1368
F ₁₁₁₁	836	823	850	905	924
F ₂₂₁₁	-395	-552	-570	-549	-328
F ₂₂₂₂	253	469	584	513	188
F ₃₃₁₁	-536	-592	-627	-593	-574
F ₃₃₂₂	333	505	640	560	306
F ₃₃₃₃	456	561	793	697	540
F ₄₄₁₁	823	837	834	886	629
F ₄₄₂₂	-378	-544	-543	-526	-225
F ₄₄₃₃	-514	-585	-599	-570	-382
F ₄₄₄₄	784	822	792	846	428

Таблица 4

Интерпретация колебательного спектра димеров карбоновых кислот

Тип симметрии	Форма колебания	$\nu_{\text{эксп}} [3, 4, 7, 17]$	Базис 6-311G**			Базис 6-311+G**		
			ν_{Γ}	$\nu_{\text{анг}}$	ИК/КР	ν_{Γ}	$\nu_{\text{анг}}$	ИК/КР
Бензойная кислота								
Ag	ρ_{OH}	-	3088	2728	1067	3104	2276	1045
Au	ρ_{OH}	962	996	977	122	982	-	207
Bg	ρ_{OH}	-	955	924	0.7	897	-	0.3
Bu	ρ_{OH}	-	3192	2955	3634	3198	2903	4853
Муравьиная кислота								
Ag	ρ_{OH}	2802	3128	2776	189	3165	2834	221
Au	ρ_{OH}	917	995	960	179	976	951	211
Bg	ρ_{OH}	919	972	932	1.0	951	908	0.4
Bu	ρ_{OH}	3000	3239	2930	2143	3261	2967	2156
Уксусная кислота								
Ag	ρ_{OH}	2769	3116	2746	416	3139	2764	420
Au	ρ_{OH}	935	1011	979	197	995	973	219
Bg	ρ_{OH}	912	967	937	0.7	954	925	0.3
Bu	ρ_{OH}	2965	3223	2906	3122	3235	2910	3052
Акриловая кислота (транс-димер)								
Ag	ρ_{OH}	2770	3083	2686	501	3114	2716	623
Au	ρ_{OH}	977	994	966	154	975	974	203
Bg	ρ_{OH}	928	948	920	0.6	926	939	0.6
Bu	ρ_{OH}	2884	3196	2908	2746	3212	2862	3934
Акриловая кислота (цис-димер)								
Ag	ρ_{OH}	2770	3108	2748	571	3106	2716	571
Au	ρ_{OH}	977	1006	977	152	1000	988	216
Bg	ρ_{OH}	928	964	935	1.1	953	956	0.5
Bu	ρ_{OH}	2884	3214	2897	3897	3204	2874	3865



Образование димера приводит к смещению полос, интерпретированных как колебания карбоксильного фрагмента [5, 6]. Особенно это касается валентного (q_{OH}) и неплоского деформационного (ρ_{OH}) колебания связи О–Н. При этом, как следует из табл. 4, гармоническое значение частоты валентного колебания попадает в частотный диапазон, где проявляются валентные колебания связей СН соединений. Именно с этим связаны трудности в интерпретации полос указанного спектрального диапазона. Энергетическая щель между частотой валентного колебания связи ОН и обертонами деформационных колебаний становится такой, что может возникнуть необходимость в учете слагаемого в выражении (7), содержащем резонансный знаменатель $1/(v_1 - v_i - v_j)$. Зависит это от величины кубической силовой постоянной F_{1ij} .

Оценим влияние отдельных слагаемых в формулах (6) и (7) на ангармоническое смещение частот валентных колебаний связи ОН в димерах исследуемых кислот, используя данные, представленные в табл. 3, и учитывая принадлежность одного колебания к типу симметрии A_g , а второго – к B_u .

Основной вклад в значение диагональной ангармонической постоянной χ_{11} вносит второе слагаемое в выражении (6). Его влияние снижает первое слагаемое. Третье слагаемое дает вклад, если нормальное колебание v_r принадлежит к типу симметрии A_g . Это слагаемое состоит из трех частей. Резонансные знаменатели первых двух того же порядка, что и сама частота v_1 . Поскольку кубические силовые постоянные F_{11r} на порядок меньше представленных в табл. 3, то реальный вклад может дать лишь третья часть, если колебание v_r является низкочастотным.

Модельные расчеты указывают на частоту валентного колебания водородной связи О–Н ($v_r \sim 160\text{--}120 \text{ см}^{-1}$, $F_{11r} \sim 180\text{--}265 \text{ см}^{-1}$). В этом случае ангармоническое смещение фундаментального колебания v_1 за счет ангармонической постоянной $\chi_{11} \sim 300 \text{ см}^{-1}$. Этот факт и отражен в табл. 4.

Если ставить под сомнение достоверность результатов расчета параметров адиабатического потенциала для низких частот, то ангармоническое смещение фундаменталь-

ного колебания v_1 за счет ангармонической постоянной $\chi_{11} \sim 150 \text{ см}^{-1}$. Такую же оценку дает операция масштабирования [11]. Однако полученные расчетные данные по частотам колебаний водородных связей хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными [1–4], а значение кубической силовой постоянной F_{11r} представляется физически обоснованным.

Вклад в ангармоническое смещение фундаментальной полосы v_1 за счет недиагональной ангармонической постоянной χ_{1r} определяется величинами квартичных силовых постоянных F_{11rr} и кубической силовой постоянной F_{1sr} , если v_s и v_r принадлежат к типу симметрии A_g . При этом надо учитывать величину резонансного знаменателя $1/(v_1 - v_s - v_r)$. Значения кубических силовых постоянных F_{1sr} более чем на порядок меньше указанных в табл. 3. Ангармоническое смещение фундаментального колебания v_1 за счет ангармонической постоянной $\chi_{1s} \sim 30 \text{ см}^{-1}$.

Ангармоническое смещение для антисимметричного (B_u) валентного колебания связи О–Н определяется первым и третьим слагаемыми в формулах (6) и (7) как упомянуто выше. При этом для кубической силовой постоянной F_{srt} нормальные колебания должны обладать симметрией B_u , B_g и A_u соответственно. Однако наибольший вклад в ангармоническое смещение вносит второе слагаемое в формуле (7) за счет кубической силовой постоянной F_{441} . Согласно проведенным модельным расчетам ангармоническое смещение частоты несимметричного валентного колебания связи О–Н достигает $\sim 230 \text{ см}^{-1}$. Вклад от X_{ss} и X_s практически равнозначен.

Если же, как сказано выше, усомниться в достоверности кубической силовой постоянной, связанной с колебанием водородной связи, то вклад от X_{ss} уменьшается на величину $\sim 50 \text{ см}^{-1}$. Принципиального характера этот факт не имеет. В публикациях [1–4] положение полосы несимметричного валентного колебания связи ОН в димерах карбоновых кислот связывают с диапазоном $3000\text{--}2930 \text{ см}^{-1}$ ИК спектров. Этот факт подтверждается модельными квантовыми расчетами колебательных состояний, представленными в диссертации [7].



Заключение

Предложена схема учета ангармонического смещения частот, основанная на использовании результатов модельных неэмпирических квантовых расчетов параметров адиабатического потенциала. Схема позволяет оценить влияние слагаемых ангармонических констант на величину сдвига колебательных полос в спектрах ИК и КР. Хорошее согласие расчетных и экспериментальных данных по структуре и спектрам в мономерах и димерах карбоновых кислот дает основание утверждать, что рассмотренная математическая модель молекулярных колебаний и описанная методика оценки ангармонического сдвига полос в спектрах ИК и КР могут быть использованы в предсказательных расчетах колебательных состояний димеров с водородной связью.

Список литературы

1. *Flakus H. T., Tyl A.* Polarized IR spectra of hydrogen bond in acetic acid crystals // *Chemical Physics*. 2007. Vol. 336. P. 36–50.
2. *Matanovic L., Doslic N.* Theoretical modeling of the formic acid dimer infrared spectrum. Shaping the O–H stretch bond // *Chemical Physics*. 2007. Vol. 338. P. 121–126.
3. *Olbert-Majrat A., Ahokas J., Lundell J., Pettersson M.* Raman spectroscopy of formic acid and its dimers isolated in low temperature argon matrices // *Chemical Physics Lett*. 2009. Vol. 468. P. 176–183.
4. *Durlak P., Latajka Z.* Cal-Parinello molecular dynamics and density functional Theory simulation of infrared spectra for acetic acid monomers and cyclic dimers // *Chemical Physics Lett*. 2009. Vol. 477. P. 249–264.
5. *Элькин Л. М., Лихтер А. М., Гречухина О. Н.* Моделирование межмолекулярного взаимодействия в димерах карбоновых кислот // *Прикаспийский журнал: управление и высокие технологии*. 2009. № 1 (5). С. 52–58.

6. *Элькин М. Д., Шальнова Т. А., Колесникова О. В.* Моделирование адиабатических потенциалов карбоновых кислот // *Вестн. СГТУ*. 2009. № 1 (35), вып. 1. С. 76–81.
7. *Гречухина О. Н.* Моделирование молекулярной динамики в димерах карбоновых кислот: дис. ... канд. физ.-мат. наук. Астрахань, 2009. 156 с.
8. *Эрман Е. А., Элькин П. М., Гречухина О. Н.* Информационная технология «Gaussian» и структурно-динамические модели кислородосодержащих соединений // *Вестн. СГТУ*. 2009. № 2 (39), вып. 2. С. 108–114.
9. *Элькин П. М., Шальнова Т. А., Гречухина О. Н.* Моделирование структуры и колебательных спектров кислородосодержащих соединений // *Изв. Сарат. ун-та. Новая сер.* 2009. Т. 9. Сер. Физика, вып. 1. С. 24–30.
10. *Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. et al.* Gaussian 03. Revision B.03. 2003. Pittsburg PA : Gaussian Inc., Pittsburg PA, 2003.
11. *Краснощечков С. В., Степанов Н. Ф.* Масштабирующие множители как эффективные параметры для коррекции неэмпирического силового поля // *Журн. физ. химии*. 2007. Т. 81, № 4. С. 680–689.
12. *Павлючко А. И., Грибов Л. А.* Соотношение решений ангармонических колебательных задач в криволинейных и линейных колебательных координатах // *Опт. и спектр*. 1985. Т. 58, № 6. С. 1247–1251.
13. *Nielsen H. H.* The vibration-rotation energies of molecules and their spectra in the infrared // *Handbook der Physik*. 1953. Vol. 37, № 1. P. 173–313.
14. *Элькин М. Д.* Ангармонический анализ колебательных спектров многоатомных молекул // *Опт. и спектр*. 1983. Т. 54, вып. 4, С. 895–898.
15. *Элькин М. Д.* Ангармонический анализ интенсивностей в ИК колебательных спектрах многоатомных молекул // *Опт. и спектр*. 1984. Т. 57, вып. 3. С. 561–564.
16. *Герцберг Г.* Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. М. : Изд-во иностр. лит., 1949. 647 с.
17. *Свердлов Л. М., Ковнер М. А., Крайнов Е. П.* Колебательные спектры многоатомных молекул. М. : Наука, 1970. 550 с.
18. *Benmalti M., Chamma D., Blaise P., Heri-Rousseau O.* Theoretical interpretation of infrared lineshape of gaseous propynoic and acrylic acid dimers // *J. Mol. Struct*. 2006. Vol. 785. P. 27–31.

УДК. 537.8; 539.186.2

ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА–ЭЙНШТЕЙНА. II

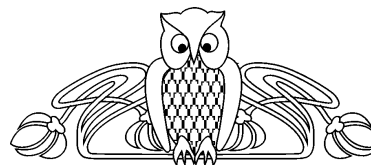
Ю. Н. Зайко

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

Данная статья является продолжением работы автора [1]. В ней подробно рассматривается вопрос выбора метрики, а также другие возможные метрики, как, например, обобщение метрики Шварцшильда за счет учета излучения массивным телом электромагнитного излучения. Рассмотрена проблема понижения симметрии изначально сферически-симметричной задачи до

аксиальной на уровне решения уравнений Эйнштейна–Максвелла (или Максвелла) за счет фиксации направления оси z системы координат и восстановления этой симметрии нулевыми модами. Рассмотрены локализованные решения уравнений Эйнштейна–Максвелла – геоны.

Ключевые слова: метрика, нулевая мода, геон, излучение.





Explicit Solutions of the Maxwell–Einstein Equations. II

Yu. N. Zayko

This article is a continuation of the previous author's article on the same problem [1]. Here choice of metrics discusses in detail, so as another possible metrics, like generalization of the Schwarzschild metric of massive body due to radiation of electromagnetic wave. A problem of lowering the initially spherical symmetry to axial one in solution's level for Einstein–Maxwell (or Maxwell) equations due to fixation of z-axis of coordinate system and its recovery with the help of zero-modes is discussed. Localized solutions of the Einstein–Maxwell equations (geons) are discussed, too.

Key words: metric, zero mode, geon, radiation.

Введение

Настоящая статья является продолжением работы автора [1], посвященной рассмотрению особенностей распространения сферических электромагнитных волн (ЭМВ) во Вселенной с учетом влияния их собственного гравитационного поля с помощью уравнений Максвелла–Эйнштейна. Основное внимание в ней уделяется не обсуждению полученных в [1] результатов, а разбору некоторых тонких вопросов, касающихся методов решения задачи и др. В основном это следующие вопросы:

- использованная метрика и другие возможные метрики;
- локализованные сгустки электромагнитной и гравитационной энергии – геоны [2] и др.

Также обсуждается вопрос угловой зависимости ЭМВ в случае сферической симметрии.

1. Использованная метрика

Напомним постановку задачи [1]. В качестве исходных уравнений в [1] выбраны уравнения тяготения Эйнштейна и уравнения электромагнитного поля в вакууме (уравнения Максвелла без источников), связанные друг с другом [3]:

$$\begin{aligned}
 R_{ik} - \frac{1}{2} g_{ik} R &= \frac{8\pi K}{c^4} T_{ik}; F_{,k}^{ik} + \Gamma_{kl}^l F^{ik} = 0; \\
 R_{ik} &= \Gamma_{ik,l}^l - \Gamma_{il,k}^l + \Gamma_{ik}^l \Gamma_{lm}^m - \Gamma_{il}^m \Gamma_{km}^l; \\
 T_{ik} &= \frac{1}{4\pi} \left(-F_{il} F_k^l + \frac{1}{4} g_{ik} F_{lm} F^{lm} \right).
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

Здесь R – след тензора Риччи R_k^i : $R = R_i^i$, g_{ik} – метрический тензор; T_{ik} и F^{ik} – тензор энергии-импульса и электромагнитный тензор;

Γ_{kl}^i – символы Кристоффеля; c – скорость света в вакууме, K – постоянная тяготения; индексы i, k, l пробегает значения 0, 1, 2, 3; по повторяющимся индексам предполагается суммирование; запятая означает обычную, т.е. нековариантную производную [3]. Исследовались решения (1), соответствующие наличию на бесконечности сферической ЭМВ. Для этого, следуя [3], зададим вид интервала

$$\begin{aligned}
 ds^2 &= e^\nu c^2 dt^2 - e^\lambda dr^2 - \\
 &- r^2 (d\theta^2 + \sin^2 \theta \cdot d\varphi^2),
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

где $v = v(t, r, \theta)$, $\lambda = \lambda(t, r, \theta)$; $x^0 = ct$, t – время; $x^1 = r$, $x^2 = \theta$, $x^3 = \varphi$ – сферические координаты. Вид метрики продиктован тем, что компоненты поля ЭМВ (Е- и М-типа) зависят от полярного угла θ ¹.

Для разделения переменных в [1] использовано дополнительное условие: $\lambda = \alpha(r, t) + \beta(\theta)$, $v = -\alpha(r, t) + \beta(\theta)$. После разделения переменных система (1) решалась обычным образом, т.е. тензор энергии-импульса T_{ik} выражался через тензор Риччи и в конечном счете через метрический тензор, а с другой стороны, – через компоненты тензора электромагнитного поля F_{ik} . Строгое следование этой традиционной процедуре с метрикой (2) приводит к противоречию – левая и правая части полученных уравнений обладают разной зависимостью от угла θ . Это противоречие частично снимается после усреднения T_{ik} по интервалу времени, значительно превышающему период волны. Далее ход рассуждений в [1] напоминал процедуру, с помощью которой устраняются противоречия в квантовой электродинамике, связанные с появлением бессмысленных расходящихся выражений. Выражения для компонент тензора энергии-импульса бессмысленны по причине, указанной выше. Однако их разности приводят к выражениям, свободным от указанного недостатка.

После выполнения описанных операций с тензором T_{ik} в уравнениях (1) и их решения было получено окончательное выражение для коэффициентов (2):

¹ Система координат, как и в [1], выбрана так, что проекция полного момента ЭМВ на ось z равна нулю. Этим исключается зависимость решения от угла φ .



$$e^{\alpha} = \exp\left(\frac{r_c}{r}\right), \quad r_c = \frac{l(l+1)c}{\omega}, \quad \beta = 0. \quad (3)$$

Здесь l – целое неотрицательное число, определяющее орбитальный угловой момент ЭМВ, ω – частота волны на бесконечности.

2. Нулевые моды

Использованные в работе [1] решения уравнений Максвелла обладают одной особенностью² – они не учитывают бесконечнократного вырождения, связанного с произволом выбора оси z , на которую проецируется полный момент сферической волны. Фиксация оси z влечет понижение симметрии исходной задачи на уровне решения. Как показано в квантовой теории поля³ [4], при попытке выполнить квазиклассическое квантование вблизи таких решений возникают так называемые нулевые моды, описывающие переходы между вырожденными состояниями. Нулевые моды возникают всегда, когда квантуется зависящее от координаты статическое решение теории, имеющей группу симметрии, например обладающей трансляционной инвариантностью [4, с.154].

Нулевая мода в нашей задаче связана с вырождением по направлению оси z – все решения, отличающиеся лишь ее направлением, допустимы и имеют одинаковую энергию. Чтобы избавиться от нее, надо явно учесть возможность перехода между этими состояниями. Проще всего это сделать в рам-

ках квантовомеханического рассмотрения. Задача облегчается тем, что угловая зависимость волновой функции фотона такая же как и классической ЭМВ. Вычислим вероятность перехода из состояния с орбитальным моментом l , угловая зависимость которого описывается $P_l(\cos(\theta))$ в системе координат с осью z , в состояние с таким же моментом, но в системе координат, ось z' которой составляет с осью z некоторый угол $\Delta\theta$. В этой системе угловая зависимость волновой функции будет описываться $P_l(\cos(\theta+\Delta\theta))$. Представим $P_l(\cos(\theta+\Delta\theta))$ в виде разложения по полиномам Лежандра $P_l^k(\cos(\theta))$:

$$P_l(\cos(\theta + \Delta\theta)) = \sum_{k=-l}^l I_k(\Delta\theta) P_l^k(\cos(\theta)). \quad (4)$$

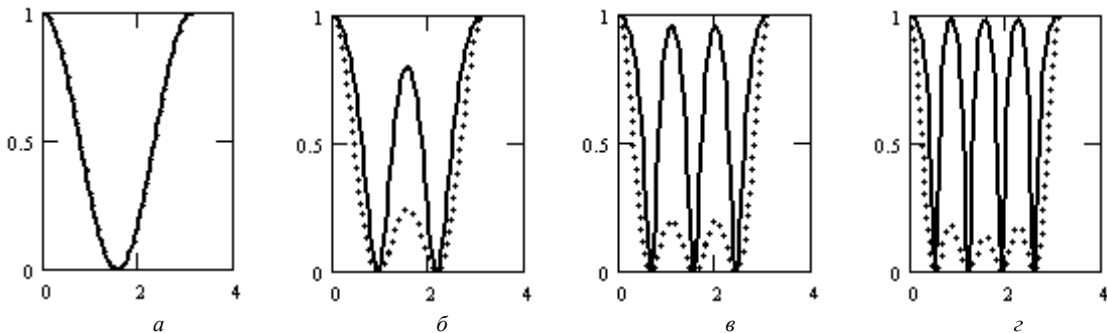
Амплитуду вероятности перехода $I_k(\Delta\theta)$ можно найти с помощью известной теоремы сложения для сферических функций [6]:

$$P_l(\cos(\theta + \Delta\theta)) = P_l(\cos(\theta))P_l(\cos(\Delta\theta)) + 2 \sum_{k=1}^l \frac{(l-k)!}{(l+k)!} P_l^k(\cos(\theta))P_l^k(\cos(\Delta\theta)). \quad (5)$$

Используя условие ортогональности для присоединенных полиномов Лежандра [6], получим:

$$I_k(\Delta\theta) = P_k(\cos(\Delta\theta)) \cdot \delta_{k0} + 2 \frac{(l-k)!}{(l+k)!} P_l^k(\cos(\Delta\theta)), \quad (6)$$

где δ_{kl} – символ Кронекера. Интересующие нас вероятности вычисляются по формуле



Зависимость вероятности $w_l(\Delta\theta)$ присутствия $P_l(\cos(\theta+\Delta\theta))$ в $P_l(\cos(\theta))$ с учетом нормировки. По оси ординат отложены: точки – $(P_l(\cos(\theta)))^2$, сплошная кривая – $w_l(\Delta\theta)$; по оси абсцисс отложены углы θ и $\Delta\theta$ от 0 до π ; $a - l = 1$ (кривые слились), $b - l = 2$, $v - l = 3$, $z - l = 4$

² Как и все встречающиеся в литературе (см., например, [5]). Поэтому, например, распределение полей в сферическом резонаторе имеет аксиальную симметрию.

³ В классической электродинамике (и механике) при построении последовательной теории возмущений сталкиваются с тем же явлением.



$$w_l = \frac{[P_l(\cos(\Delta\theta))]^2}{\sum_{k=0}^l [I_k(\cos(\Delta\theta))]^2}. \quad (7)$$

Знаменатель в (7) связан с тем, что присоединенные полиномы Лежандра – ортогональная, но неортонормированная система. Величина w_l представляет «долю» функции $P_l(\cos(\theta+\Delta\theta))$ в исходной функции $P_l(\cos(\theta))$. На рисунке представлены результаты расчета вероятности $w_l(\Delta\theta)$ для различных гармоник.

Полученные результаты говорят о том, что область углов $\Delta\theta_c$, в которой присутствие «смещенной» гармоники $P_l(\cos(\theta+\Delta\theta))$ в «основной» $P_l(\cos(\theta))$ значительно, сравнима по величине с масштабом угловой зависимости θ_c основной гармоники, определяемой, как известно, величиной порядка $1/l$. Этот эффект можно приписать действию нулевой моды, поскольку обе упомянутые гармоники обладают одинаковой энергией. Разумеется, он исчезает, когда направление оси z фиксировано физически, например задается внешним полем⁴.

3. Другие метрики

Приведенная выше метрика получена в основном с использованием уравнений Максвелла. Роль уравнений Эйнштейна свелась к тому, что $R_0^0 = R_1^1$, причем сами значения тензора Риччи не важны. Это соответствует поставленной задаче – найти метрику пространства-времени, искривленного присутствием только ЭМВ, но не каких-либо массивных тел. Поэтому результат не зависит от амплитуды волны. Зависимость от амплитуды возникает в другой задаче, связанной с определением метрики, создаваемой массивным излучающим телом, т.е., по сути дела, поправок к шварцшильдовской метрике. Покажем, что постановка задачи в [1] позволяет сделать это, изменив ход вычислений.

Приравняем выражения для T_0^0 , выраженные через элементы метрики с помощью

⁴ Полученный результат представляет и самостоятельный интерес, поскольку позволяет объяснить или, скорее, по-новому взглянуть на результаты классической электродинамики. Например, можно задать вопрос: почему распределение полей в сферическом резонаторе имеет аксиальную симметрию, как утверждается в учебниках (см., например, [5]), если направление оси z не фиксировано?

уравнений Эйнштейна, опуская члены, содержащие зависимость от угла θ ⁵, и явно через решения уравнений Максвелла для сферических ЭМВ E-типа:

$$\frac{8\pi K}{c^4} T_0^0 = -e^{-\alpha-\beta} \left(\frac{1}{r^2} - \frac{\alpha'}{r} \right) + \frac{1}{r^2}, \quad (8)$$

$$\frac{8\pi K}{c^4} T_0^0 = \frac{K}{c^4} \left\{ e^{-2\beta} \Psi^2 + \frac{1}{[l(l+1)]^2} \times \left[\frac{1}{r^2} e^{-\alpha-\beta} \left(\frac{\partial}{\partial r} r^2 \Psi \right)^2 + r^2 e^{\alpha-\beta} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial x^0} \right)^2 \right] \right\} \Phi^2,$$

где компонента электромагнитного тензора $F_{01} = \Psi(r, t) \cdot \Phi(\theta)$. Последнее выражение можно упростить, вводя функцию $f(r, t)$, уравнение для которой имеет вид [1]

$$f'' - \left(\frac{f'}{f} \right)^2 \dot{f} \mp \frac{l(l+1)}{r^2} \frac{f'}{f} f = 0; \quad (9)$$

$$f = r^2 \Psi \sim r^2 E_r,$$

где знаки \pm соответствуют сходящейся и расходящейся волне, E_r – радиальная составляющая электрического поля ЭМВ. Представляя $f(z, t) = G(z) e^{\pm i\omega t}$, $|z| = \omega r/c$, ω – частота, для $G(z)$ получим уравнение в плоскости комплексного z

$$GG'' - (G')^2 + i \frac{l(l+1)}{z^2} GG' = 0; \quad G' = \frac{dG}{dz}, \quad (10)$$

которое мы используем ниже. В результате мы приходим к уравнению, определяющему метрику:

$$-e^{-\alpha} \left(\frac{1}{r^2} - \frac{\alpha'}{r} \right) + \frac{1}{r^2} = \frac{K}{c^4} \left[1 - \frac{2r^2}{r_c^2} e^\alpha \right] \cdot \left(\frac{f}{r^2} \right)^2 \Phi^2(\theta). \quad (11)$$

При этом мы опять столкнулись с отмеченным выше противоречием, которое уже не устраняется процедурой вычитания, примененной в [1]. Однако, учитывая результат, полученный в параграфе 1, мы при усреднении тензора энергии-импульса ЭМВ наряду с усреднением по времени вправе выполнить усреднение и по углу θ . В результате, учитывая нормировку шаровых функций, мы приходим к уравнению, отличающемуся от (11)

⁵ Эти члены выражаются через производные функции $\beta(\theta)$, которые, как показано в [1], равны нулю.



лишь отсутствием $\Phi^2(\theta)$ в правой части. Решения этого уравнения определяют искомую метрику, отличающуюся от полученной в [1].

Приведем вид уравнений, следующих из (11), после усреднения по θ :

$$\frac{dy}{dt} = \frac{1}{t} \cdot \left[y - 1 + \left(t - \frac{2}{yt} \right) \right] \cdot |\Omega|^2, \quad (12)$$

$$\Omega = \Omega_0 \exp \left[il(l+1) \int_t^{t_R} e^{iu} \frac{du}{u^2} \right].$$

Здесь $y = e^{-\alpha}$, $t = 1/x = r_c / r$, $\Omega = G \cdot (\Gamma)^{1/2}$, $\Gamma = 4K/c^4 r_c^2$, $t_R = r_c / R$, R – радиус фотосферы. Граничным условием для (12) является $y(t=0) = 1$, т.е. метрика на бесконечности ($x \rightarrow \infty$) является плоской. В (12) также использовано решение (10) [1]:

$$\ln G = i \int \exp \left[\frac{il(l+1)}{z} \right] dz,$$

соответствующее сферической волне на бесконечности. Уравнения (12) окончательно приводятся к виду

$$\frac{dy}{dt} = \frac{1}{t} \cdot \left\{ y - 1 + \left[t^2 - \frac{2}{y} \right] \cdot |\Omega_0|^2 \times \right. \\ \left. \times \exp \left[-2l(l+1) \int_t^{t_R} \frac{\text{Sin}(u)}{u^2} du \right] \right\}. \quad (13)$$

При отсутствии ЭМВ (13) имеет известное решение в виде шварцшильдовской метрики

$$e^{-\alpha} = 1 - \frac{r_g}{r}, \quad r_g = \frac{2Km}{c^2},$$

где m – масса тела, создающего гравитационное поле. В уравнении (13) можно опустить $t^2 \ll 2/y$ на больших расстояниях $r \gg r_c$.

Оценим порядок величины $|\Omega_0|^2$, связанной с плотностью потока энергии ЭМВ излучаемой телом. Заметим, что на больших расстояниях поле излучения звезды, рассматриваемой как сферический излучатель, можно заменить полем элементарного электрического диполя [7]. Учитывая это, можно связать поле E_r ЭМВ и светимость излучающего тела (звезды) L и найти выражение для $|\Omega_0|^2$:

$$|\Omega_0|^2 = G(R) \sqrt{\Gamma} = R^4 E_r^2(R) \cdot \frac{4K}{c^4 r_c^2} = \\ = \frac{3}{\pi [l(l+1)]^2} \cdot \frac{LK}{c^5}, \quad (14)$$

где R – радиус излучающей поверхности (фотосферы) звезды. Подстановка в (14) значений для $L = 4 \cdot (10^{32} \div 10^{35})$ Дж/с⁶ (в видимой и рентгеновской частях спектра) приводит к значению для $|\Omega_0|^2 \approx (10^{-20} \div 10^{-17}) / [l(l+1)]^2$. Беря $R = 30R_c^7$, где $R_c = 6.96 \cdot 10^{-8}$ м – радиус Солнца, получим значение $t_R \approx 7.63 l(l+1) \cdot (10^{-19} \div 10^{-22})$ в зависимости от спектрального диапазона.

Учитывая такой разброс по величине разных членов в уравнении (13), трудно рассчитывать получить сколько-нибудь значимые количественные результаты. Однако можно исследовать асимптотику (1) в пределе $t \ll 1$ ($r \gg r_c$). Разлагая подынтегральное выражение по u , можно привести уравнение к известному виду [9, с.306]. Приведем окончательное выражение для метрики:

$$y = e^{-\alpha} = 1 - \frac{r_g}{r} - \frac{2|\Omega_0|^2}{2l(l+1)-1} \left(\frac{r_c}{r} \right)^{2l(l+1)}. \quad (15)$$

Из (1) видно, что поправки к шварцшильдовской метрике, описываемой первыми двумя слагаемыми в (15), за счет излучения массивным телом в пределах известной Вселенной чрезвычайно малы. Тем не менее, полученный результат представляет принципиальный интерес⁸. Чтобы получить метрику пространства-времени в окрестности массивного дипольного (в общем случае мультипольного) излучателя надо в (14) заменить светимость звезды L на интенсивность I дипольного (мультипольного) излучения [3].

4. Геоны

Уравнения Эйнштейна–Максвелла предсказывают возможность существования геонов, описываемых как «метастабильное объединение энергии электромагнитных или гравитационных волн, сдерживаемое воедино своим собственным гравитационным притяжением» [2, с.543].

Геон – существенно нелинейный объект, обязанный своим происхождением нелинейности уравнений Эйнштейна, или, точнее,

⁶ Для звезд главной последовательности $L = 10^6 L_c$, $L_c = 4 \cdot 10^{26}$ Дж/с – светимость Солнца. Для сверхновых $L = 10^9 L_c$ [8].

⁷ Для звезд главной последовательности с $L = 10^6 L_c$.

⁸ Как, например, метрика Нордстрёма–Рёсслера.



Эйнштейна–Максвелла. Используемая в [1] процедура усреднения T_{ik} , устраняя дополнительную нелинейность уравнений (1), связанную с нелинейностью T_{ik} , не влияет на исходную нелинейность уравнений Эйнштейна. Поэтому среди решений уравнений (1) есть решения описываемого типа. Чтобы получить их явный вид, напомним некоторые результаты [1].

Решение уравнения (1) для волны E -типа в комплексной плоскости z имеет вид⁹ $f(z, t) = G(z)e^{\pm i\omega t}$, $|z| = \omega r/c$, ω – частота; $f = r^2\Psi(r, t)$, $F_{01} = \Psi(r, t) \cdot \Phi(\theta)$, $\Phi(\theta)$ характеризует угловую зависимость решения. Поведение $G(z)$ описывается уравнением (10). Точное решение для G с граничным условием на бесконечности $G \sim e^{iz}$ имеет вид

$$\begin{aligned} \ln G &= C_1 \int e^{\frac{il(l+1)}{z}} dz = \\ &= C_1 \left[ze^{\frac{il(l+1)}{z}} - il(l+1) \cdot Ei\left(i \frac{l(l+1)}{z}\right) + C_2 \right], \end{aligned} \quad (16)$$

где $Ei(x)$ – интегральная показательная функция, $C_1 = i$ и C_2 – постоянные.

Для описания локализованных решений уравнений (1) надо в (16) выбрать константу $C_1 < 0$. Тогда асимптотика полученного решения будет иметь вид

$$f \sim \exp(-i\omega t + C_1 \rho), \quad \rho = \frac{\omega}{c} r. \quad (17)$$

Выражение для метрики, полученное с помощью решения (17), совпадает с выражением (3) для метрики, полученным в [1] для решений волнового типа. Из выражения (17) следует, что заряд геона равен нулю.

Заключение

В настоящее время найдено множество точных решений уравнений Эйнштейна и число новых публикаций растет¹⁰. Составлены каталоги таких решений [10]. Отыскать неизвестное решение – задача весьма проблематичная. Тем не менее, стоит привести замечание из [10], где цитируются слова Киннерсли [11]: «Большинство известных точных решений¹¹ описывает ситуации от-

кровенно нефизические, и существует тенденция меньше всего внимания уделять самым полезным решениям. Однако вина за такое положение частично лежит и на нас – тех, кто работает в этой области. Мы углубляемся в изотропные токи, макроскопические поля нейтрино и теорию тахионов в погоне за большей «общностью». Нам как будто доставляет удовольствие придумывать уводящие в сторону и противоположные интуиции понятия. А сделав это, мы оставляем нашу новорожденную метрику хромать на разъезжающейся во все стороны тетраде без малейшей надежды на истолкование»¹².

В настоящей работе принят противоположный, физический подход. Решения, не поддающиеся физической интерпретации, вряд ли стоит исследовать вообще – не потому что они ошибочны, а по причине их бессмысленности. Так, решения типа Райнича [12], скорее всего, не реализуются по причинам, на которые указал Виттен [13]¹³.

Методы, использованные в работе, также отличаются по строгости от используемых, например, в [10]. Однако это не повод для того, чтобы их отвергнуть. Аналогичные методы неплохо зарекомендовали себя в других областях физики. Можно надеяться, что дальнейшая разработка проблем, затронутых в настоящей работе, приведет и к усовершенствованию используемых методов.

В работе приведены результаты, которые позволяют заполнить пробелы в области приложений ОТО, как, например, поправки к шварцшильдовской метрике за счет излучения массивного тела, а также пролить свет на некоторые принципиальные вопросы классической электродинамики, как, например, на вопрос об угловой зависимости полей в сферически симметричных задачах. Показано, что процедуру усреднения тензора энергии-импульса в уравнениях Эйнштейна–Максвелла можно обосновать, если серьезно отнестись к ограничениям, накладываемым на эти уравнения.

¹² Несмотря на то, что это сказано в 1975 г., ситуация вряд ли изменилась, поскольку она проистекает из свойств человеческой природы, мало меняющейся на протяжении тысячелетий.

¹³ Другой причиной нереализуемости решения Райнича является то, что в уравнениях Эйнштейна гравитационное поле само себя не создает [14].

⁹ Уравнение (9) для $f(z, t)$ приведено выше.

¹⁰ Со скоростью примерно 100 в год [10].

¹¹ Уравнений Эйнштейна.



Вопрос о применимости полученных результатов в космологии, затронутый в [1], требует использования более реалистичных нестационарных моделей Вселенной и составляет предмет самостоятельного исследования.

Автор благодарит М. В. Давидовича за обсуждение некоторых результатов работы.

Список литературы

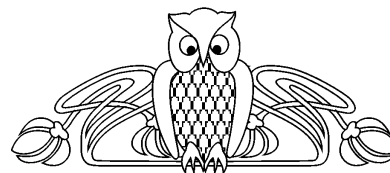
1. *Зайко Ю. Н.* Точные решения уравнений Максвелла–Эйнштейна // Изв. Саратов. ун-та. Новая сер. 2010. Т. 10. Сер. Физика, вып. 1. С. 50–58.
2. *Мизнер Ч., Уилер Дж.* Классическая физика как геометрия // Альберт Эйнштейн и теория гравитации. М.: Мир, 1979. 592 с.
3. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Теория поля. М.: Наука, 1967. 460 с.
4. *Раджараман Р.* Солитоны и инстантоны в квантовой теории поля / пер. с англ.; под ред. О. А. Хрусталова. М.: Мир, 1985. 414 с.
5. *Никольский В. В., Никольская Т. И.* Электродинамика и распространение радиоволн. М.: Наука, 1989. 544 с.
6. *Арфкен Г.* Математические методы в физике / сокр. пер. с англ. В. В. Чепкунова. М.: Атомиздат, 1970. 712 с.
7. *Марков Г. Т., Чаплин А. Ф.* Возбуждение электромагнитных волн. М.; Л.: Энергия, 1967. 371 с.
8. *Тутуков А. В.* Звезды // Физическая энциклопедия: в 5 т. М.: Сов. энцикл., 1980. Т. 2. С. 68–69.
9. *Камке Э.* Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям / пер. с нем. С. В. Фомина. М.: Наука, 1971. 576 с.
10. *Крамер Д., Штеффани Х., Мак-Каллум М., Херльт Э.* Точные решения уравнений Эйнштейна / под ред. Э. Шмюцера; пер. с англ. М.: Энергоиздат, 1982. 416 с.
11. *Kinnersley W.* Recent progress in exact solutions // General Relativity and Gravitation: proc. of GR7 / ed. G. Shaviv, J. Rosen. N. Y.; L.: Wiley, 1975.
12. *Rainich G. Y.* Electrodynamics in the General Relativity Theory // Trans. Amer. Math. Soc. 1925. Vol. 27. P. 106–136.
13. *Witten L.* Initial Value Problem of the Einstein–Maxwell Field // Phys. Rev. 1960. Vol. 120, № 2. P. 635–640.
14. *Вебер Дж.* Гравитация и свет // Гравитация и относительность / пер. с англ.; под ред. А. З. Петрова. М.: Мир, 1965. 544 с.

УДК 621.382.029.6

КВАЗИПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ТЕОРИЯ СПЕКТРОВ РЯДА ЭКЗОТИЧЕСКИХ АТОМОВ

О. А. Бойкова, Ю. Н. Тюхтяев

Саратовский государственный университет
E-mail: boykova_na@mail.ru



Исследованы в низшем порядке теории возмущения сверхтонкое расщепление уровней энергии экзотических атомов позитрония и антиводорода. Показана общность формулы Ферми для спектров исследуемых атомов. Обсуждены индивидуальные особенности их спектроскопии. Рассчитано время жизни паразитрония.

Ключевые слова: связанное состояние, сверхтонкий сдвиг, уровень энергии, экзотический атом, позитроний, антиводород, квазипотенциальный подход.

Quasipotential Method of Spectrum Exotic Atoms

О. А. Boikova, Yu. N. Tyukhtyaev

Fine and superfine splitting energy levels of exotics atoms positronium and anti-hydrogen is investigated in low order. It is showed that Formula Fermi for spectrum exotics atoms is generally. Individually property they spectroscopy is discussed. Live time is calculated of positronium.

Key words: bound state, superfine shift, energy level, exotic atom, positronium, anti-hydrogen, quasipotential approach.

Впечатляющие успехи физики элементарных частиц во второй половине прошлого века расширили и углубили представление

об атоме. Отрицательно заряженная частица может заменить электрон, а положительно заряженная – захватить электрон, образуя систему со свойствами, сходными со свойствами атома водорода. Необычный, экзотический атом можно получить в результате посадки тяжелой отрицательной частицы X ($X = \mu^-, \pi^-, k^- \dots$) на обычный атом [1, 2]. Такие атомы, где место электронов занимают мезоны, получили название мезоатомов. Итак, кроме обычных электронных атомов имеются мюонные, пионные, каонные и прочие атомы.

Интересны свойства экзотического атома, представляющего собой связанное состояние электрона и позитрона [3]. С одной стороны, позитроний является аналогом атома водорода, в котором протон заменяется на позитрон, и спектральные линии атомов



имеют аналогичную структуру. С другой стороны, хотя оба атома состоят из стабильных частиц, в отличие от атома водорода позитроний оказывается нестабильным вследствие аннигиляции. Специфическими свойствами обладает также эффект Зеемана в позитронии. Более строгое отличие обычного атома водорода от экзотического позитрония обнаруживается при описании взаимодействия составляющих их частиц с помощью диаграммной техники Фейнмана.

Согласно релятивистским представлениям [4] имеется несколько возможностей перехода элементарных частиц из одного состояния в другое. Пусть оба состояния соответствуют положительным энергиям и переход осуществляется через вершину из прошлого в будущее. Этот случай характеризует ток частицы. Если оба состояния соответствуют отрицательным энергиям и представляют собой переход через вершину из будущего в прошлое, то имеет место ток античастиц. Существует также возможность перехода из состояния с положительной энергией в прошлом в состояние с отрицательной

энергией в прошлом. При таком развитии событий в будущем нет ни частицы, ни античастицы – происходит аннигиляция пары. Наконец, исходное состояние может отвечать отрицательной энергии и описывать античастицу в будущем, а конечное состояние соответствовать положительной энергии и описывать частицу в будущем. Данный случай относится к рождению пары частица–античастица.

Взаимодействие фермионов может происходить либо в прямом канале, когда через вершины протекают токи, либо в обменном канале, когда рождаются и уничтожаются пары. Взаимодействие в прямом канале изображено рис. 1. Одна из диаграмм (рис. 1, в) изображает взаимодействие токов античастиц и может служить иллюстрацией процессов в антиводороде. Экзотический атом отличается от обычного атома тем, что в его структуру не входит либо электрон, либо протон. Возможна также такая «невероятная» ситуация, когда в атоме нет ни протона, ни электрона.

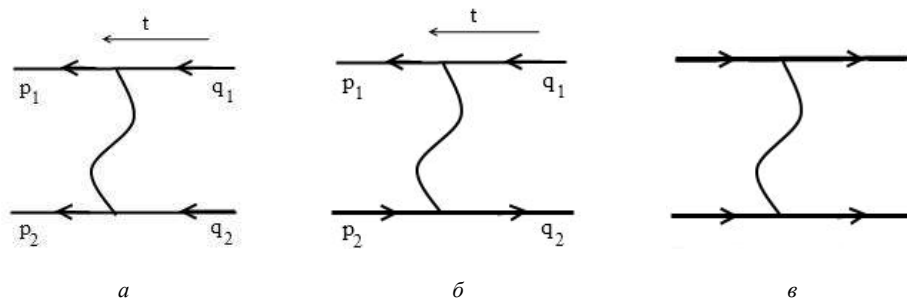


Рис. 1. Диаграммы различного взаимодействия токов

Имеется информация о том, что две лаборатории ALKAP и ATXENA синтезировали и в течение достаточно продолжительного времени удерживали атомы антиводорода от аннигиляции. В настоящее время исследуется его спектроскопия. Исследование спектра атома антиводорода методом квазипотенциала выполняется нами впервые и поэтому надо оговорить детали. Прежде всего, условимся о конкретном задании правил соответствия, выборе представления γ -матриц, нормировке решений уравнения Дирака, калибровке фотонного пропагатора. Только в

этом случае вычисления можно довести до конечного результата и выйти на сравнение с экспериментом. Наша задача заключается в том, чтобы исследовать тонкую и сверхтонкую структуру спектров атомов и сравнить с соответствующей структурой электронных атомов. Остановимся на подробностях применения метода квазипотенциала к описанию спектра атома антиводорода.

Для исследования уровней энергии атома антиводорода используем метод квазипотенциала, который носит трехмерный характер [5]. Релятивистский квазипотенциал определяется через амплитуду рассеяния T :



$$V = \frac{T}{1 + FT}. \quad (1)$$

Разложим обе части выражения (1) по степеням константы тонкой структуры α :

$$V^{(2)} + V^{(4)} + \dots = (T^{(2)} + T^{(4)} + \dots) \times (1 - F(T^{(2)} + T^{(4)} + \dots)). \quad (2)$$

Тогда в низшем приближении

$$V^{(2)}(\vec{p}, \vec{q}) = T^{(2)}(\vec{p}, \vec{q}). \quad (3)$$

Решение уравнение Дирака с положительной энергией имеет вид

$$u_i^-(\vec{p}) = \sqrt{\frac{\varepsilon_{ip} + m_i}{2\varepsilon_{ip}}} \begin{pmatrix} w_i \\ \frac{\vec{\sigma}_i \vec{p}}{(\varepsilon_{ip} + m_i)} w_i \end{pmatrix},$$

$$u_i^+(\vec{p}) = \sqrt{\frac{\varepsilon_{ip} + m_i}{2\varepsilon_{ip}}} \begin{pmatrix} w_i & * \\ -w_i & \frac{\vec{\sigma}_i \vec{p}}{(\varepsilon_{ip} + m_i)} \end{pmatrix}, i=1,2, \quad (4)$$

где w_i – спиновые функции, $\varepsilon_{ip}^2 = \vec{p}^2 + m_i^2$, $\vec{\sigma}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – совокупность матриц Паули, матрицы $\gamma^\mu(\gamma^0, \vec{\gamma})$ в двухкомпонентной форме определяются выражениями

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}.$$

Волновые функции античастиц определим с помощью матрицы зарядового сопряжения:

$$C = \gamma^0 \gamma^2, \quad \bar{u}^- = C u^+, \quad u^+ = C \bar{u}^-,$$

$$C_{\alpha\beta} \tilde{\gamma}_{\beta l} = -\gamma_{\alpha\beta} C_{\beta l}. \quad (5)$$

Значок $\tilde{\gamma}$ означает транспонирование. Тогда для каждой из античастиц выполняется

$$\bar{u}^- \gamma^{\mu_1} \gamma^{\mu_2} \dots \gamma^{\mu_n} u^+ = (-1)^{n+1} \bar{u}^+ \gamma^{\mu_n} \dots \gamma^{\mu_2} \gamma^{\mu_1} u^-.$$

При $n=1$ имеем

$$\bar{u}^- \gamma_2^\mu u^+ = \bar{u}^+ \tilde{\gamma}_2^\mu u^-. \quad (7)$$

В результате указанного преобразования для взаимодействия, изображенного на рис. 1, в системе центра масс, получаем

$$[\bar{u}_1^+(\vec{p}) \gamma_1^\mu u_1^-(\vec{q})][\bar{u}_2^+(-\vec{p}) \gamma_2^\mu u_2^-(-\vec{q})].$$

Тогда квазипотенциал связанного состояния частица–античастица с точностью до второго порядка по α определяется выражением

$$V^{(2)}(\vec{p}, \vec{q}) = T^{(2)}(\vec{p}, \vec{q}) = -e^2 \frac{[\bar{u}_1^+(\vec{p}) \gamma_1^\mu u_1^-(\vec{q})][\bar{u}_2^+(-\vec{p}) \gamma_2^\mu u_2^-(-\vec{q})]}{(\vec{p} - \vec{q})^2}. \quad (8)$$

Сверхтонкое расщепление является следствием взаимодействия спиновых магнитных моментов антипротона и позитрона. Поэтому важной математической особенностью, характеризующей сверхтонкое расщепление уровней энергии исследуемой системы, является наличие скалярного произведения матриц Паули частиц. Выделяя часть квазипотенциала, зависящую от произведения операторов спина антипротона и позитрона, запишем:

$$V^{(2)}(\vec{p}, \vec{q}) = v_c + \Delta V^{hfs}, \quad (9)$$

где v_c – кулоновский потенциал, который выбирается в качестве нулевого приближения квазипотенциала.

Уравнение Шредингера с кулоновским потенциалом запишем в виде

$$\left(\frac{p^2}{2\mu} - W\right) \psi_c(\vec{p}) = \frac{\alpha}{(2\pi^2)} \int d\vec{q} \frac{\psi_c(\vec{q})}{(\vec{p} - \vec{q})^2}, \quad (10)$$

где $W = -\frac{\alpha^2 \mu}{2}$ – энергия соответствующего основного состояния, ψ_c – кулоновская волновая функция.

Согласно теории возмущения первая поправка к основному уровню энергии от возмущения ΔV^{hfs} по кулоновским волновым функциям определяется выражением

$$\Delta E^{hfs} = \frac{1}{(2\pi)^6} \int d\vec{p}^* d\vec{q}^* \frac{e^2}{4m_1 m_2} \psi_c(\vec{p}) w_1^* w_2^* \times \left\{ (\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2) - \frac{(\vec{k} \vec{\sigma}_1)(\vec{k} \vec{\sigma}_2)}{k^2} \right\} w_1 w_2 \psi_c(\vec{q}), \quad \vec{k} = \vec{p} - \vec{q}, \quad (11)$$

Используем δ -приближение кулоновской волновой функции $\psi_c(\vec{q})$. При вычислении интеграла по угловой части воспользуемся симметрией подынтегрального выражения.

С учетом последних преобразований для сверхтонкого расщепления основного уровня энергии в атоме антиводорода получаем

$$\Delta E^{hfs} = \frac{8 \alpha^4 \mu^3}{3 m_1 m_2}. \quad (12)$$

где m_1 – масса антипротона, m_2 – масса позитрона.



В работе [6] Ферми рассчитал энергию сверхтонкого расщепления уровней энергии атома водорода. Для основного уровня $n = 1$ было получено

$$E_F = \frac{8}{3} \frac{\alpha^4 \mu^3}{m_1 m_2}, \quad (13)$$

где m_1 – масса электрона, m_2 – масса протона. Согласно (12)

$$\Delta E^{hfs} = E_F. \quad (14)$$

Значит, для атома водорода и экзотических атомов – мюония, антиводорода и других – выражение E_F , найденное Ферми, является общим, отличается только величиной масс. Однако у атомов водорода, антиводорода, мюония существует только прямой канал взаимодействия. В прямом канале для позитрония результат (12),

$$\Delta E_{ps} = \frac{\alpha^4 m_1}{3},$$

является только частью вклада, поскольку необходимо дополнительно учесть обменное взаимодействие. В этом ощутимо проявляется отличие экзотического атома позитрония от обычного водорода. Без дополнительного учета аннигиляционного канала взаимодействия электрона и позитрона теоретические расчеты и данные эксперимента не совпадают. Кроме того, уровень парапозитрония на 8.41×10^{-4} эВ ниже уровня ортопозитрония и в магнитном поле между ними возможны переходы. Необычность перехода ${}^3S_1 - {}^1S_0$ заключается в том, что он относится к одному и тому же уровню энергии с главным квантовым числом $n = 1$.

Проанализируем превращение электрон-позитронной пары в фотон (рис. 2, а). В вершину γ^μ входят частица и античастица. По закону сохранения энергии и импульса фотон имеет энергию $2E$ и нулевой трехимпульс. В начальном состоянии электрону соответствует биспинор u_1^- , а позитрону – биспинор u_2^- . По правилам соответствия находим для фермионной линии: $\bar{u}_2^-(\vec{q}) \gamma^\mu u_1^-(\vec{q})$. Рождение пары иллюстрирует диаграмма на рис. 2, б.

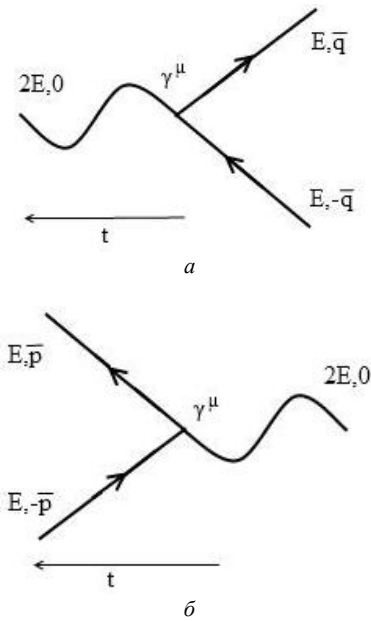


Рис. 2. Рождение и уничтожение электрон-позитронной пары

В вершину входит позитрон в конечном состоянии – биспинор $\bar{u}_2^+(\vec{p})$ и выходит электрон – биспинор $u_1^+(\vec{p})$. Схеме соответствует произведение матриц: $\bar{u}_1^+(\vec{p}) \gamma^\mu u_2^+(\vec{p})$. В целом процесс виртуального уничтожения и рождения характеризуется амплитудой

$$T_e^{(2)}(\vec{p}, \vec{q}) = -\frac{e^2}{4E^2} [\bar{u}_1^+(\vec{p}) \gamma^\mu u_2^+(\vec{p})] \times (15) \\ \times [\bar{u}_2^-(\vec{q}) \gamma^\mu u_1^-(\vec{q})].$$

Перемножение матриц в этом выражении невозможно из-за неясности, к какой из матриц относится фактор вершины γ^μ .

Однако можно воспользоваться тем, что из матриц Дирака можно составить систему независимых величин, которые по своим трансформационным свойствам соответствуют скаляру S , четырехвектору V , четырехмерному антисимметричному тензору второго ранга T , аксиальному четырехвектору A и псевдоскаляру P [7]. Эта система матриц ($1, \gamma_\alpha, \sigma_{\alpha\beta}, \gamma_5 \gamma_\alpha, \gamma_5$) обладает свойствами полноты и поэтому любую билинейную комбинацию матриц можно представить в виде разложения



$$(\bar{a}Q_i b)(\bar{c}Q^i d) = \sum_k C_{ik}(\bar{a}Q_k d)(\bar{c}Q^k b). \quad (16)$$

В тождестве Фирца \bar{a} , b , \bar{c} , d – биспиноры, $Q_s = I$, $Q_v = \gamma_\alpha$, $Q_T = \sigma_{\alpha\beta}$, $Q_p = \gamma_5$, $Q_A = \gamma_5 \gamma_\alpha$:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \vec{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ -\vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix},$$

$$\gamma^5 = -\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$\sigma^{\alpha p} = \frac{1}{2}(\gamma^\alpha \gamma^p - \gamma^p \gamma^\alpha).$$

Пусть в разложении Фирца

$$\bar{a} = \bar{u}_1^+, \quad b = u_2^+, \quad \bar{c} = \bar{u}_2^-, \quad d = u_1^-.$$

Тогда обкладки операторов в левой части тождества Фирца (16) те же, что в обменном канале взаимодействия. В правой же части обкладки \bar{u}_1^+ , u_1^- , \bar{u}_2^- , u_2^+ те же, что и в амплитуде прямого взаимодействия $T_d^{(2)}$. Таким образом, тождество Фирца позволяет свести матричную структуру обменного взаимодействия к сумме прямых взаимодействий с ядрами Q_k .

В диаграмме прямого взаимодействия четырехимпульс виртуального фотона равен разности импульсов двух частиц $k_0 = 0$, $\vec{k} = \vec{p} - \vec{q}$, в диаграмме же аннигиляционного типа $k_0 = 2E$, $\vec{k} = 0$. В этой связи формулу

$$\Delta V^{(2)}(\vec{p}, \vec{q}) = V^{(2)} - v_c$$

следует понимать как

$$\Delta V^{(2)} = V_d^{(2)} - v_c + V_e^{(2)}. \quad (17)$$

Добавочное расщепление основного уровня энергии

$$\Delta E_e = \frac{1}{(2\pi)^6} \int d\vec{p} d\vec{q} \psi_c^*(\vec{p}) V_e^{(2)}(\vec{p}, \vec{q}) \psi_c(\vec{q}), \quad (18)$$

где

$$\begin{aligned} V_e^{(2)}(\vec{p}, \vec{q}) &= T_e^{(2)}(\vec{p}, \vec{q}) = \\ &= -\frac{e^2}{4E^2} [\bar{u}_1^+(\vec{p}) \gamma^\mu u_2^+(-\vec{p})] \times \\ &\quad \times [\bar{u}_2^-(\vec{q}) \gamma^\mu u_1^-(\vec{q})]. \end{aligned} \quad (19)$$

При трансформации этой формулы с помощью теоремы Фирца учтем, что сверхтонкое расщепление уровня энергии является следствием взаимодействия магнитных моментов частиц и поэтому математически его выражение должно быть пропорционально произведению $(\vec{S}_1, \vec{S}_2) = \frac{1}{4}(\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2)$:

$$\begin{aligned} \Delta E_e &= |\psi_c(0)|^2 \int d\vec{p} d\vec{q} \delta(\vec{p}) V_e^{(2)}(0,0) \delta(\vec{q}) = \\ &= \frac{\alpha^3 \mu^3}{\pi} \frac{e^2}{8m^2} \langle \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2 \rangle \Big|_{S=0}^{S=1} = \frac{1}{4} \alpha^4 m. \end{aligned} \quad (20)$$

Виртуальные превращения фотона в электрон-позитронную пару и пары электрон-позитрон в фотон оказывают важное влияние на электромагнитное взаимодействие частиц в релятивистской теории. Масса позитрона чрезвычайно мала по сравнению с массой водорода. Энергия ионизации позитрония равна 6.8 эВ (для водорода 13.55 эВ). Принципиально все эти явления объясняются прямым взаимодействием электрона и позитрона.

Итак, уровни энергии позитрония можно классифицировать по полному спину, принимающему значения $S = 0$ (для парапозитрония) и $S = 1$ (для ортопозитрония). Существенное отличие от других экзотических атомов – наличие аннигиляционного канала. Величина же расщепления основного уровня от аннигиляционного канала составляет

$$\Delta E_e = \frac{1}{4} \alpha^4 m, \quad \frac{\Delta E_d}{\Delta E_e} = \frac{4}{3} \approx 1.3,$$

и имеет тот же порядок, что и расщепление ΔE_d от прямого канала взаимодействия.

Таким образом, учитывая как прямой, так и аннигиляционный каналы взаимодействия, для полной поправки к основному уровню энергии позитрония за счет сверхтонкого расщепления с точностью до α^4 получаем

$$\Delta E^{th} = 2.0337 \times 10^5 \text{ МГц.}$$

Последняя величина может быть измерена экспериментально, например с помощью эффекта Зеемана в позитронии. Эксперимент с большой точностью дает значение



$$\Delta E^{\text{exp}} = 2,0336 \pm 0,0002 \times 10^5 \text{ МГц},$$

что хорошо согласуется с теоретическим результатом. Сравнение теоретического и экспериментального значений дает одно из важнейших подтверждений основных положений КЭД. Кроме того, оно может быть положено в основу прецизионного определения фундаментальных констант постоянных Ридберга и тонкой структуры α .

Теоретические данные о времени жизни парапозитрония можно получить исследуя обменные двухфотонные диаграммы (рис. 3).

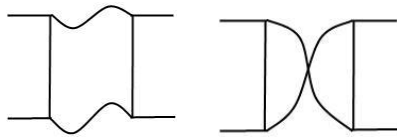


Рис. 3. Обменные двухфотонные взаимодействия парапозитрония

Сумма этих диаграмм имеет неупругое двухфотонное промежуточное состояние, поэтому мнимая часть соответствующего ей потенциала в области $E < 4m^2$ отлична от нуля. Для связанных состояний мнимая часть квазипотенциала, описывающая неупругие процессы, характеризует вероятность распада парапозитрония на два фотона. Применяя к рассматриваемым диаграммам фейнмановские правила соответствия, имеем

$$T^{(4)}(\vec{p}, \vec{q}, E) = -\frac{\alpha m}{2\pi^2} |\psi_c(0)|^2 \times \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{p} \frac{1}{p^4} T^{(4)}(\vec{p}, 0) + \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{q} \frac{1}{q^4} T^{(4)}(0, \vec{q}) \right\},$$

где

$$T^{(4)}(\vec{p}, \vec{q}) = -\bar{u}_1^+(\vec{p}) u_2^-(-\vec{q}) \times \bar{C} M_7 C \bar{u}_2^+(-\vec{p}) u_1^-(\vec{q}).$$

В приближении больших компонент, после выполнения контурного интегрирования и интегрирования по угловым переменным, находим:

$$\Delta E_i = \frac{4\alpha^2}{\pi m} |\psi_c(0)|^2 \langle 2 - S^2 \rangle \int_0^{\infty} \frac{dp}{p^2} \times \int_0^{\infty} dk \left\{ \frac{k}{(k+m)} \ln \frac{\sqrt{(k+p)^2 + m^2} + k + m}{(\sqrt{(k-p)^2 + m^2} + k + m)} - \frac{2k}{\sqrt{k^2 + m^2}} \ln \frac{\sqrt{(k+p)^2 + m^2} + \sqrt{k^2}}{(\sqrt{(k-p)^2 + m^2} + \sqrt{k^2})} + \right.$$

$$\left. + \frac{k}{(k-m+i\delta)} \ln \frac{\sqrt{(k+p)^2 + m^2} + k - m}{(\sqrt{(k-p)^2 + m^2} + k - m)} \right\}.$$

Действительная часть выражения ΔE_i представляет собой вклад в сверхтонкое расщепление S -состояния. Мнимая же часть величины дает вероятность распада позитрония на два фотона,

$$\text{Im} \Delta E_i = 2i\alpha^2 |\psi_c(0)|^2 \langle S^2 - 2 \rangle \times \int_0^{\infty} \frac{dp}{p^2} \int_0^{\infty} dk \delta(k-m) \ln \frac{(p^2 + 2k(m+p))}{(p^2 - 2k(m-p))},$$

и приводит к результату

$$\Delta W_{zj} = -2 \text{Im} \Delta E_i = \frac{\alpha^5 m}{2} = 0.804 \times 10^{10} \text{ с}^{-1}.$$

Время жизни парапозитрония определяется как обратная величина

$$\tau = \frac{1}{\Delta W_{zj}} = (804 \times 10^7)^{-1} = 1.25 \times 10^{-10} \text{ с}.$$

Теоретическое значение τ подтверждается с хорошей точностью в эксперименте.

Теория водородоподобных систем имеет достаточно надежную основу, чего нельзя порой сказать о других разделах теории элементарных частиц [7]. Замечание это не потеряло актуальности и в настоящее время. Исследования спектров экзотических атомов играют важную роль в фундаментальных разделах физики, химии, астрофизики.

Авторы выражают благодарность профессору Р. Н. Фаустову за плодотворное творческое сотрудничество, профессору В. М. Аникину за внимание к работе.

Список литературы

1. Бархон Э. Экзотические атомы // УФН. 1972. Т. 106, № 3. С. 527–548.
2. Меньшиков Л. И., Елисеев М. К. Некоторые вопросы физики экзотических атомов // УФН. 2001. Т. 171, № 2. С. 149–185.
3. Бойкова Н. А., Тюхтяев Ю. Н., Фаустов Р. Н. Расчет поправок порядка $\alpha^6 \ln \alpha$ в сверхтонкое расщепление основного уровня позитрония от диаграмм прямого канала. Препринт Р2-81-457 / ОИЯИ. Дубна, 1981. 7 с.
4. Боголюбов Н. Н., Ширков Д. В. Введение в теорию квантовых полей. М.: Наука, 1980. 321 с.
5. Фаустов Р. Н. Квазипотенциальный метод в задаче о связанных состояниях двух частиц // Международная зимняя школа теоретической физики при ОИЯИ: курс лекций. Дубна, 1964. Т. 2. С. 108–116.
6. Fermi E. К теории β -лучей // Zeitschrift fur Physik. 1930. Vol. 60. P. 320–335.
7. Окунь Л. Б. Лептоны и кварки. М.: Наука, 1990. 346 с.



УДК 519.713; 519.711.3; 621.793.7

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ОБРАЗОВАНИЯ НАНОСТРУКТУР ПРИ ПЛАЗМЕННОМ НАПЫЛЕНИИ ПОРИСТОПОРОШКОВЫХ ГИДРОКСИАПАТИТОВЫХ ПОКРЫТИЙ



А. В. Лясникова, И. Н. Антонов, В. Н. Лясников

Саратовский государственный технический университет
E-mail: lyasnikovaav@mail.ru

Предлагается физическая модель процесса образования наноструктур при плазменном напылении гидроксиапатитовых покрытий. Описана термодинамика нагревания частицы за время ее нахождения в плазменном факеле. Проведена оценка тепловых процессов на подложке и формирования тепловых полей в системе частица-подложка при плазменном напылении. Сделано предположение, что образование аморфных покрытий, состоящих из субмикронных частиц, происходит из-за деформации сдвига при контакте наносимого материала с подложкой, а наноразмерные кристаллы появляются вследствие очень быстрого охлаждения (закалки) этих субмикронных образований.

Ключевые слова: газодинамическая плазма, плазменное напыление, формирование покрытия, гидроксиапатит, наноструктуры, термодинамическая модель, температурное поле.

Model of the Processes Nanostructure Formation during Plasma Spraying Hydroxyapatite Porous-Powder Coatings

A. V. Lyasnikova, I. N. Antonov, V. N. Lyasnikov

We offer a physical model of the process nanostructure formation during plasma spraying hydroxyapatite coatings and described the thermodynamics of heating particle in the plasma torch. We analyzed thermal processes on the base and the formation of thermal fields in the system particle-base by plasma spraying. Possibly that the formation of amorphous coatings, consisting of submicron particles, happened because shear through by contact with the material and base and nanosized crystals appear as a result of very fast cooling (quenching) of the submicron structures.

Key words: gasdynamic plasma, plasma spraying, formation of coatings, hydroxyapatite, nanostructures, thermodynamic model, temperature field.

В настоящее время в различных областях техники, в том числе медицинской, широко применяются разного рода покрытия. Они могут быть диэлектрическими, проводящими, эмиссионными, антиэмиссионными, биосовместимыми, биоактивными и т.д. Гидроксиапатит и аналогичные ему биоактивные порошковые материалы активно применяются в современной стоматологии и травматологии для замещения костных дефектов как самостоятельно, так и в виде покрытий на поверхности металлических эндопротезов.

Требования, предъявляемые к покрытиям, определяются их назначением и областью применения, а также конструкцией изделия. Особое место в последнее время уде-

ляется получению покрытий состоящих из субмикронных и наноразмерных единиц.

Известен ряд методов получения покрытий, реализованных в серийных промышленных установках [1–3]. Остановимся на одном из них – электроплазменном [2].

Газодинамическая плазма представляет собой сложный физический (термодинамический, электродинамический и газодинамический) объект, поскольку она состоит из быстро движущихся нейтральных и заряженных частиц и широкого спектра электромагнитного излучения (в диапазоне от радио- до рентгеновского), испускаемого частицами плазмы при их индивидуальном или коллективном движении.

Характерные частоты излучения плазмы определяются угловыми скоростями поворота частиц при движении по криволинейным траекториям.

В разреженной и горячей плазме в де-возбуждении доминируют излучательные процессы, так что почти каждый акт столкновительного возбуждения сопровождается высвечиванием, а в плотной и холодной плазме в де-возбуждении преобладают столкновительные процессы, приводящие к установлению локального термодинамического равновесия (ЛТР) плазмы, в котором населённости уровней N_n близки к больцмановским N_b .

Для нас практический интерес представляет влияние характеристических параметров газодинамической (плотной и холодной) плазмы на внесенные в нее твердые напыляемые частицы металлов и неметаллов и построения термодинамической и квазиклассической (феноменологической) модели всего технологического цикла.

Особенностью технологического процесса плазменного напыления является то, что в плазме происходит не только тепловое



плавление вносимых частиц, но и их физико-химическая активация под действием УФ- и ИК-излучений, электрического поля плазмы, кинетической энергии газовой струи и теплового удара (скорость подъема температуры порядка 10^2 – 10^3 град/с), а сам процесс протекает в неравновесных гетерофазных условиях.

Ограничимся влиянием теплового (инфракрасного) поля на объект обработки (напыляемого материала) и попытаемся установить термодинамические закономерности, протекающие в цепочке: холодная частица – частица в плазменном факеле – частица на напыляемой подложке.

Наиболее точно взаимодействие электромагнитного поля с веществом следует рассматривать как взаимодействие двух квантовых систем: фотонов, образующих поле, и элементарных частиц вещества. Поведение и тех и других описывается квантовыми законами. Однако во многих важных для практики случаях в целях упрощения анализа вместо квантованного электромагнитного поля вводят в рассмотрение поле, описываемое обычными законами классической теории. В такой приближенной постановке задачи речь уже будет идти о взаимодействии системы, описываемой классическими законами (электромагнитное поле), с квантовой системой, представляющей вещество. Подобный метод анализа называется полуклассическим.

Нас будет интересовать взаимодействие частицы твердого вещества с диаметром порядка 40–90 мкм с тепловым излучением плазмы при температуре 6000–7000 К. Время этого взаимодействия составляет менее 10^{-1} – 10^{-2} с. Практически это взаимодействие происходит в режиме термоудара, и строгая интерпретация этого взаимодействия должна основываться на решении задачи неравновесной термодинамики для нестационарных и быстрых процессов. Ограничимся здесь термодинамической моделью взаимодействия частиц с температурным полем газовой плазмы в равновесно-стационарных условиях для того, чтобы сделать оценочные выводы о механизмах процессов, протекающих при нанесении покрытий и появлении наноструктурных объектов в эксперименте.

Запишем основное уравнение теплопроводности:

$$\frac{\partial T}{\partial \bar{r}} = \frac{\lambda}{c\rho} d\omega(\text{grad}T) + \frac{q_v}{c\rho} \quad (1)$$

или

$$\frac{\partial T}{\partial \bar{r}} = \frac{\lambda}{c\rho} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \frac{q_v}{c\rho},$$

где T – температурное поле в веществе; c – удельная теплоёмкость вещества; ρ – удельная плотность вещества; q_v – плотность энергии внутреннего источника.

Это уравнение позволяет решить задачу о распределении температурного поля T в порошке гидроксиапатита, находящемся в газовой плазме аргона.

Пусть частица представляет собой шар (полый) с радиусами r_1 , r_2 . Материал, из которого изготовлен шар, имеет коэффициент теплопроводности λ . Температура на внутренней стенке шара T_{C_1} , на внешней T_{C_2} (рис. 1).

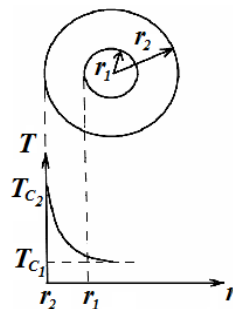


Рис. 1. Модель частицы для расчета температурного поля: r_1 , T_{C_1} – радиус и температура внутренней стенки сферы; r_2 , T_{C_2} – радиус и температура внешней стенки сферы

Проведём расчёт температурных полей в шаре, считая, что внутренние источники $q_v = 0$ и $\frac{\partial T}{\partial t} = 0$. Тогда уравнение теплопроводности Лапласа (1) в сферической системе координат будет иметь вид

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial T}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial^2 T}{\partial \psi^2} = 0.$$

В нашем случае T не зависит от θ и ψ , отсюда:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} = 0.$$

Зададим граничные условия 1-го рода: при $r = r_1$ $T = T_{C_1}$, при $r = r_2$ $T = T_{C_2}$.



Определим распределение температуры по толщине сферической стенки частицы. Представим уравнение (1) в виде

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dT}{dr} \right) = 0 \left(= \frac{1}{r^2} \left[2r \frac{dT}{dr} + r^2 \frac{d^2T}{dr^2} \right] = \right) = \frac{d^2T}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dT}{dr}. \quad (2)$$

После двойного интегрирования уравнения (2) получим:

$$T(r) = T_{C_1} + (T_{C_2} - T_{C_1}) \left(\frac{r_1 r_2}{r_2 - r_1} \right) \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r} \right). \quad (3)$$

Температура $T(r)$ частицы изменяется от поверхности к центру по гиперболической зависимости (см. рис. 1).

Количество теплоты, передаваемое через сферическую поверхность в единицу времени:

$$Q = -\lambda \frac{dT}{dr} F = -\lambda \frac{dT}{dr} 4\pi r^2 = 4\pi\lambda (T_{C_1} - T_{C_2}) \frac{r_2 r_1}{r_2 - r_1}. \quad (4)$$

В решаемой задаче внутренний источник $q_V = 0$. Однако в ряде случаев внутри объекта исследования могут протекать процессы, в результате которых будет выделяться или поглощаться теплота, в частности, химические или физико-химические реакции (в гидроксипатите возможно взрывное испарение кристаллогидратной воды).

Проведем оценку теплопроводности λ по формуле

$$\lambda = \frac{|q|}{|\text{grad } T|}, \quad (5)$$

λ не зависит от $\text{grad } T$, а зависит от агрегатного состояния вещества, его атомно-молекулярного строения, температуры, давления и т.д.

Для твёрдых веществ $\lambda = \lambda_3 + \lambda_{\text{реш}}$, где λ_3 – электронная и $\lambda_{\text{реш}}$ – решеточная теплопроводности.

Если $\lambda_3 \ll \lambda_{\text{реш}}$, то это диэлектрик, тогда $\lambda \approx c\bar{V}\bar{l}$, ($\lambda \approx \lambda_{\text{реш}}$), где c – теплоёмкость диэлектрика; \bar{V} – средняя скорость фононов; \bar{l} – средняя длина свободного пробега фононов.

Температурная зависимость $\lambda(T)$ определяется от $T \Rightarrow c(T)$ и $\bar{e}(T)$. Если $\lambda_3 \gg \lambda_{\text{реш}}$ ($\lambda \approx \lambda_3$), то это металл и теплопроводность:

$$\frac{\lambda}{\sigma} \approx \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k}{e} \right)^2 T,$$

где e – заряд; k – постоянная Больцмана; σ – электрическая проводимость.

$$\text{Исследуем } \left| \frac{1}{\lambda} \frac{\partial \lambda}{\partial T} \right| \approx \text{const} \left[\frac{1}{\text{grad } T} \right];$$

$$\text{для металлов: } \left| \frac{\partial \lambda}{\partial T} \right| = \left| \frac{\pi^2 \sigma}{3} \left(\frac{k}{e} \right)^2 \right| = \text{const};$$

для диэлектриков:

$$\frac{\partial \lambda}{\partial T} = \frac{\partial c(T)}{\partial T} \bar{e}(T) \bar{V} + \frac{\partial \bar{e}(T)}{\partial T} c(T) \bar{V}. \quad (6)$$

Как видно, для диэлектриков изменение теплопроводности от температуры имеет сложное соотношение. Здесь необходимо знать температурную зависимость теплоемкости и изменения заряда. Однако при феноменологической оценке и учете незначительных геометрических размеров напыляемых частиц, можно пренебречь этими температурными зависимостями и провести среднюю численную оценку количества теплоты, приобретенной частицей и ее температуры за время нахождения в плазме.

Проведем теперь оценку тепловых процессов на подложке и формирования тепловых полей в системе частица-подложка при плазменном напылении.

Рассмотрим стадии формирования пленочного покрытия. Пусть частица, нагретая плазмой, при соприкосновении с подложкой передает ей свою энергию с образованием на ней сплэта. Если предположить, что основная часть энергии частицы передается подложке, то

$$Q = \alpha_1 F (t_r - t_n),$$

где α_1 – коэффициент теплоотдачи; F – условная расчетная поверхность теплообмена; t_r – средняя температура частицы; t_n – температура подложки.

Распределение температуры частицы от поверхности к центру нами рассчитано. Из этих расчетов возьмем усредненное значение t_n для случаев, когда частица расплавлена или частица расплавлена по поверхности.



Средняя скорость капли материала при свободном парении:

$$\omega_k = 0,5\sqrt{2gh},$$

где h – высота падения.

В зависимости от продолжительности полета капли возможны три ее состояния: жидкое, кристаллическое и твердое.

Время полета капли представим в виде

$$\tau_p = \frac{C_p \cdot m_k}{\alpha \cdot S_k} \ln \left(\frac{T_k - T_0}{T_{пл} - T_0} \right), \quad (7)$$

где C_p – удельная теплоемкость расплава материала; m_k – масса капли; $S_k = 0,785d_k^2$ – площадь поверхности капли; $T_k, T_{пл}$ – температура капли в начале полета и температура плавления металла соответственно; T_0 – температура окружающей среды (средняя); α – коэффициент теплоотдачи.

Коэффициент теплоотдачи определяется по формуле

$$\alpha = \frac{Nu \cdot \lambda_b}{d_k},$$

где Nu – число Нуссельта; $\lambda_b = 22 \cdot 10^{-3}$ – коэффициент теплопроводности (газа воздуха); d_k – диаметр капли.

Теперь, если $\tau \leq \tau_p$, то конечную температуру определим как

$$T_{кон} = T_0 + (T_k - T_0) \exp \left(- \frac{\alpha \cdot S_k}{C_p \cdot m_k} \tau \right). \quad (8)$$

Время полета капли, в течение которого происходит ее кристаллизация, будет:

$$\tau_{кр} = \frac{m_k \cdot C_{кр}}{\alpha \cdot S_k (T_{пл} - T_0)}, \quad (9)$$

где $C_{кр}$ – удельная теплота кристаллизации.

Если $\tau_p < \tau \leq (\tau_p + \tau_{кр})$, то конечная температура капли будет определена как:

$$T_{кон} = T_{пл}. \quad (10)$$

Если $\tau > (\tau_p + \tau_{кр})$, то конечная температура капли в твердом состоянии определяется как:

$$T_{кон} = T_0 + (T_{пл} - T_0) \exp \left(- \frac{\alpha \cdot S_k}{C_k \cdot m_k} (\tau - (\tau_p + \tau_{кр})) \right), \quad (11)$$

где C_k – удельная теплоемкость металла.

Количество тепла, отдаваемое каплей твердой поверхности, на которую она падает, вычисляется как:

$$W = V_k \cdot \rho_k \cdot C_k (T_{кон} - T_{пов}),$$

где $T_{пов}$ – температура поверхности подложки.

Расчеты температурных полей при взаимодействии частицы с подложкой позволяют оценить формирования структуры сплэта на подложке. В момент касания частица отдает свою тепловую энергию подложке, подплавляет ее, предопределяя основу качественного сцепления (рис. 2). Как показано на температурной диаграмме, мы получаем градиент поля в различных направлениях, в том числе и в плоскости подложки, что создает механические напряжения при формировании покрытия и как следствие канальную структуру при его застывании.

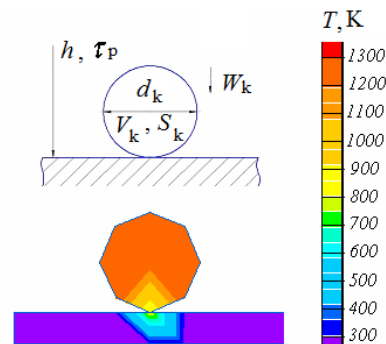


Рис. 2. Расчет температурных полей при взаимодействии частицы с подложкой: $\lambda_{подл} = 18,85$ Вт/(мК); $\lambda_ч = 0,1$ Вт/(мК); $T_{пов} = 300$ К; $T_{пов.ч} = 1300$ К

При нанесении газоплазменной струей на титановую подложку порошка гидроксиапатита (дисперсность порошка 40÷90 мкм) наблюдается образование покрытия с различной морфологией с чередованием в ней наночастиц, концентрация которых меняется от характеристик процесса нанесения этого покрытия (рис. 3).

Здесь появление субмикронных и наноразмерных структурных образований на поверхности покрытия также определяется начальными процессами взаимодействия наносимой частицы и основы.

Процесс деформации капли (частицы) на твердой подложке изучался в работе [3], где рассматриваются сценарии, протекающие на границе между частицей и подложкой в зависимости от соотношения между температурой T_c , установившейся в контакте, и температурами T_{pm} и T_{bm} плавления материалов частицы и основы.

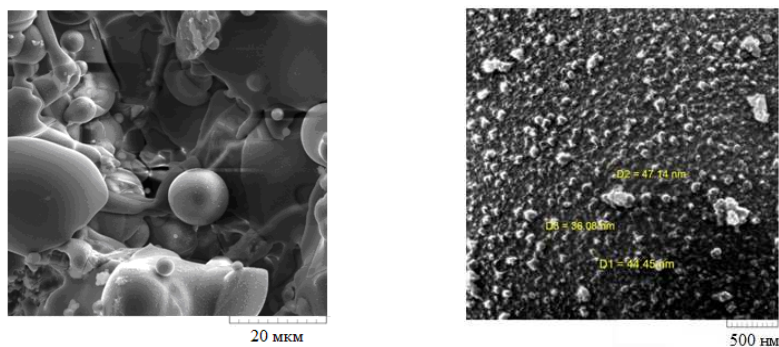


Рис. 3. Микрофотографии образцов с плазмонапыленным гидроксиапатитовым покрытием

Эти критерии укладываются в предложенную нами модель взаимодействия частицы с подложкой и распределением тепловых полей между ними. Однако они не дают исчерпывающего ответа на появление наноструктур в структуре нанесенного гидроксиапатитового покрытия.

Напомним, что процессы, протекающие в условиях газодинамического плазменного напыления при взаимодействии наносимой частицы с поверхностью, характеризуются высокими скоростями деформации (до 10^5 с⁻¹ и выше), соударения с подложкой (порядка 100 м/с), охлаждения (до 10^7 К/с и более) и аномально высокими плотностями тепловых потоков (до 10^8 Вт/м² и выше). Поэтому при затвердевании материал может находиться в метастабильном или аморфном состояниях. Аморфизация пленки покрытия происходит при образовании субмикронных частиц из-за возникающей деформации сдвига в частице при ее контакте с подложкой, с одной стороны, а их очень быстрое охлаждение (закалка) к образованию агрегированных наноразмерных кристаллов при поликристаллизации, с другой стороны.

Процессы, при которых в материалах появляются субмикронные и наночастицы, сопровождаются градиентными и высокоскоростными тепловыми и механическими воздействиями на них. Это происходит, например, при обработке металлов, сплавов и композитов методом интенсивной пластической деформации, при образовании из термопластичных полимеров ультрадисперсных порошков под действием высокого давления и деформации сдвига, в технологии самораспространяющегося высокотемпературного синтеза при быстром охлаждении сплавов (порядка 10^4 К/с) [4, 5].

Деформация сдвига может возникать при встрече напыляемой частицы с подложкой, и вероятность появления субмикронных и наночастиц, по-видимому, будет зависеть от угла атаки (направления струи) наносимых частиц. Влияние УЗ воздействия на подложку может моделировать (динамически изменять) этот угол атаки и приводить к появлению большего количества наночастиц и аморфных поликристаллических зон в покрытии, что и наблюдается в эксперименте.

Таким образом, при плазменном напылении появление наночастиц в структуре покрытия возможно при изменении таких характеристических параметров, как температура, время нахождения частицы в плазме, геометрия (угол атаки) и механика (давление струи) напыления. Для более полного обоснования предложенной модели образования наноструктур при плазменном напылении биоактивных (гидроксиапатитовых) покрытий будет проведена серия теоретических и экспериментальных работ.

Работа выполнена при поддержке федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы (гос. контракт П2535 от 20.11.2009 г.).

Список литературы

1. Кудинов В. В. Плазменные покрытия. М.: Наука, 1977. 184 с.
2. Нераспыляемые плазмонапыленные газопоглотители. Свойства. Технология. Оборудование. Применение / Н. В. Бекренев, Д. Б. Быков, В. Н. Лясников, А. Н. Тихонов. Саратов : Изд-во Сарат. ун-та, 1996. 200 с.
3. Солоненко О. П., Алхимов А. П., Марусин В. В., Оришич А. М. Высокоэнергетические процессы обработки материалов / Новосибирск : Наука. Сиб. издат. фирма РАН, 2000. 425 с.
4. Чеховой А. Н. Нанотехнологии: новый этап в рациональном природопользовании // Интеграл. 2004. № 5 (19). С. 145–154.
5. Самораспространяющийся высокотемпературный синтез : теория и практика / В. В. Барзыкин [и др.] / отв. ред. А. Е. Сычев. Черногловка: Территория, 2001. 432 с.

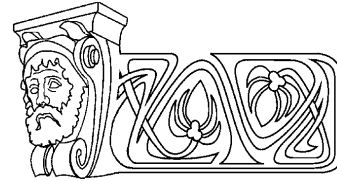


УДК 621.372.8:537.876.46

ПОЧЕМУ НЕ МОЖЕТ БЫТЬ ИСПОЛЬЗОВАН ОТРИЦАТЕЛЬНЫЙ ПОКАЗАТЕЛЬ ПРЕЛОМЛЕНИЯ

М. В. Давидович

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



Показано, что используемый в оптике и электродинамике сплошных изотропных сред показатель преломления n (индекс рефракции, коэффициент замедления) для левосторонних метаматериалов и вообще сред с отрицательной рефракцией нельзя ввести единым образом и считать его действительным, а в особенности отрицательным. Данный коэффициент в указанных средах вообще вводить нецелесообразно.

Ключевые слова: показатель преломления, индекс рефракции, коэффициент замедления, метаматериалы, фотонные кристаллы, дисперсия, отрицательная рефракция, левые среды.

Why the Refractive Index Couldn't Be Negative

M. V. Davidovich

It had been shown that for left-handed metamaterials and generally for negative refraction media the refraction index could not be introduced uniformly and could not be considered as real, especially as negative. This index for above referred media is not expedient.

Key words: refractive index, retardation coefficient, negative refraction, left-handed media, metamaterials.

В литературе широко распространено мнение, согласно которому у левых сред, обладающих отрицательной рефракцией, отрицателен и показатель преломления. В 1967 г. В.Г. Веселаго опубликовал работу, где рассмотрел свойства среды (которую он назвал левой) со скалярными действительными одновременно отрицательными проницаемостями ε и μ [1]. Для бесконечной в двух направлениях (x, y) пластины из такого материала конечной в направлении оси z толщины d он исследовал геометрическую (лучевую) дифракцию и нашел аномальный закон преломления типа закона Снеллиуса (Снелля), а также и некоторые другие аномальные эффекты: Допплера, Вавилова–Черенкова, светового давления. С 80-х по 90-е гг. прошлого века усиленно начало развиваться направление исследования искусственных сред (ИС), которые изучались еще в 40–50-х гг. и тогда назывались искусственными диэлектриками [2–8]. Затем за такими ИС закрепилось наиболее общее название – метамате-

риалы. В 1990-е гг. стали широко исследоваться периодические метаматериалы с проволочными включениями различной формы (wire media), получившие затем название металлических фотонные кристаллы (ФК). В 2000 г. Д. Пендри опубликовал статью [9], в которой утверждал, что линза Веселаго (далее в литературе часто называемая идеальной линзой Пендри) преодолевает дифракционный предел. Однако рассмотрение Пендри основано на грубых ошибках (см., например, [6–8, 10–19] и дискуссию в них). После публикации [2] и аналогичных ей, включая и экспериментальные работы [20], окончательно утвердились такие понятия, как среда Веселаго (Veselago medium), двойные отрицательные материалы (double negative materials – DNM, DNG), среды обратной волны (backward media), левые (левосторонние) среды (left-handed media – LHM), проволочные фотонные кристаллы (wire photonic crystals), сложные среды (complex media), среды с отрицательной групповой скоростью (NGV), среды с отрицательным индексом рефракции (показателем преломления) n и ряд других, а число публикаций по данному вопросу растет лавинообразно. Хотя термин «отрицательная рефракция» вполне устоявшийся и был известен давно [5–8, 18, 21, 22], а указанное явление имеет место также в замедляющих системах, кристаллах, диэлектрических ФК, где направление переноса энергии плоской монохроматической волной может составлять тупой угол с направлением движения фазы, термин «отрицательный показатель преломления» (коэффициент замедления, коэффициент рефракции), на наш взгляд, неправильный. Далее будет показано, почему он не может быть отрицательным и почему его вообще нецелесообразно вводить в средах с отрицательной рефракцией. Кста-



ти, в ряде работ вместо него наряду с термином «отрицательная рефракция» используется термин «отрицательное преломление» [18] или «отрицательные среды» [22], а в работах [5–8, 18] и ряде других дана история исследований отрицательной рефракции, восходящая к более ранним работам Лэмба (1904), Лауэ (1905), Мандельштама (1940), к работам, связанным с лампами и антеннами обратной волны.

Бытует мнение, что для левосторонних сред с $\varepsilon < 0$, $\mu < 0$ можно извлечь квадратный корень так: $n = -\sqrt{\varepsilon\mu}$, т.е. у них отрицательный коэффициент замедления (показатель преломления, индекс рефракции). Рассмотрим, как получается n . В своей работе [1] В.Г. Веселаго изначально исходит из дисперсионного уравнения (ДУ) для анизотропной среды [1]:

$$\det A = 0, \quad A_{ik} = \omega^2 \hat{\varepsilon}_{ii} \hat{\mu}_{ik} / c^2 - \bar{k}^2 \delta_{ik} + k_i k_k. \quad (1)$$

Обозначая $k_0^2 = \omega^2 / c^2$, кроме (1) можно, вообще говоря, использовать и уравнение

$$\det B = 0, \quad B_{ik} = k_0^2 \hat{\mu}_{ii} \hat{\varepsilon}_{ik} - \bar{k}^2 \delta_{ik} + k_i k_k. \quad (2)$$

Далее В. Г. Веселаго предполагает среду изотропной и записывает ДУ (1) так:

$$\bar{k}^2 - k_0^2 n^2 = 0, \quad n^2 = \varepsilon\mu. \quad (3)$$

Из уравнения (3) он определяет n и вводит показатель преломления в уравнения Максвелла, чего в общем случае делать не стоит, поскольку в этих уравнениях изначально присутствуют $\hat{\varepsilon}$ и $\hat{\mu}$ (либо используются более сложные материальные уравнения). Введение n может быть целесообразным в оптике изотропных сред. Однако ДУ (1) и (2) есть уравнения для определения дисперсии, т.е. зависимости $\bar{k} = \bar{k}(k_0)$, или обратной зависимости $k_0 = k_0(\bar{k})$. Если плоская волна распространяется вдоль оси z , т.е. $\bar{k} = \bar{z}_0 k_z$, то уравнение (3) дает два решения: $k_z^2 = k_0^2 \varepsilon\mu$, $k_z = \pm k_0 \sqrt{\varepsilon\mu}$, что соответствует прямой и обратной волнам, причем для корня следует брать арифметическое значение, т.е. при $\varepsilon < 0$ и $\mu < 0$ имеем $\sqrt{\varepsilon\mu} > 0$. Таким образом, выбор прямой или обратной волны

определяется знаком у k_z , а не у n . В общем случае диссипативных сред этот знак следует выбирать из условия $\text{Im}(k_z) < 0$ [22], т.е. волна с зависимостью $\exp(j\omega t - jk_z z)$ в среде затухает в направлении z переноса энергии. Последнее в диссипативных средах следует определять направлением вектора Пойнтинга [22–24], а не вектором групповой скорости, как это предлагается в большинстве работ. Такой выбор корня при $\varepsilon' < 0$ и $\mu' < 0$ дает обратную волну: $\text{Re}(k_z) < 0$. В изотропном случае оба рассмотрения [1] и настоящее эквивалентны, однако следует иметь в виду, что первичным в ДУ является зависимость $\bar{k} = \bar{k}(k_0)$, а не $n = n(k_0)$.

Все реальные левые среды (ЛНМ) являются бианизотропными с периодическими включениями определенных металлических элементов (обычно штырей и разомкнутых кольцевых резонаторов, Ω -элементов и т.п.). Электрофизические параметры метаматериала определяются путем гомогенизации [18, 25–38]. Последнюю желательно проводить на основе решения краевых задач определения дисперсии и полей для периодических структур (например, методом интегральных уравнений или плоских волн), затем на задании модели среды, например, в виде [37–39]

$$\begin{aligned} \bar{P}^e &= \varepsilon_0 (\hat{\varepsilon} - \hat{I}) \bar{E} + c^{-1} \hat{\zeta} \bar{H} = \varepsilon_0 \left[(\hat{\varepsilon} - \hat{I}) \bar{E} + Z_0 \hat{\zeta} \bar{H} \right], \\ \bar{P}^m &= \mu_0 (\hat{\mu} - \hat{I}) \bar{H} + c^{-1} \hat{\zeta} \bar{E} = \mu_0 \left[(\hat{\mu} - \hat{I}) \bar{H} + Z_0^{-1} \hat{\zeta} \bar{E} \right], \end{aligned}$$

и далее на определении параметров модели путем строгого или приближенного соответствия решения краевой задачи модели [37, 38]. Здесь $Z_0 = \sqrt{\mu_0 / \varepsilon_0}$, \bar{P}^e и \bar{P}^m – усредненные по ячейке дипольные моменты (электрический и магнитный), черта над полями означает усреднение. Эффективные тензорные параметры $\hat{\varepsilon}$, $\hat{\mu}$, $\hat{\zeta}$, $\hat{\zeta}$ среды при гомогенизации зависят от метода усреднения и определены, вообще говоря, для диапазона, по крайней мере $\lambda > D$, где D – характерный размер, связанный с областью усреднения (например, период ячейки). Кроме вычисления средних дипольных моментов ячейки для гомогенизации можно использовать сравнение результатов строгих и модельных ДУ



метаматериала, а также сравнение результатов задач падения под произвольными углами плоских волн на границу раздела вакуум–метаматериал [2, 37, 40], поскольку в этом случае теорему погашения Эвальда–Озеена [35] можно доказать. Эффективные параметры следует подбирать так, чтобы минимизировать соответствующие среднеквадратичные невязки [37, 40]. Для усредненных (с чертой) полей запишем

$$\vec{E} = \vec{A} \exp(j\omega t + j\vec{k}\vec{r}), \quad \vec{H} = \vec{C} \exp(j\omega t + j\vec{k}\vec{r}). \quad (4)$$

В общем случае из уравнений Максвелла следует не (1), а матричное уравнение [37, 39]

$$\begin{bmatrix} \hat{\varepsilon} & \hat{k}/k_0 + \hat{\xi} \\ \hat{\xi} - \hat{k}/k_0 & \hat{\mu} \end{bmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \vec{A} \\ Z_0 \vec{C} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

а также и ДУ в формах

$$\begin{aligned} & \left[(k_0^{-1}\hat{k} + \hat{\xi})\hat{\mu}^{-1}(k_0^{-1}\hat{k} - \hat{\xi}) + \hat{\varepsilon} \right] \vec{A} = 0, \\ & \left[(k_0^{-1}\hat{k} - \hat{\xi})\hat{\varepsilon}_e^{-1}(k_0^{-1}\hat{k} + \hat{\xi}) + \hat{\mu}_e \right] \vec{C} = 0, \end{aligned} \quad (5)$$

и в формах

$$\begin{aligned} & \det\left((k_0^{-1}\hat{k} + \hat{\xi})\hat{\mu}^{-1}(k_0^{-1}\hat{k} - \hat{\xi}) + \hat{\varepsilon}\right) = 0, \\ & \det\left((k_0^{-1}\hat{k} - \hat{\xi})\hat{\varepsilon}_e^{-1}(k_0^{-1}\hat{k} + \hat{\xi}) + \hat{\mu}_e\right) = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь введены тензоры кросс-поляризации $\hat{\xi}$, $\hat{\xi}$ и определены матрицы

$$\begin{aligned} \hat{k} &= \begin{bmatrix} 0 & -k_z & k_y \\ k_z & 0 & -k_x \\ -k_y & k_x & 0 \end{bmatrix}, \\ \hat{k}^2 &= \begin{bmatrix} -k_z^2 - k_y^2 & k_x k_y & k_z k_z \\ k_x k_y & -k_z^2 - k_x^2 & k_x k_y \\ k_z k_z & k_x k_y & -k_y^2 - k_x^2 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (7)$$

Из этих уравнений после гомогенизации и следует определять дисперсию $k_0 = f(\vec{k})$. Метаматериалы обладают пространственной дисперсией, т.е. их эффективные параметры являются нелокальными. Если есть два сорта включений, первые из которых дают вклад в основном в электрическую поляризацию, а вторые – в магнитную, причем они имеют слабую электромагнитную связь, то тензорами кросс-поляризации можно пренебречь: $\hat{\xi} = \hat{\xi} = 0$. Тогда

$$\left[\hat{k} \hat{\mu}^{-1} \hat{k} + k_0^2 \hat{\varepsilon} \right] \vec{A} = 0, \quad \left[\hat{k} \hat{\varepsilon}_e^{-1} \hat{k} + k_0^2 \hat{\mu} \right] \vec{C} = 0.$$

Если матрицы (7) коммутируют с обратным тензором $\hat{\mu}^{-1}$, то имеем

$$\left[\hat{k}^2 + k_0^2 \hat{\mu} \hat{\varepsilon} \right] \vec{A} = \left[\hat{k}^2 + k_0^2 \hat{n}^2 \right] \vec{A} = 0,$$

где

$$\begin{aligned} \hat{n} &= \sqrt{\hat{\mu} \hat{\varepsilon}} = \hat{n}' + j \hat{n}'' = \\ &= \sqrt{(\hat{\mu}' \hat{\varepsilon}' - \hat{\mu}'' \hat{\varepsilon}'') + j(\hat{\mu}'' \hat{\varepsilon}' + \hat{\mu}' \hat{\varepsilon}'')}. \end{aligned} \quad (8)$$

В случае малых потерь имеем:

$$\hat{n} = \hat{n}' [1 + j(\hat{\mu}'' \hat{\varepsilon}' + \hat{\mu}' \hat{\varepsilon}'') / (2\hat{n}'^2)],$$

при этом

$$\hat{n}' = \text{Re}(\hat{n}) = \sqrt{\hat{\mu}' \hat{\varepsilon}'},$$

$$\hat{n}'' = \text{Im}(\hat{n}) = (\hat{\mu}'' \hat{\varepsilon}' + \hat{\mu}' \hat{\varepsilon}'') / (2\hat{n}'). \quad (9)$$

Оба тензора (9) положительно определенные.

Можно также ввести и тензор $\hat{n} = \sqrt{\hat{\varepsilon} \hat{\mu}}$. Для

того чтобы они совпали, проницаемости должны коммутировать. Если направления осей декартовой системы координат совпадают с направлениями граней кубических ячеек периодичности, а указанные металлические включения симметрично расположены на этих гранях, то имеем упрощения: $\hat{\varepsilon} = \varepsilon \hat{I}$, $\hat{\mu} = \mu \hat{I}$, $\varepsilon = \varepsilon' - j\varepsilon''$, $\mu = \mu' - j\mu''$, $\varepsilon'' > 0$, $\mu'' > 0$. В общем случае знак в (4) следует выбирать так, чтобы в направлении $\vec{n}_0 = (\vec{\Pi} + \vec{\Pi}^*) / |\vec{\Pi} + \vec{\Pi}^*|$ движения энергии поле

затухало. Здесь $\vec{\Pi} = \vec{E} \times \vec{H}^* / 2$. Если при диагональном тензоре \hat{n} положить $k_x = k_y = 0$,

то имеем два решения: $k_z = \pm k_0 \hat{n}_x$ и $k_z = \pm k_0 \hat{n}_y$.

Здесь знак в диссипативных средах также выбирается из условия затухания в сторону распространения энергии. Для гипотетической среды $\varepsilon = \mu = -1$ в идеальной линзе Весселаго–Пендри (ЛВП), которая не может быть физически реализована, имеем $k_z = -k_0 n$ (обратная волна), где $n = \sqrt{(-1)(-1)} = 1$, что получается предельным переходом $\varepsilon'' \rightarrow 0$, $\mu'' \rightarrow 0$. Упомянутая экзотическая среда $\varepsilon = \mu = -1$ (антивакуум) не может быть создана в виде металлических ФК, вопреки утверждениям в [41], и формально соответствует разреженной бесстолкновительной плазме электрических и магнитных зарядов (монополей) на низких частотах [41]. Разре-



женность необходима, чтобы не учитывать собственные поля плазмы, приводящие к гиротропии, пространственной дисперсии и столкновениям. Для плотностей токов электрической (e) и магнитной (m) поляризации, поддерживающих в гипотетическом веществе с $\varepsilon = \mu = -1$ волну, имеем $\vec{J}_p^e = -2j\omega\varepsilon_0\vec{E}$ и $\vec{J}_p^m = -2j\omega\mu_0\vec{H}$, т.е. поля и соответствующие им токи поляризации находятся в противофазе. Применяя теорему Пойнтинга в комплексной форме с рассмотрением токов поляризации в вакууме, что эквивалентно учету среды, получим для плотности собственной энергии поля W_{EM} :

$$W_{EM} = W_{EM}^e + W_{EM}^m = \varepsilon_0 |\vec{E}|^2 / 4 + \mu_0 |\vec{H}|^2 / 4,$$

$$W_{EM} = W_{EM}^e + W_{EM}^m = \varepsilon_0 |\vec{E}|^2 / 4 + \mu_0 |\vec{H}|^2 / 4,$$

а для запасенных реактивных мощностей в среде (электрической и магнитной) найдем

$$P_r^e = \vec{E}\vec{J}_p^{e*} / 2 = j\omega\varepsilon_0 |\vec{E}|^2,$$

$$P_r^m = \vec{J}_p^m \vec{H}^* / 2 = -j\omega\mu_0 |\vec{H}|^2.$$

Поэтому имеем $W_{EM}^e = W_{EM}^m$, а реактивные (запасенные) мощности среды (электрическая и магнитная) равны, и им соответствуют равные запасенные плотности электрической и магнитной энергий вещества: $W_{MED}^e = W_{MED}^m = W_{EM}$, поскольку в рассматриваемой среде $\vec{H} = \sqrt{\varepsilon_0 / \mu_0} \vec{E}$. Это означает, что полная плотность энергии поле–вещество есть $W = 3W_{EM}$, а скорость энергии в три раза меньше скорости света: $v_e = c/3$. Это же следует из формул работы [41] для групповой скорости в плазме электрических и магнитных монополей: $|\vec{v}_g| = c/3$, $\vec{v}_g = -\vec{v}_p/3$. Распространение волны вызывает токи поляризации среды, а те, в свою очередь, поддерживают волну. Именно нахождение их в противофазе приводит к обратной волне. Однако энергия и переносящие ее фотоны движутся в прямом направлении от источника, что не может приводить к отрицательному световому давлению, так как импульс поля переносится в направлении вектора Пойнтинга (в рассмотренном случае в направлении \vec{n}_0 оси z). Следует заметить,

что в wire media без потерь и в рассматриваемых гипотетических бесстолкновительных средах всегда имеются абсолютно упруго рассеянные фотоны, сдвинутые по фазе относительно поля и движущиеся в обоих направлениях. Однако результирующий перенос энергии и импульса осуществляется в положительном направлении, а в результате интерференции волн фаза бежит назад. В работе [42] в этой связи допущена очевидная ошибка. Поскольку монополи Дирака до сих пор не открыты, а бесстолкновительную плазму создать нельзя в принципе, подобные среды следует считать гипотетическими. Из уравнения (6) при аналогичных предположениях следуют ДУ, в которые входит эрмитово-сопряженный тензор \hat{n}^* . Трудности введения $n < 0$ обсуждаются в [36], а в работе [43] предложено всегда считать $n > 0$, выбирая соответствующие знаки в решениях ДУ, в формуле Снелля и в других формулах.

Модель среды можно взять и в форме, используемой в [18] с учетом возбуждения экситонов. Такая модель удобна для природных кристаллов или метаматериалов с наноразмерными включениями, когда усреднение по физически бесконечно малому объему уже не работает, а их собственные проницаемости и поверхностные импедансы использовать неправомерно. В [18] показано, что в этом случае $\varepsilon(\omega)$, а особенно $\mu(\omega)$ имеют ограниченный физический смысл.

Выводы

Итак, нет единого действительного показателя преломления. Обе величины \hat{n} и \hat{n}^* , которые в обычном смысле могут соответствовать n , комплексные, и более того – тензорные. Вообще даже двух комплексных тензоров \hat{n} и \hat{n}^* для описания левосторонних сред недостаточно, и надо использовать четыре тензора. В гипотетическом случае отрицательных проницаемостей $\varepsilon < 0$, $\mu < 0$ можно ввести один действительный положительный показатель преломления (коэффициент замедления или коэффициент рефракции) $n = \sqrt{\varepsilon\mu}$, выбирая знак у k_z , соответствующий обратной волне, поскольку именно k_z (а не n) есть результат решения простей-



шего одномерного ДУ. Тогда этот показатель преломления имеет смысл замедления $n = |k_z|/k_0 = |\vec{v}_p|/c$. Принцип Ферма для такой гипотетической среды имеет такой же вид, как и в [43] с той лишь разницей, что вместо отрицательного n следует использовать отрицательный путь, так как фаза движется вспять движению энергии. Изменением знака модифицируется и закон Снелля [43]. Если обычная оптическая линза в конечной полосе частот абсолютно прозрачна (не имеет потерь), то фазовая и групповая скорости в указанной полосе равны: $\vec{v}_p = \vec{v}_g$ [23, 24]. Поэтому все лучи в фокус линзы приходят в фазе с одинаковым групповым временем задержки $\tau_g = \tau_p = 1 / \int |\vec{v}_p| dl = [c \int ndl]^{-1}$. В случае же идеальной ЛВП при фокусировке поля нормально расположенного точечного диполя все лучи в фокус приходят в фазе (нулевой), но с разными временами групповых задержек, лежащих в бесконечном интервале $4d/c \leq \tau_g < \infty$. Линза не фокусирует точно точечный квазистационарный источник. Тем более она не фокусирует короткий импульс, излученный этим источником, что, в частности, констатируется в [44]. Расположенный нормально на расстоянии $l < d$ гармонический диполь должен для фокусировки действовать бесконечно долго. Для касательного точечного диполя даже в этом случае полной фокусировки нет, так как его поле азимутально несимметрично, и диполь не создает сходящуюся в точку сферическую волну как в нормальном случае [17]. Кстати, во всей имеющейся по ЛВП литературе рассматривается фокусировка только для нормального диполя. Заметим также, что при конечном d и расположении диполя на конечном расстоянии теорема погашения для ЛВП не доказана и, по-видимому, не может быть доказана без введения промежуточных слоев [39]. Поэтому диполь, расположенный на расстоянии $l < d$ к «идеально согласованной» ЛВП, создает отраженную квазисферическую волну тем более сильную, чем меньше l . Строгая волновая картина изображения реального объекта дается комбинацией трехмерного векторного спектрального, а также и

поверхностного (или объемного) интегралов от распределения источников по его поверхности (или в его объеме) по всевозможным пространственным спектральным переменным k_x, k_y, k_z в диапазонах $(-\infty, \infty)$, включая распространяющиеся под всеми углами и затухающие («эванесцентные») волны. Такое интегральное преобразование дает изображение, т.е. переносит значение источника из точки \vec{r}' объекта в точку \vec{r} его наблюдения, а ядро преобразования есть тензорная функция Грина слоя. При этом нет никакого преодоления дифракционного предела. Плотности энергии и импульса, а также скорости их переноса определяются соответственно результатам работы [45], при этом световое (электромагнитное) давление всегда положительное.

Список литературы

1. Веселаго В. Г. Электродинамика веществ с одновременно отрицательными значениями ϵ и μ // УФН. 1967. Т. 92, вып. 3. С. 517–526.
2. Левин Л. Современная теория волноводов. М., 1954. 216 с.
3. Brown W. F. Dielectrics. Handbuch der Physik XVII. Berlin, 1956.
4. Brown W. Artificial dielectrics // Progress in dielectrics. 1960. Vol. 2. P. 195–225.
5. Силин Р. А. Необычные законы преломления и отражения. М., 1999. 80 с.
6. Силин Р. А., Чепурных И. П. О средах с отрицательной дисперсией // Радиотехника и электроника. 2001. Т. 46, № 10. С. 1212–1217.
7. Силин Р. А. Построение законов преломления и отражения с помощью изочастот // Радиотехника и электроника. 2002. Т. 47, № 2. С. 186–191.
8. Силин Р. А. О средах с необычными квазиоптическими свойствами // Исследовано в России. 2002. С. 948–951 [Электрон. журн.]. URL: <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2002/086.pdf>
9. Pendry J. B. Negative refraction makes a perfect lens // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 85, № 18. P. 3966–3969.
10. 't Hooft G. W. Comment on «Negative Refraction Makes a Perfect Lens» // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 87, № 24. P. 249701-1.
11. Williams J. M. Some problems with negative refraction // Phys. Rev. Lett. 2001. Vol. 87. P. 249703-1.
12. Garcia N., Nieto-Vesperinas M. Left-handed materials do not make a perfect lens // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 88, № 20. P. 207403-4.
13. Garcia N., Nieto-Vesperinas M. Erratum: Left-handed materials do not make a perfect lens // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 90. P. 229903-1.



14. Nieto-Vesperinas M., Garcia N. Nieto-Vesperinas and Garcia Reply // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 91. P. 099702-1.
15. Mump P. Критический взгляд на метаматериалы // РЭ. 2007. Т. 52, № 9. С. 1051–1058.
16. Valanju P. M., Walser R. M., Valanju A. P. Wave Refraction in Negative-Index Media: Always Positive and Very Inhomogeneous // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 88. P. 187401-4.
17. Шевченко В. В. О сверхфокусировке плоской линзы из отрицательного материала // Журн. радиоэлектроники. 2007. № 6 [Электрон. журн.]. URL: <http://jrt.cplire.ru/jre/jun07/5/text.html>
18. Агранович В. М., Гартштейн Ю. Н. Пространственная дисперсия и отрицательное преломление света // УФН. 2006. Т. 176, № 10. С. 1051–1068.
19. Блюх К. Ю., Блюх Ю. П. Что такое левые среды и чем они интересны? // УФН. 2004. Т. 174. С. 439–447.
20. Smith D. R., Padilla W. J., Vier D. C., Nemat-Nasser S. C., Schultz S. A composite medium with simultaneously negative permeability and permittivity // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 84, № 18. P. 4184–4187.
21. Агранович В. М., Гинзбург В. Л. Кристаллооптика с учетом пространственной дисперсии и теории экситонов. М., 1965. 376 с.
22. Шевченко В. В. Прямые и обратные волны: три определения, их взаимосвязь и условия применимости // УФН. 2007. Т. 177, № 3. С. 301–306.
23. Давидович М. В. О парадоксе Хартмана, туннелировании электромагнитных волн и сверхсветовых скоростях (отклик на статью А. Б. Шварцбурга «Туннелирование электромагнитных волн – парадоксы и перспективы») // УФН. 2009. Т. 179, № 4. С. 443–446.
24. Давидович М. В. О плотности электромагнитной энергии и ее скорости в среде с аномальной положительной дисперсией // Письма в ЖТФ. 2006. Т. 32, вып. 22. С. 53–63.
25. Bensoussan A., Lions J. L., Papanicolaou G. C. Homogenization in Deterministic and Stochastic Problems // Stochastic Problems in Dynamics / ed. B. L. Clarkson. L., 1977. P. 106–115.
26. Папаниколау Дж. Электромагнитные задачи для составных материалов в линейных и нелинейных режимах // Нелинейные электромагнитные волны. М., 1983. Гл. 9. С. 185–191.
27. Санчес-Паленсия Э. Неоднородные среды и теория колебаний. М., 1984. 472 с.
28. Бахвалов Н. С., Панасенко Г. П. Осреднение процессов в периодических средах. М., 1984. 372 с.
29. El Feddi M., Ren Z., Razeq A. Homogenization Technique for Maxwell Equations in Periodic Structures // IEEE Trans. 1997. Vol. Magnet. 33, № 2. P. 1382–1385.
30. Smith D. R., Schultz S., Markos P., Soukoulis C. M. Determination of permittivity and permeability of metamaterials from scattering data // Phys. Rev. 2002. Vol. B 65. P. 1951041–1951045.
31. Бардзокас Д. И., Зобнин А. И. Математическое моделирование физических процессов в композиционных материалах периодической структуры. М., 2003. 377 с.
32. Silveirinha M. G., Fernandes C. A. Homogenization of Metamaterial Surfaces and Slabs: The Crossed Wire Mesh Canonical Problem // IEEE Trans. 2005. Vol. AP-53, № 1. P. 59–69.
33. Silveirinha M. G., Fernandes C. A. Homogenization of 3-D-Connected and Nonconnected Wire Metamaterials // IEEE Trans. 2005. Vol. MTT-53, № 4. P. 1418–1430.
34. Ouchetto O., Zouhdi S., Bossavit A., Griso G., Miara B. Modeling of 3D periodic multiphase composites by homogenization // IEEE Microwave Theory and Techniques. 2006. Vol. MTT-54, № 6. Part 2. P. 2615–2619.
35. Симовский К. П. Об использовании формул Френеля для отражения и прохождения электромагнитных волн вне квазистатического приближения // Радиотехника и электроника. 2007. Т. 52, № 9. С. 1031–1050.
36. Виноградов А. П., Дорофеев А. В., Зухди С. К вопросу об эффективных параметрах метаматериалов // УФН. 2008. Т. 178, № 5. С. 511–518.
37. Davidovich M. V., Stephuk J. V. Homogenization of periodic artificial media // Modeling in Applied Electromagnetics and Electronics. Saratov, 2007. Iss. 8. P. 67–75.
38. Davidovich M. V., Stephuk J. V. Homogenization of periodic metamaterials // Mathematical Methods in Electromagnetic Theory: Proc. of 12th Intern. Conf. (MMET'2008). Odessa, Ukraine, 2008. P. 527–529.
39. Graglia R. D., Uslenghi P. L. E., Zich R. E. // IEEE Trans. 1991. Vol. AP-39, № 1. P. 83–90.
40. Давидович М. В. Фотонные кристаллы: функции Грина, интегродифференциальные уравнения, результаты моделирования // Изв. вузов. Радиофизика. 2006. Т. 49, № 2. С. 150–163.
41. Веселаго В. Г. Электродинамика материалов с отрицательным коэффициентом преломления // УФН. 2003. Т. 173, № 7. С. 790–794.
42. Веселаго В. Г. Перенос энергии, импульса и массы при распространении электромагнитной волны в среде с отрицательным преломлением // Исследовано в России. 2009. С. 279–289 [Электрон. журн.]. URL: [<http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2009/028.pdf>]
43. Pokrovsky A. L., Efros A. L. Sign of refractive index and group velocity in left-handed media // Solid State Commun. 2002. Vol. 125. P. 283–287.
44. Веселаго В. Г. О формулировке принципа Ферма для света, распространяющегося в веществах с отрицательным преломлением // УФН. 2002. Т. 172, № 10. С. 1215–1218.
45. Давидович М. В. О законах сохранения энергии и импульса электромагнитного поля в среде и при дифракции на проводящей пластине // УФН. 2010. Т. 180, № 6. С. 623–638.

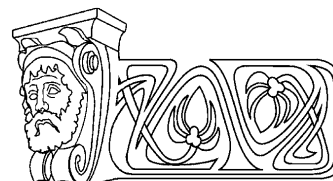


УДК 539.32:539.67

ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ТЕРМОУПРУГОСТИ С УЧЕТОМ АНГАРМОНИЗМА КОЛЕБАНИЙ АТОМОВ

В. А. Кузнецов

Саратовский государственный аграрный университет им. Н.И. Вавилова
E-mail: kuznetsov.va@yandex.ru



На базе модельного представления упругого стержня в виде одномерных цепочек осцилляторов показана роль температурной зависимости коэффициента жесткости и линейного расширения в оценке структурных изменений упругой среды, основываясь на анализе поведения энтропии.

Ключевые слова: молекулярная динамика, упругие свойства, ангармонизм, потенциал Морзе, энтропия.

The Dynamic Model of Termoelastic Properties on the Base of Anharmonize Oscillation Atoms

V. A. Kuznetcov

The role of the temperature dependence of tension rigidity and coefficient of linear expand in estimation the structure changes of an elastic medium on the base of analyse behaviour an anthropy is shown in terms of a model representation of an elastic rod as one-dimensional chains of oscillators.

Key words: molecular dynamics, elastic properties, anharmonize, potential of Morze, anthropy.

При исследовании физических процессов, происходящих в упругих средах, представляет определённый интерес анализ поведения этих структур в результате тепловых воздействий, так как под действием температуры они изменяют свои свойства. Для этих целей используются различные механические и термодинамические методы. К механическим относится метод частиц, заключающийся в представлении твердых тел в качестве континуума материальных точек, взаимодействие которых подчиняется законам классической механики. Другой подход связан с тем, что тела представляют собой совокупность более крупных элементов, например зерен или кристаллитов. Преимущество метода частиц перед методами, основанными на концепции сплошной среды, заключается в том, что в последнем случае для описания нового эффекта каждый раз требуется другая теория. В работах [1, 2] для простых кристаллических материалов развита динамическая теория кристаллических решеток. Работа [3] посвящена теории ангармонических эффектов в кристаллических решетках, основанной на адиабатическом прибли-

жении. Полученные соотношения проверены большим количеством экспериментальных данных. Однако количественное сравнение затруднено тем, что вид потенциальной энергии точно известен лишь для ограниченного ряда материалов. В работе [4] учет ангармоничности колебаний атомов проводится с помощью наиболее часто встречающихся парных потенциалов взаимодействия, например потенциалов Леннарда–Джонса или Морзе. Многие параметры у них близки, например коэффициент Грюнайзера, который характеризует нелинейность взаимодействия. Потенциал Морзе быстрее затухает, что делает его применение более адекватным при моделировании процессов термоупругости с учетом взаимодействия ближайших атомов. Следует отметить, что методы молекулярной динамики работают и для высокомолекулярных соединений, так как полимерные молекулы представляют собой длинные цепи атомов, свернутые в клубки или спирали, но в этом случае используют компьютерное моделирование [5].

В предлагаемой работе на основе динамической модели цепочки колеблющихся атомов, в которой применяется система классических уравнений Ньютона, и законов термодинамики получено выражение для температурной зависимости энтропии. Это выражение позволяет оценить структурные изменения твердого тела, которые в условиях сохранения дальнего порядка при температурах, отличных от температуры плавления, изменяющейся в пределах от 335 до 980 К среди выбранных твердых тел, проявляются в изменении формы и размеров кристаллитов. В нашей модели это соответствует изменению расстояния между атомами. Прежде чем привести решение поставленной задачи, проведем аналогию из классической термодинамики. Известно соотношение между те-



плотностями и модулями упругости, которое выполняется для любых физически однородных тел. В то же время теплоемкость пропорциональна изменению энтропии. Таким образом, поведение упругих свойств определяет изменение энтропии. С другой стороны, энтропия – это мера беспорядка, поэтому представляет интерес сопоставить температурные изменения упругих свойств среды и структурные изменения в самой среде на основе анализа поведения энтропии на примере однородного тонкого упругого стержня.

Рассмотрим модель упругого стержня длиной l , массой M и единичной площадью поперечного сечения, один конец которого закреплён. Его можно представить как предельный случай системы N частиц (атомов) с массой m и равновесным расстоянием a между ними, которые связаны пружинами с коэффициентом жёсткости γ , при условиях: $N \rightarrow \infty$, $a \rightarrow 0$, $Nm = M$, $Na = l$. Температурная зависимость $\gamma(T)$ определяется с учетом парного потенциала Морзе [6]:

$$\gamma(T) = \gamma_0 \exp(\eta T) (2 \exp \eta T - 1), \quad (1)$$

где γ_0 – потенциал Морзе при низких температурах ($T \rightarrow 0$), $\eta = -\beta\sigma$, a – константа, зависящая от свойств материалов, β – коэффициент линейного расширения, σ – константа Морзе.

Определим величину γ_0 по формуле $\gamma_0 \approx 2\epsilon\sigma^2$, где ϵ – энергия связи, которую атом преодолевает при смещении на расстояние a . Это значение γ_0 дает возможность оценить величину γ , исходя из формулы (1). При $T = 335$ К $\gamma = 0.97\gamma_0$, при $T = 980$ К $\gamma = 0.62\gamma_0$, для значений констант, указанных в таблице. Приведем также значения табличных [7, 8] и рассчитанных физических величин для твердых тел.

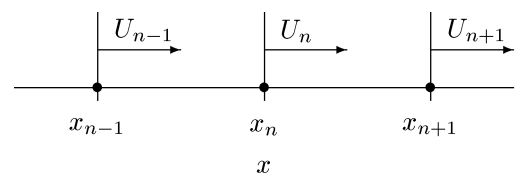
Табличные и рассчитанные физические величины

Величина	К	Ва	Са	Рв	Al
$\epsilon, 10^{-19}$ Дж	0.083	0.22	0.26	0.37	0.42
a , нм	6.3	5.3	4.5	3.7	3.2
$\gamma_0, 10^{-4}$ Н/м	4.1	15	33	12	100
$\sigma, (10^{-10} \text{ м})^{-1}$	0.05	0.06	0.08	0.04	0.11
$\beta, 10^{-6} \text{ К}^{-1}$	83	45	32	29	24

Если $\beta \approx 5 \cdot 10^{-5} \text{ К}^{-1}$, $\sigma \approx 0.06 (10^{-10} \text{ м})^{-1}$, $a \approx 5 \cdot 10^{-9} \text{ м}$, то $\eta \approx 15 \cdot 10^{-5} \text{ К}^{-1}$ и в области температур $T \leq 1000$ К, где ангармонизм

имеет существенное значение, имеет место неравенство $\eta T < 1$, которое будет использоваться при решении данной задачи.

В предельном случае уравнение колебаний стержня можно представить как совокупность уравнений дискретной системы. Рассмотрим одномерную цепочку трёх соседних частиц. Пусть период такой цепочки равен a , тогда в состоянии равновесия координата n -й частицы цепочки $X_n = na$. Смещение этой частицы из положения равновесия обозначим через U_n (рисунок) при условии, что $U_0 = 0$, $U_N = U_{N+1}$.



Одномерная цепочка колеблющихся частиц

Уравнения Ньютона такой системы имеют вид

$$\left\{ \begin{array}{l} m \frac{d^2 U_1}{dt^2} + \gamma(2U_1 - U_2) = 0, \\ m \frac{d^2 U_n}{dt^2} + \gamma(2U_n - U_{n-1} - U_{n+1}) = 0, \quad n = 2, 3, \dots, N-1, \\ m \frac{d^2 U_N}{dt^2} + \gamma(2U_N - U_{N-1}) = 0. \end{array} \right. \quad (2)$$

Будем искать решение системы (2) традиционным образом в виде бегущих волн:

$$U_n = C_n e^{i(\omega t - kx)}, \quad (3)$$

где C_n – комплексная амплитуда колебаний n -й частицы, ω – угловая частота колебаний, одинаковая для всех частиц, k – волновой вектор.

После подстановки формулы (3) в (2) получим дисперсионное уравнение (4), связывающее ω_p и k_p [9]:

$$\omega_p^2 = \frac{4\gamma}{m} \sin^2 \frac{k_p a}{2}. \quad (4)$$

Максимальное значение величины ω соответствует минимальному значению λ , которое равно удвоенному периоду решетки твердого тела [10]. Из вышеприведенной таблицы следует, что минимальные значения λ лежат в интервале 0.5–1.3 нм.



Таким образом, смещение частиц при колебании одномерной цепочки описывается совокупностью плоских гармонических волн:

$$U_n^{(p)} = |A| \cos(\omega_p t - k_p X_n + \psi), \quad (5)$$

где ψ – фаза комплексной амплитуды A .

Если $ka/2 \ll 1$, когда длина волны $\lambda = 2\pi/k \gg a$, то $\sin(ka/2) \approx ka/2$ и уравнение (4) в длинноволновом приближении примет вид

$$\omega(k) = ak \sqrt{\frac{\gamma}{m}}. \quad (6)$$

Преобразуем выражение (6), вводя параметр $\rho = mN/aN$ – линейная плотность стержня. Тогда формула (6) примет следующий вид:

$$\omega(k) = k(\gamma a/\rho)^{1/2}. \quad (7)$$

Учтем также тепловое линейное расширение стержня при условии, что его длина много больше, чем радиус поперечного сечения:

$$dl(T) = aN\beta dT = l_0\beta dT, \quad (8)$$

где l_0 – длина стержня при нуле градусов Кельвина.

Следовательно, такой переход привел к тому, что длинноволновые колебания «не замечают» дискретной структуры цепочки, которая представляется непрерывной упругой средой.

Найдем выражение для приведённой полной энергии $E_l = E/l$, воспользовавшись соотношением

$$E_l = \frac{P_{cp}}{v_{гр}}, \quad (9)$$

где P_{cp} – усреднённый поток энергии, $v_{гр}$ – групповая скорость.

По определению среднего потока энергии имеем:

$$P_{cp} = \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} \gamma(U_{n-1} - U_n) \frac{\partial U_n}{\partial t} dt. \quad (10)$$

После подстановки уравнения (5) в формулу (10) получим соотношение

$$P_{cp} = \frac{1}{2} \gamma |A|^2 ka\omega. \quad (11)$$

По определению групповой скорости имеем:

$$v_{гр} = \frac{d\omega}{dk} = a \sqrt{\frac{\gamma}{m}} \cos \frac{ka}{2}. \quad (12)$$

После подстановки формул (11) и (12) в соотношение (9) получим выражение для приведенной полной энергии

$$E_l = \gamma |A|^2 k \tan \frac{ka}{2}. \quad (13)$$

В длинноволновом приближении энергия принимает вид

$$E = \frac{1}{2} |A|^2 k^2 l \gamma a. \quad (14)$$

Чтобы определить усреднённую температуру цепочки T , вычислим среднюю энергию колебаний частиц в одномерном приближении с учетом ангармонической добавки:

$$\omega/2\pi \int_0^{2\pi/\omega} \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{dU_n}{dt} \right)^2 + \frac{\gamma U_n^2}{2} \right\} dt = \frac{1}{2} k_0 T, \quad (15)$$

где k_0 – постоянная Больцмана.

После подстановки выражения (5) в формулу (15) будем иметь:

$$k_0 T = |A|^2 (\omega^2 M + \gamma). \quad (16)$$

Подставим теперь соотношение (16) в формулу (14) и тогда выражение для энергии примет вид

$$E = (1 + \gamma(T)/M\omega^2) k_0 T / 2. \quad (17)$$

Найдем производную по T от этой величины, считая что γ зависит от температуры и выполняется условие $\eta T < 1$; кроме того, введем обозначение $C = \gamma_0/M\omega^2$.

$$E'_T = \left\{ \frac{k_0 T}{2(1 + C(1 - \eta T)^2)} \right\}_T. \quad (18)$$

Теперь определим изменение энтропии данной системы S с учетом первого начала термодинамики:

$$dS = \frac{dU + fdl}{T}. \quad (19)$$

Запишем выражение для полной производной от энтропии двумя способами: в первом случае с использованием формулы (19), а во втором – через частные производные от энтропии по температуре и от энтропии по длине. Такой подход имел место в работе [11], но при этом в ней использовалось адиабатическое приближение, при котором энтропия постоянна:

$$dS = dE / T + f dl / T, \quad (20)$$

$$dS = (\partial S / \partial E)(\partial E / \partial T) dT + (\partial S / \partial l)(\partial l / \partial T) dT. \quad (21)$$



Сравнивая формулы (21) и (20), получим:

$$(\partial S/\partial E) = 1/T, \quad (22)$$

$$(\partial S/\partial l) = f/T, \quad (23)$$

где f – выражение для силы в обобщенном законе Гука, зависящее от температуры,

$$f = l_0 \gamma \beta T. \quad (24)$$

Подставим соотношения (18), (22), (23) и (24) в формулу (21) и получим окончательно:

$$dS = \left(\frac{k_0 C}{2(1+C)^2} + l_0^2 \gamma \beta^2 \right) dT. \quad (25)$$

Качественный анализ формулы (25) показывает, что с ростом температуры энтропия возрастает, следовательно, увеличивается структурный беспорядок. Но степень роста этого беспорядка определена конкретными температурными зависимостями упругих свойств среды. Чем медленнее происходит этот рост, причинами которого может быть влияние диффузии примесей, релаксационные процессы на границах зерен, температурная зависимость коэффициента жесткости, тем меньше структурные изменения среды, которые определяют изменения формы тел.

Анализ формулы (25) с учетом численных значений используемых величин показывает, что основной вклад в увеличение энтропии с ростом температуры дает линейное расширение тел. Одним из способов уменьшить этот рост является уменьшение коэффициента жесткости. Это может произойти при усилении релаксационных процессов на границах зерен поликристаллических структур. Из таблицы, приведенной в тексте, видно, что с увеличением энергии связи коэффициент жесткости растет, следовательно, растет и модуль Юнга. Другой возможностью замедлить рост энтропии является уменьшение коэффициента β . Как известно, на него в значительной мере влияет ангармонизм колебаний атомов, который учитывается в данной модели с помощью потенциала Морзе. В работах [12, 13] приводятся данные о влиянии различных способов обработки на модуль упругости, а следовательно, и коэффициент жесткости. Авторы пришли к выводу, что изменить этот параметр термической обработкой и легированием довольно труд-

но, и на этот счет есть довольно противоречивые мнения. В ряде случаев диффузия примесей приводит к образованию дислокаций, а затем и трещин, а в других – введение примесей способствует стабилизации возникших дислокаций. Холодная прокатка, дающая предпочтительную ориентацию кристаллитам, может улучшить структуру материала. Ещё одной возможностью повлиять на качество структуры материала является возможность изменения коэффициента диффузии примесей, который определяется на основе закона Аррениуса, а экспоненциальный множитель в этом законе зависит от энергии активации, которая, в свою очередь, зависит от энтропии. Таким образом, анализ зависимости энтропии от температуры может служить для оценки структурных изменений исследуемых структур. Данный вывод согласуется с результатом работы [14].

Список литературы

1. Борн М. Динамическая теория кристаллических решеток. М.: Изд-во иностр. лит., 1958.
2. Лейбфрид Г. Микроскопическая теория механических и тепловых свойств кристаллов. М.; Л.: Физматгиз, 1963.
3. Лейбфрид Г. Теория ангармонических эффектов в кристаллах. М.: Изд-во иностр. лит., 1963.
4. Кривцов А.М., Кривцова Н.В. Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела // Дальневосточный математический журн. 2002. Т.3, №2. С.254–276.
5. Мелькер А.И., Воробьева Т.В. Самоорганизация и образование геликоидальных структур полимеров // ФТТ. 1997. Т.35, №10. С.11–27.
6. Morse P.M. Diatomic molecules according to the wave mechanics // Phys. Rev. 1929. Vol.34. P.57–69.
7. Girifaalco L.A., Weicer V.G. Application of Morse potential function to cubic metals // Ibid. 1959. Vol.114. P.687–695.
8. Рабинович В.А., Хавин З.Я. Краткий химический справочник. Л.: Химия. Ленингр. отд-ние, 1991.
9. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. М.: Наука, 1965.
10. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М.: Наука, 1978.
11. Коротков П.Ф. Молекулярная физика и термодинамика. М.: МФТИ, 2001.
12. Дранкин Б.М., Кононенко В.К., Леонов Б.Н. Легирование и прогноз упругих свойств материалов для широкого диапазона температур // Перспективные материалы. 1998. №3. С.11–18.
13. Лысак Л.И. Физические основы термической обработки стали. Киев: Техника, 1975.
14. Кузнецов В.А. Поведение энтропии при термоупругих деформациях // Вестн. СГАУ им. Н.И. Вавилова. 2006. №4. С.44–46.

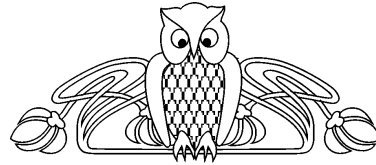


УДК 621.382.029.6

ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В МЮОНИИ И МЮОННОМ ВОДОРОДЕ

Н. А. Бойкова, О. А. Бойкова, Ю. Н. Тютхтяев

Саратовский государственный университет
E-mail: boykova_na@mail.ru



Обсуждены варианты квазипотенциального подхода для исследования спектров экзотических атомов мюония и мюонного водорода. Сходство спектров экзотических атомов использовано как средство построения корректной теории возмущений. Исследована зависимость тонких сдвигов от нормировочных множителей.

Ключевые слова: связанное состояние, тонкий сдвиг, сверхтонкий сдвиг, уровень энергии, экзотический атом, мюоний, мюонный водород, квазипотенциальный подход.

Electromagnetic Interaction for Muonium and Muonic Hydrogen

N. A. Boikova, O. A. Boikova, Yu. N. Tyukhtyaev

The quasipotential approach variants for investigation of the exotic atoms spectra for muonium and muonic hydrogen are discussed. Similarity of exotic atoms spectra is used for build-up the correct perturbation theory. Dependence of fine shifts on normalizing multipliers is investigated.

Key words: bound state, fine shift, superfine shift, energy level, exotic atom, muonium, muonic hydrogen, quasipotential approach.

Одним из классов экзотических атомов являются мюонные атомы, в состав которых входят нестабильная частица мюон. При образовании мюонного водорода отрицательный мюон (μ^-), замещая в атоме водорода электрон, образует связанное состояние ($p^+\mu^-$). Возможен и другой вариант образования мюонного атома. Положительно заряженный мюон (μ^+) может захватить электрон из другого атома и образовать систему (μ^+e^-) – мюоний [1].

Важным направлением спектроскопии мюонных атомов является изучение интервалов сверхтонкой структуры с высокой точностью. Система из двух фермионов (мюонный водород, мюоний, позитроний, антиводород и т.д.) может находиться в состояниях с одинаково и противоположно направленными спинами. Полный спин системы S является интегралом движения и принимает значения 0 или 1. Для основного состояния в первом случае имеется одна Z -компонента

спина, во втором – три, что соответствует синглетному 1S_0 и триплетному 3S_1 состояниям. Переход атома из одного состояния в другое может быть индуцирован с помощью внешнего магнитного поля, меняющегося вместе с частотой перехода, и доступен экспериментальному исследованию.

Одним из наиболее эффективных теоретических методов исследования сверхтонкой структуры мюонных атомов является квазипотенциальный подход. Основное уравнение квазипотенциального подхода представляется в виде

$$(\hat{G}^+(\vec{p}, \vec{q}, E))^{-1} \Psi_E(\vec{q}) = \tilde{V}(\vec{p}, \vec{q}, E) \Psi_E(\vec{q}), \quad (1)$$

где E – собственное значение полной энергии, $\Psi_E(\vec{q})$ – описывающая систему волновая функция. Для определения квазипотенциала $\tilde{V}(\vec{p}, \vec{q}, E)$ вводится оператор

$$\tau_0 = F^{-1} T_0^+ F^{-1}, \quad (2)$$

где $T_0^+ = \overline{G_0 T G_0^+}$. Релятивистская амплитуда рассеяния $T(\vec{p}, \vec{q}, p_0, q_0, E)$ определяется из уравнения Бете–Солпитера

$$G(p_1, p_2, q_1, q_2) = G_0(p_1, p_2, q_1, q_2) + G_0(p_1, p_2, k_1, k_2) T(k_1, k_2, s_1, s_2) G_0(s_1, s_2, q_1, q_2), \quad (3)$$

где

$$G_0(p_1, p_2, q_1, q_2) = i S_1(p_1 - q_1) S_2(p_2 - q_2), \quad (4)$$

S_i – фермионный пропагатор. Выполняя в уравнении (3) интегрирование по относительным энергиям и проектирование на положительно частотные состояния, получим:

$$(\hat{G}^+)^{-1} = F^{-1} - (\hat{G}^+)^{-1} = \tau_0 (1 + F \tau_0)^{-1}. \quad (5)$$

Квазипотенциал для системы двух фермионов определяется выражением



$$V = F^{-1} - (\hat{G}^+)^{-1} = \tau_0(1 + F\tau_0)^{-1}. \quad (6)$$

На массовой поверхности $E = \varepsilon_{1p} + \varepsilon_{2p} = \varepsilon_{1q} + \varepsilon_{2q}$, $\varepsilon_{ip} = \sqrt{\vec{p}^2 + m_i^2}$, оператор $\tau_0(\vec{p}, \vec{q}, E)$ и физическая амплитуда $T_+(\vec{p}, \vec{q}, E)$ совпадают:

$$T_+(\vec{p}, \vec{q}, E) = \bar{u}_1(\vec{p})\bar{u}_2(-\vec{p}) \times T(p_0 = 0, q_0 = 0, \vec{p}, \vec{q}, E)\bar{u}_1(\vec{q})\bar{u}_2(-\vec{q}). \quad (7)$$

В работе [2] исследования сверхтонкой структуры S уровней мюонного водорода выполнялись на основе квазипотенциального уравнения шредингеровского типа. Однако, значительно раньше получил известность другой подход к решению этой проблемы [3, 4]. Его использование позволяет изучать сверхтонкое расщепление уровней энергии более планомерно и с большей точностью. Содержит ли всю информацию о связанной системе двух частиц способ построения квазипотенциала через амплитуду рассеяния (7) или квазипотенциал должен строиться на основе оператора τ_0 выражения (6)? Действительно ли группа экзотических атомов сохраняет свои спектроскопические свойства как целое в обоих случаях?

Выполняя замену оператора τ_0 амплитудой рассеяния T_+ , используем разложение амплитуды T_+ в ряд по степеням постоянной тонкой структуры α :

$$T_+ = T_+^{(2)} + T_+^{(4)} + \dots \quad (8)$$

Тогда для квазипотенциала получим

$$V = T_+(1 - FT_+ + FT_+FT_+ - \dots). \quad (9)$$

В низших порядках теории возмущений имеем

$$V = V^{(2)} + V^{(4)} = T_+^{(2)} + T_+^{(4)} - T_+^{(2)}FT_+^{(2)}, \quad (10)$$

$$V^{(2)} = T_+^{(2)}, \quad V^{(4)} = T_+^{(4)} - T_+^{(2)}FT_+^{(2)}. \quad (11)$$

Амплитуда рассеяния строится с помощью Фейнмановской диаграммной техники.

Поправки к кулоновским уровням энергии определяем, решая квазипотенциальное уравнение (1) по теории возмущений:

$$\Delta E_n = \langle n | \Delta V^{(2)} + \Delta V^{(4)} + \sum_{n \neq m} \Delta V^{(2)} \frac{|m\rangle\langle m|}{(E_n - E_m)} \Delta V^{(2)} | n \rangle,$$

$$\Delta V^{(2)} = V^{(2)} - v_c, \quad (12)$$

где $|n\rangle$ и $|m\rangle$ – собственные функции нерелятивистского уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом v_c , соответствующие значениям энергии E_n и E_m . Волновая функция для главного квантового числа $n = 1$ имеет вид

$$\varphi_{1S} = 8\pi\alpha\mu \varphi_1(0)(p^2 + \alpha^2\mu^2)^{-2},$$

$$|\varphi_1(0)|^2 = \alpha^3\mu^3\pi^{-1}, \quad (13)$$

где μ – приведенная масса.

Квазипотенциал $V(\vec{p}, \vec{q}, E)$ в низшем приближении, соответствующем однофотонному обмену между фермионами, определяется выражением

$$V(\vec{p}, \vec{q}, E) = K^{(1)}(\vec{p}, \vec{q}). \quad (14)$$

Поскольку основным взаимодействием в мюоном водороде ($p^+\mu^-$) является электромагнитное, то при описании связанного состояния протона и мюона удобно использовать кулоновскую калибровку, в которой фотонный пропагатор представляется в виде

$$D^{00}(\vec{k}) = -\frac{1}{k^2}, \quad D^{0i} = D^{j0} = 0,$$

$$D^{ij}(k) = -\frac{1}{(k_0^2 - \vec{k}^2 + i\varepsilon)} \left(\delta^{ij} - \frac{k^i k^j}{\vec{k}^2} \right), \quad (15)$$

$$i, j = 1, 2, 3.$$

Ядру обмена одним фотоном соответствует аналитическое выражение

$$K^{(1)}(k) = e^2 \gamma_{1\mu} \gamma_{2\nu} D^{\mu\nu}(k), \quad (16)$$

в котором можно выделить две части: чисто кулоновскую (K_c), пропорциональную кулоновскому потенциалу $v_c(\vec{k})$,

$$K_c(\vec{k}) = \gamma_{10} \gamma_{20} v_c(\vec{k}), \quad (17)$$

и (K_T), имеющую четырехмерную зависимость:



$$K_T(k) = -e^2(k_0^2 - \vec{k}^2)^{-1} \times (\vec{\gamma}_1 \vec{\gamma}_2 - (\vec{\gamma}_1 \vec{k})(\vec{\gamma}_2 \vec{k})(\vec{k})^{-2}). \quad (18)$$

Взаимодействия, связанные с ядрами (K_c) и (K_T), принято называть обменами кулоновским и поперечным фотонами соответственно.

Выражение для сдвига от однофотонного кулоновского взаимодействия имеет вид

$$\Delta E_c = \langle \varphi_c | (K_c)_+ - v_c | \varphi_c \rangle = \langle \varphi_c | W_1^* W_2^* \left(1 + \frac{(\vec{\sigma}_1 \vec{p})(\vec{\sigma}_1 \vec{q})}{M_{1p} M_{1q}} \right) \times \left(1 + \frac{(\vec{\sigma}_2 \vec{p})(\vec{\sigma}_2 \vec{q})}{M_{2p} M_{2q}} \right) W_1 W_2 - 1 | v_c | \varphi_c \rangle. \quad (19)$$

Так как источником сверхтонкого расщепления является спин-спиновое взаимодействия частиц в атоме, а спиновые состояния частиц характеризуются с помощью матриц Паули $\vec{\sigma}_i$, то сверхтонкому расщеплению соответствует аналитическое выражение, содержащее характерный множитель $(\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2)$. Рационально выделить из матричной структуры (19) часть, пропорциональную $(\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2)$, воспользовавшись симметрией подынтегрального выражения:

$$\Delta E_c^{hfs} = \frac{16 \alpha^6 \mu^5}{9 \pi^2} \langle \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2 \rangle \int_0^\infty dp \frac{N_p p^2}{M_{1p} M_{2p} (p^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \times \int_0^\infty dq \frac{N_q q^2}{M_{1q} M_{2q} (q^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \left(p^2 + q^2 + \frac{p^4 + q^4}{2pq} \ln \frac{|p-q|}{(p+q)} - pq \ln \frac{|p-q|}{(p+q)} \right). \quad (20)$$

Логарифмический вклад порядка α^6 обеспечивает так называемый стандартный интеграл:

$$J_{st} = \int_0^\infty \frac{p dp}{\varepsilon_{1p} (p^2 + \alpha^2 \mu^2) \varepsilon_{2p}} \times \int_0^\infty \frac{q dq}{(q^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \ln \frac{|p-q|}{(p+q)}, \quad (21)$$

который выделяется из последнего слагаемого выражения (20) при учете замен

$$N_p N_q \rightarrow 1, \quad \frac{1}{M_{1p} M_{2p}} \rightarrow \frac{1}{4 \varepsilon_{1p} \varepsilon_{2p}},$$

$$\frac{1}{M_{1q} M_{2q}} \rightarrow \frac{1}{4 m_1 m_2}. \quad (22)$$

Более точный учет зависимости от импульсов нормировочных множителей ($N_p N_q$) и массовых факторов M_{iq} приводит к дополнительным четным степеням импульсов в числителе, что устраняет влияние кулоновских функций $\varphi_c(\vec{p})$ и $\varphi_c(\vec{q})$ и повышает порядок вклада от интеграла типа J_{st} до α^6 .

Поэтому с требуемой точностью имеем

$$\Delta E_c^{hfs} (\alpha^6 \ln \alpha) = \frac{1}{9 \pi^2} \alpha^6 \mu^5 \langle \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2 \rangle J_{st}, \quad J_{st} = \frac{\pi^2}{2 m_1 m_2} \ln \alpha. \quad (23)$$

Таким образом, для сверхтонкого сдвига от однофотонного кулоновского взаимодействия получаем

$$\Delta E_c^{hfs} = \frac{1}{4} E_F \frac{\alpha^2 \mu^2}{m_1 m_2} \ln \alpha^{-1}. \quad (24)$$

где E_F – значение сверхтонкого расщепления основного уровня энергии атома в нулевом порядке, которое было получено Ферми и составляет

$$E_F = \frac{2}{3} \frac{\alpha^4 \mu^2}{(m_1 + m_2)} \langle \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2 \rangle = \frac{8}{3} \frac{\alpha^4 \mu^3}{m_1 m_2}. \quad (25)$$

Обратимся теперь к обмену одним поперечным фотоном. Соответствующее аналитическое выражение имеет вид

$$\Delta E_T = \left\langle \varphi_c(\vec{p}) \left| 4 \alpha \pi v_c(\vec{p} - \vec{q}) u_1^*(\vec{p}) u_2^*(-\vec{p}) \times \left(\vec{\alpha}_1 \vec{\alpha}_2 - \frac{(\vec{\alpha}_1(\vec{p} - \vec{q}))(\vec{\alpha}_2(\vec{p} - \vec{q}))}{(\vec{p} - \vec{q})^2} \right) \times u_2(\vec{q}) u_2(-\vec{q}) \right| \varphi_c(\vec{q}) \right\rangle. \quad (26)$$

После вычисления матричной структуры для сверхтонкого расщепления получаем

$$\Delta E_T^{hfs} = \frac{4}{3 \pi^4} \alpha^6 \mu^5 \langle \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2 \rangle \times \int d^3 p \frac{N_p}{(p^2 + \alpha^2 \mu^2)^2 M_{1p} M_{2p}} \times \int d^3 q \frac{N_q}{(q^2 + \alpha^2 \mu^2)^2 M_{1q} M_{2q}} \times$$



$$\begin{aligned} & \times \left(M_{1p}M_{2q} + M_{1q}M_{2p} - \right. \\ & - \frac{(p^2 - q^2)^2}{(\vec{p} - \vec{q})^2} \frac{1}{(\varepsilon_{1p} + \varepsilon_{1q})(\varepsilon_{2p} + \varepsilon_{2q})} \times \\ & \left. \times \left(M_{1p}M_{2q} + M_{1q}M_{2p} + \frac{[\vec{p}\vec{q}]^2}{(\vec{p} - \vec{q})^2} \right) \right). \end{aligned} \quad (27)$$

Примечательной особенностью данного выражения является наличие вклада порядка α^4 , который содержится в первых двух членах и легко выделяется при заменах (22):

$$\begin{aligned} \Delta E_T^{hfs}(\alpha^4) &= \frac{2}{3\pi^4} \frac{1}{m_1 m_2} \alpha^6 \mu^5 \langle \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2 \rangle \times \\ & \times \left(\int d^3 p \frac{N_p}{(p^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \right)^2 = \\ & = \frac{2}{3} \frac{\alpha^4 \mu^3}{m_1 m_2} \langle \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2 \rangle = E_F. \end{aligned} \quad (28)$$

Отметим также присутствие в выражении (26) логарифмического вклада $\alpha^6 \ln \alpha$:

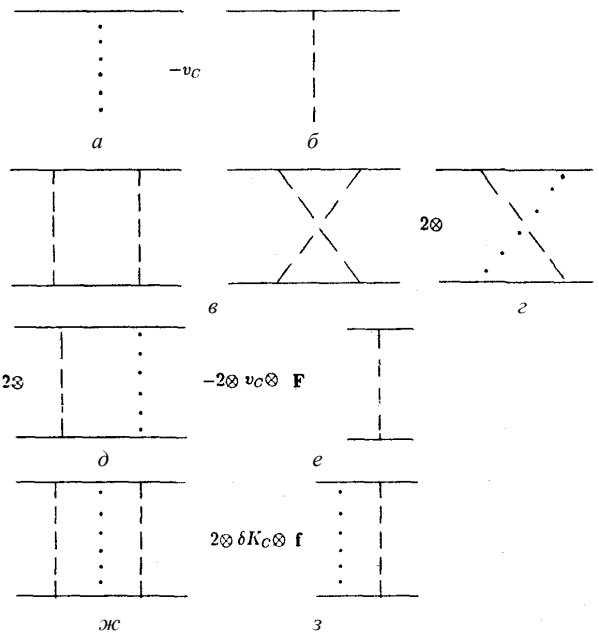
$$\begin{aligned} \Delta E_T^{hfs}(\alpha^6 \ln \alpha) &= \frac{2}{3\pi^4} \frac{1}{m_1 m_2} \alpha^6 \mu^5 \langle \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2 \rangle \times \\ & \times \int \frac{d^3 p}{(p^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \int \frac{d^3 q}{(q^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \times \\ & \times \left(\frac{1}{M_{1p}^2} + \frac{1}{M_{2p}^2} \right) \frac{p^2 q^2}{(\vec{p} - \vec{q})^2} = \\ & = -\frac{4}{3\pi^2} \frac{1}{m_1 m_2} \alpha^6 \mu^5 \langle \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2 \rangle \int_0^\infty \frac{p dp}{(p^2 + \alpha^2 \mu^2)} \times \\ & \times \int_0^\infty \frac{q dq}{(q^2 + \alpha^2 \mu^2)} \left(\frac{1}{\varepsilon_{1p}^2} + \frac{1}{\varepsilon_{2p}^2} \right) \ln \frac{|p - q|}{(p + q)} = \\ & = \frac{\mu^2 \alpha^2}{m_1 m_2} E_F \left(\frac{m_1}{m_2} + \frac{m_2}{m_1} \right) \ln \alpha^{-1}, \end{aligned} \quad (29)$$

что свидетельствует о изменении взгляда на теорию возмущения, которая ранее строилась через целочисленные степени α .

Итак, результат (28) определяет основной вклад в сверхтонкое расщепление от электромагнитного взаимодействия в мюонном водороде при $m_1 = m_\mu$ и $m_2 = m_p$. Однако формула (28) имеет более общий характер и может быть применена к любому экзо-

тическому атому при описании электромагнитного взаимодействия. При этом ее численное значение для различных атомов существенно отличается в силу их массовых характеристик.

Проведем сравнительный анализ логарифмических вкладов порядка $\alpha^6 \ln \alpha$ для мюонного водорода и позитрония на основе таблицы [5]. В этой таблице представлены вклады от диаграмм, приведенных на рисунке, где схематично показаны обмены кулоновскими (точечная линия) и поперечными (пунктирная линия) фотонами.



Диаграммы, дающие вклады порядка $\alpha^6 \ln \alpha$ в СТР атома

Вклады в СТР мюонного водорода и позитрония

Диаграмма	$p^+ \mu^-$		$e^+ e^-$	
	К	L	К	L
a	$\frac{1}{4}$	0	$\frac{1}{4}$	
б	0	M	2	2
в	$\frac{9}{2}$	0	$\frac{9}{2}$	
г	-2	-M	-2	-2
д	0	3M	0	6
е	-4	-2M	-4	-4
ж	$\frac{5}{4}$	0	$\frac{5}{4}$	0
з	0	-M	0	-2
Σ	0	0	2	0



Составим таблицу логарифмических вкладов с учетом результата (29) от обмена поперечным фотоном, который представим в виде

$$\Delta E^{hfs} = \frac{\mu^2 \alpha^2}{m_1 m_2} E_F \ln \alpha^{-1}(K + ML),$$

$$M = \frac{m_1}{m_2} + \frac{m_2}{m_1}. \quad (30)$$

В таблице результаты представлены в виде совокупности безмассовых членов (K) и логарифмических вкладов (L), пропорциональных M . Для позитрония разделение вкладов на K и L условно, так как $m_1 = m_2$ и $M = 2$. В части L данная таблица аналогична таблице из работы [5] при замене $m_e \rightarrow m_\mu$ и $m_\mu \rightarrow m_p$. Это свидетельствует о том, что в высших порядках теории возмущений группа экзотических атомов проявляет себя как единое целое. Заметим, что сумма вкладов (L) равна 0 как для позитрония, так и для мюонного водорода. Результаты группы K оказываются различными.

Итак, как следует из данных, приведенных в таблице, в отличие от результатов для сверхтонкого сдвига с точностью α^4 при повышении точности до $\alpha^6 \ln \alpha$ спектроскопия мюонного водорода не переходит в спектроскопию позитрония при соответствующей замене масс в двухчастичной системе. Возникает вопрос: сохраняется ли сходство экзотических атомов при прецизионных вычислениях сверхтонких сдвигов? Сохраняется, но при условии, что определение квазипотенциала через амплитуду рассеяния T_+ (7):

$$V = T_+(1 + FT_+)^{-1}, \quad (31)$$

рассматривается в качестве приближения выражения (6).

Проанализируем выражение для сверхтонкого сдвига от однофотонного обмена на основе определения (6):

$$\Delta \tilde{E}_T = \frac{2}{3\pi^4} \alpha^6 \mu^5 \langle \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2 \rangle \int \frac{N_p d^3 p}{(p^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \times$$

$$\times \int \frac{N_q}{(q^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \frac{1}{|\vec{p} - \vec{q}|} \left(\frac{1}{(\varepsilon_{1p} - E_1 - E_2 + \varepsilon_{2q} + |\vec{p} - \vec{q}|)} + \right.$$

$$\left. + \frac{1}{(\varepsilon_{1q} - E_1 - E_2 + \varepsilon_{2p} + |\vec{p} - \vec{q}|)} \right) \times \quad (32)$$

$$\times \left((\vec{p} - \vec{q})^2 \left(\frac{1}{M_{1p} M_{2q}} + \frac{1}{M_{1q} M_{2p}} \right) - \right.$$

$$\left. - \frac{(p^2 - q^2)^2}{(\varepsilon_{1p} + \varepsilon_{1q})(\varepsilon_{2p} + \varepsilon_{2q})} \left(\frac{1}{M_{2p} M_{2q}} + \right. \right.$$

$$\left. \left. + \frac{1}{M_{1p} M_{1q}} + \frac{[\vec{p} - \vec{q}]^2}{(\vec{p} - \vec{q})^2 M_{1p} M_{1q} M_{2p} M_{2q}} \right) \right) d^3 q.$$

При расчете этой величины с точностью $\alpha^6 \ln \alpha$ можно воспользоваться следующим приближением:

$$(\varepsilon_{1p} - E_1 - E_2 + \varepsilon_{2q} + |\vec{p} - \vec{q}|)^{-1} \cong$$

$$\cong \frac{1}{|\vec{p} - \vec{q}|} \left(1 - \frac{\varepsilon_{1p} - E_1 - E_2 + \varepsilon_{2q}}{|\vec{p} - \vec{q}|} + \right. \quad (33)$$

$$\left. + \frac{(\varepsilon_{1p} - E_1 - E_2 + \varepsilon_{2q})^2}{|\vec{p} - \vec{q}|^2} \right).$$

Тогда, выделяя члены, ответственные за логарифмические вклады, получим:

$$\Delta \tilde{E}'_T = \frac{1}{12\pi^4} \frac{1}{m_1 m_2} \alpha^6 \mu^5 \langle \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2 \rangle \times$$

$$\times \int \frac{d^3 p}{\varepsilon_{2p} \varepsilon_{1p} (p^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \times \quad (34)$$

$$\times \int \frac{d^3 q}{(q^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \left(1 + \frac{2(\varepsilon_{1p} - m_1)(\varepsilon_{2q} - m_2)}{(\vec{p} - \vec{q})^2} \right) \times$$

$$\times \left\{ \frac{p^2 q^2}{(\vec{p} - \vec{q})^2} \left(\frac{M_{1q} + M_{1p}}{(\varepsilon_{2p} + \varepsilon_{2q})} + \frac{M_{2p} + M_{2q}}{(\varepsilon_{1p} + \varepsilon_{1q})} \right) + \right.$$

$$\left. + 2M_{1p} M_{2q} \right\}.$$

Анализ показывает, что первое слагаемое в фигурных скобках вносит вклады в сверхтонкое расщепление, начиная с членов порядка $\alpha^6 \ln \alpha$, а второе – с членов порядка α^4 . Отличие фактора $(\varepsilon_{1p} - E_1 + \varepsilon_{2q} - E_2 + |\vec{p} - \vec{q}|)$ от $|\vec{p} - \vec{q}|$ оказывается существенным для получения логарифмических поправок при наличии в выражении членов, обеспечивающих вклады порядка α^4 . Вклады $\alpha^6 \ln \alpha$ вносят попарные произведения первых и вторых членов в квадратных и фигурных скобках. Используя значение стандартного интеграла, находим окончательно:



$$\begin{aligned} \Delta E_T^{hfs}(\alpha^6 \ln \alpha) = \\ = \frac{\mu^2 \alpha^2}{m_1 m_2} E_F \left(\frac{m_1}{m_2} + \frac{m_2}{m_1} + 2 \right) \ln \alpha^{-1}. \end{aligned} \quad (35)$$

Учет результата (35) в таблице приводит к изменению коэффициента K в строке b для $(p^+ \mu^-)$, так что суммарные результаты столбцов K для мюонного водорода и позитрония оказываются одинаковыми. Таким образом, восстанавливается общность результатов при исследовании электромагнитного взаимодействия в группе экзотических атомов.

Наличие у частицы механического момента приводит к существованию соответствующего магнитного момента. Поэтому собственный механический и орбитальный моменты обуславливают спиновый магнитный и орбитальный магнитный моменты частиц связанного состояния. Потенциальная энергия, возникающая вследствие спин-орбитального взаимодействия, приводит к появлению тонкой структуры уровней энергии.

Исследуем зависимость тонкой структуры энергетического спектра экзотического атома от константы тонкой структуры. В низшем приближении учитывается только однофотонное взаимодействие. Тогда

$$V = (K_T)_+ + (K_c)_+. \quad (36)$$

Как показано в работе [6], с помощью разложения по степеням величины p^2/m_i^2 из квазипотенциала (62) можно выделить ядро Брейта:

$$V = V_{kin}^{leader} + V_\mu + V_{\rho\mu}, \quad (37)$$

где

$$V_{kin}^{leader} = -(2\pi)^3 \delta^3(p-q) \left(\frac{1}{\mu^2} - \frac{3}{m_1 m_2} \right) \frac{p^4}{8\mu},$$

$$V_\mu = \frac{\pi\alpha}{2} \left(\frac{1}{m_1^2} + \frac{1}{m_2^2} \right),$$

$$V_{\rho\mu} = -\frac{4\pi\alpha}{m_1 m_2} \frac{p^2 q^2 - (\vec{p}\vec{q})^2}{(\vec{p} - \vec{q})^4}.$$

Суммирование этих величин дает тонкую структуру уровней энергии [7] водородоподобного атома с точностью до четвертого порядка по α :

$$\begin{aligned} E_{n,j} \approx m_1 + m_2 - \frac{\mu(Z\alpha)^2}{2n^2} - \frac{\mu(Z\alpha)^4}{2n^3} \times \\ \times \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} + \frac{\mu}{4n(m_1+m_2)} \right). \end{aligned} \quad (38)$$

Симметрия по массам позволяет констатировать, что квазипотенциальный подход воспроизводит тонкую структуру уровней энергии экзотических атомов, следующую из точного решения уравнения Дирака с кулоновским потенциалом.

Выражение для тонкого сдвига от кулоновской части однофотонного взаимодействия имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta E_c^{fs} = \langle \varphi_c | v_c N_p N_q \left(1 + \frac{\vec{p}\vec{q}}{M_{1p} M_{1q}} + \right. \\ \left. + \frac{\vec{p}\vec{q}}{M_{2p} M_{2q}} + \frac{(\vec{p}\vec{q})^2}{M_{1p} M_{2p} M_{1q} M_{2q}} \right) - v_c | \varphi_c \rangle. \end{aligned} \quad (39)$$

Для выделения основного вклада можно использовать разложение радикалов ε_{ip} и нормировочных множителей $N_{m_i p}$ по степеням \vec{p}^2/m_i^2 ,

$$\begin{aligned} \Delta E_c^{fs}(\alpha^4) = \langle \varphi_c | V_c^{(2)} | \varphi_c \rangle = \\ = \frac{\pi\alpha}{2} \left(\frac{1}{m_1^2} + \frac{1}{m_2^2} \right) \left(\frac{8\pi\alpha\mu}{(2\pi)^3} \right)^2 \times \\ \times |\varphi(0)|^2 \left(\int d^3 p \frac{1}{(p^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \right)^2, \end{aligned} \quad (40)$$

что приводит к результату

$$\Delta E_c^{fs}(\alpha^4) = \frac{1}{2} \frac{\alpha^4 \mu^3}{m_1 m_2} \left(\frac{m_1}{m_2} + \frac{m_2}{m_1} \right). \quad (41)$$

Логарифмический вклад оказывается следующим:

$$\begin{aligned} \Delta E_c^{fs}(\alpha^6 \ln \alpha) = \langle \varphi_c | V_c^{(4)} | \varphi_c \rangle = \\ = \frac{5}{4} \frac{\alpha^6 \mu^5}{m_1 m_2} \left(\frac{m_1}{m_2^3} + \frac{m_2}{m_1^3} \right) \ln \alpha^{-1}. \end{aligned} \quad (42)$$

Отметим симметрию полученного результата относительно замены $m_1 \leftrightarrow m_2$, характерную для экзотических атомов.

Обратимся теперь к обмену одним поперечным фотоном:



$$\begin{aligned} \Delta E_T^{fs} = & \frac{32 \alpha^6 \mu^5}{\pi^2 m_1 m_2} \int_0^\infty dp \frac{p^2 N_p}{(p^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \times \\ & \times \int_0^\infty dq \frac{q^2 N_q}{(q^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \left(1 - \frac{q^2}{M_{1q}^2} + \frac{p^2 + q^2}{2pq} \times \right. \\ & \times \ln \frac{|p-q|}{(p+q)} - \frac{q^3}{2pM_{1q}^2} \ln \frac{|p-q|}{(p+q)} - \\ & \left. - \frac{pq}{2M_{1q}^2} \ln \frac{|p-q|}{(p+q)} \right). \end{aligned} \quad (43)$$

Логарифмический вклад порядка $\alpha^6 \ln \alpha^{-1}$ определяет последний член в фигурных скобках при $N_p = N_q = 1$ и он оказывается следующим:

$$\Delta E_T^{fs}(\alpha^6 \ln \alpha) = 2 \frac{\alpha^6 \mu^5}{m_1 m_2} \ln \alpha^{-1}. \quad (44)$$

Однако для получения полного логарифмического вклада необходимо учесть отличие нормировочных факторов от единицы:

$$\begin{aligned} N_p N_q = & \left(1 - \frac{p^2}{2\varepsilon_{1p} M_{1p} (1 + \sqrt{M_{1p}/2\varepsilon_{1p}})} \right) \times \\ & \times \left(1 - \frac{q^2}{2\varepsilon_{1q} M_{1q} (1 + \sqrt{M_{1q}/2\varepsilon_{1q}})} \right). \end{aligned} \quad (45)$$

Дополнительный логарифмический вклад от учета нормировочных множителей оказывается весьма существенным:

$$\Delta E_T^{(2)}(\alpha^6 \ln \alpha) = 2 \frac{\alpha^6 \mu^3}{m_1 m_2} \ln \alpha^{-1}, \quad (46)$$

увеличивая в два раза предыдущий результат, так что суммарный логарифмический вклад составляет

$$\Delta E_T^{fs}(\alpha^6 \ln \alpha) = 4 \frac{\alpha^6 \mu^3}{m_1 m_2} \ln \alpha^{-1}. \quad (47)$$

Таким образом, при прецизионных исследованиях сверхтонких расщеплений и тонких сдвигов уровней энергии общность подхода к различным экзотическим атомам сохраняется.

Отметим, что исследование логарифмических вкладов порядка $\alpha^6 \ln \alpha^{-1}$ было про-

ведено в работах других авторов [8, 9]. При этом в работе [8] суммарный вклад $\alpha^6 \ln \alpha^{-1}$ от взаимодействия в прямом канале позитрония отсутствовал. В то же время для системы частиц с разными массами подобный вклад был обнаружен. С точки зрения сходства экзотических атомов указанные результаты противоречили друг другу. Это противоречие было устранено в совместной работе тех же авторов [10]. Метод квазипотенциала наглядно показывает, что часть логарифмического вклада ΔE_T при $N_p N_q \neq 1$ в работе [9] не была учтена. Для полного учета суммарного вклада $\alpha^6 \ln \alpha^{-1}$ нужно разработать корректную теорию возмущений и учесть вклады высших порядков теории возмущений.

Список литературы

1. Пономарев Л. И. Мюонный катализ ядерных реакций синтеза // Природа. 1979. №9. С.8–19.
2. Мартыненко А. П. Сверхтонкая структура S-уровней мюонного водорода // Теоретическая и математическая физика (Самара). 2004. Т. 5. С. 27–45.
3. Тюхтяев Ю. Н. Учет эффектов связанности позитрония // ТМФ. 1978. Т. 36, № 2. С. 264–270.
4. Тюхтяев Ю. Н. Новый метод учета кулоновского взаимодействия в квазипотенциальном подходе Логунова–Тавхелидзе // ТМФ. 1982. Т. 53, № 3. С. 419–428.
5. Двоеглазов В. В., Тюхтяев Ю. Н., Фаустов Р. Н. Уровни энергии водородоподобных атомов и фундаментальные константы // ЭЧАЯ. 1994. Т. 25, вып. 1. С. 144–228.
6. Boikova N. A., Boikova O. A., Kleshchevskaya S. V., Tyukhtyaev Y. N. On the possibility of precise correction calculations to the effect of nuclear motion influence on fine energy shifts of hydrogen-like atoms // SPIE Laser physics and photonics, spectroscopy and molecular modeling. 2006. Vol. 6537. P. 19-1–19-8.
7. Barker W. A., Glover F. N. Reduction of relativistic two-particle wave equations to approximate forms. III // Phys. Rev. 1955. Vol. 99, № 1. P. 317–324.
8. Fell R. N. Single transverse photon correction to the 2S energy levels of positronium. Preprint BUW 01742. 1992. 40 p.
9. Khriplovich I. B., Milstein A. I., Yelkhovsky A. S. Corrections of $(\alpha^6 \ln \alpha)$ in two-body QED problem // Phys. Lett. B. 1992. Vol. 282. P. 237–242.
10. Fell R. N., Khriplovich I. B., Milstein A. I., Yelkhovsky A. S. On the recoil corrections in hydrogen // Phys. Lett. A. 1993. Vol. 181. P. 172–174.



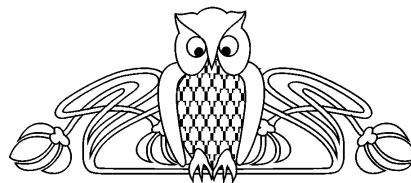
УДК 617.7-007.681

ПЛАЗМЕННОЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ ТРЕКОВЫХ МЕМБРАН ДЛЯ ХИРУРГИЧЕСКОГО ЛЕЧЕНИЯ РЕФРАКТЕРНОЙ ГЛАУКОМЫ

Т. В. Рязанцева, Л. И. Кравец*

Саратовский государственный медицинский университет
им. В.И. Разумовского
E-mail: tvroko@gmail.com

* Объединенный институт ядерных исследований,
Лаборатория ядерных реакций им. Г. Н. Флерова, Дубна
E-mail: kravets@lnr.jinr.ru



В работе сообщается о результатах формирования и применения полимерных трековых мембран из полиэтилентерефталата с наноструктурированной поверхностью в качестве эксплантодренажа при хирургическом лечении рефрактерной глаукомы. Для наноструктурирования поверхностного слоя мембран применена обработка в кислородсодержащей плазме.

Ключевые слова: полимерные трековые мембраны, обработка в плазме, наноструктурированная поверхность, рефрактерная глаукома.

Plasma Nanostructuring of Polymer Track Membranes Surface for Antiglaucomatous Surgery

T. V. Ryazantseva, L. I. Kravets

Experimental results of fabrication and implantation of nanostructured track membranes as a drainage for refractory glaucoma surgery are presented. For nanostructuring of the membrane surface, a treatment by air plasma was applied.

Key words: polymer track membranes, plasma treatment, nanostructured surface, refractory glaucoma.

Введение

Одной из актуальных проблем в офтальмологии остается хирургическое лечение рефрактерной глаукомы. Рефрактерная глаукома включает в себя как первичную оперированную глаукому, требующую проведения повторных хирургических вмешательств, так и врожденную, ювенильную и некоторые виды вторичной глаукомы. Неудачные попытки антиглаукоматозных операций, как правило, являются результатом пролиферации соединительной ткани и блокирования хирургически сформированных путей оттока внутриглазной жидкости. Вследствие резистентности рефрактерной глаукомы к традиционному лечению длительная сохранность

гипотензивного эффекта обеспечивается имплантацией различных дренажей.

В данной работе сообщается о результатах исследований по формированию в плазме электрического разряда и использованию полиэтилентерефталатных трековых мембран (ПЭТФ ТМ) с наноструктурированной поверхностью в качестве дренажного материала при антиглаукоматозных операциях. Рассмотрены особенности наноструктурирования поверхности мембран в плазме неполимеризующихся газов.

Предварительные испытания показали, что мембраны данного типа не подвергаются биодеструкции и могут находиться в интрасклеральной полости длительное время. Для наноструктурирования поверхности мембран применена обработка в плазме неполимеризующихся газов.

1. Методика эксперимента

В экспериментах использовали трековые мембраны с эффективным диаметром пор 0.2 мкм (плотность пор $2 \times 10^8 \text{ см}^{-2}$) и 0.4 мкм (плотность пор $5 \times 10^7 \text{ см}^{-2}$), которые получали облучением ПЭТФ-пленок толщиной 10.0 мкм (Лавсан, Россия) ускоренными на циклотроне У-300 ионами криптона с энергией $\sim 1 \text{ МэВ/нуклон}$ с последующей физико-химической обработкой по стандартной методике [1]. Поры данных мембран представляют собой цилиндрические каналы, поперечное сечение которых не изменяется по глубине.



Обработку мембран в плазме проводили на плазмохимической установке с использованием ВЧ-разряда переменного тока с частотой 13.56 МГц. Образцы мембран размерами 10×10 см, закрепленные на плоском держателе, размещали в вакуумной камере установки в зоне действия плазмы. Воздействию плазмы подвергали обе стороны мембран. В качестве плазмообразующего газа применяли азот, воздух и смесь азота с кислородом в различном соотношении. Параметры разряда (давление газа в вакуумной камере, мощность разряда) и длительность воздействия плазмы варьировали. Методика обработки и схема плазмохимической установки подробно описаны в работе [2].

Характеристики исходных мембран и мембран, модифицированных в плазме, определяли при помощи ряда взаимодополняющих методик. Изменение толщины мембран регистрировали с помощью электронного измерителя толщины 'Tesa Unit' (Австрия), точность измерений составляла ± 0.1 мкм. Газопроницаемость мембран (поток воздуха, прошедший через мембрану) измеряли при заданном перепаде давления с помощью поплавкового расходомера. На основании полученных значений, используя формулу Хагена–Пуазейля [3], рассчитывали эффективный диаметр пор (погрешность 3%). Исследование микроструктуры образцов, а также определение диаметра пор на поверхности мембран проводили с помощью сканирующего электронного микроскопа 'JSM-840' (JEOL) с разрешением 10 нм. Перед просмотром на образцы напыляли в вакууме тонкий слой золота. Топографию поверхности мембран изучали с помощью атомно-силового микроскопа AFM, Q-ScopeTM NomadTM. Форму пор мембран исследовали методом металлических реплик [4], в качестве материала реплик использовали медь. Изменения в поверхностном слое мембран изучали с помощью метода многократного нарушенного полного внутреннего отражения (МНПВО) ИК-спектроскопии. В качестве элемента МНПВО использовали призмы из Ge и стекла KRS-5 с углами 45 и 55° и чис-

лом отражений соответственно 24 и 14. Использовали спектрофотометр 'Specord M-80' (Carl Zeiss Jena). Отнесение полос поглощения проводили согласно [5]. Измерение краевого угла смачивания определяли методом сидящей капли с помощью горизонтального микроскопа, снабженного гониометром, по методике [3]. Для измерений использовали воду (бидистиллят), точность измерений составляла $\pm 1^\circ$. Водопроницаемость измеряли при заданном перепаде давления с помощью стандартной фильтрационной установки ФМО-2 (Россия) на образцах мембран площадью 254 мм². Использовали предварительно очищенную фильтрацией через ПЭТФ ТМ с диаметром пор 50 нм дистиллированную воду. До начала фильтрации мембраны выдерживали в водном растворе в течение 20 мин. Заряд поверхности пор мембран определяли методом потенциала течения [3] при фильтрации 10⁻³ М раствора хлорида калия под действием созданного на мембране перепада давления.

В эксперименте на животных проводилось определение токсического действия эксплантодренажа на окружающие ткани. Наличие белков во влаге передней камеры моделирует реакцию тканей в организме, а прозрачность тканей позволяет оценивать контакт белков с поверхностью имплантата. Интрасклеральная имплантация позволяет оценить степень воспалительной реакции и биодеградации имплантата.

Через роговичный разрез на «12 часах» дренаж, размером 1×2 мм, имплантировали в переднюю камеру 10 глаз кроликов породы шиншилла и в интрасклеральный карман, сформированный в 3 мм от лимба, с последующим наложением швов на края раны. Сроки наблюдения за животными составили от 1 до 30 дней. Воспалительную реакцию глаза оценивали по шкале Л.С. Чабровой:

0-я степень – ареактивное течение. Конъюнктивальная инъекция отсутствует, роговица, влага передней камеры прозрачны, хорошо выражен рисунок радужки, имплантат интактен;

1-я степень – слабо выраженная реакция. Отек роговицы в зоне вмешательства,



симптом Тиндаля во влаге передней камеры, наличие фибрина или преципитатов на имплантате, отек и гиперемия зрачкового края радужки;

2-я степень – реакция средней степени. Характерен отек половины роговицы, единичные складки десцеметовой оболочки, фибрин в передней камере глаза, экссудат на поверхности имплантата, расширение сосудов радужки;

3-я степень – резко выраженная реакция. Отек роговицы, утолщение стромы, выраженный десцеметит, экссудат (гипопион), гифема, рубец радужки, выраженная экссудация на имплантате с формированием синехий.

Исследование цитотоксичности дренажей проводили на клеточной культуре фибробластов мышей линии 3ТЗ клона SC-1. В качестве экстрагирующих сред использовали стерильные раствор натрия хлорида и среду Игла с добавлением эмбриональной телячьей сыворотки. Клетки фибробластов высевали в чашки Петри в концентрации 40 тыс./мл, инкубировали в течение суток при температуре 37°C. Затем каждый экстракт вносили на монослой фибробластов. Спустя 24 часа оценивали лизис клеток, их морфологию и количество.

Проводилось морфологическое исследование тканей глаз, полученных в эксперименте на 30 кроликах породы шиншилла. Вторичную глаукому моделировали введением 1%-ного раствора Януса зеленого в переднюю камеру глаза. Глаукома развивалась в течение одного месяца. Средний уровень внутриглазного давления до операции составлял 35 ± 3 мм рт. ст. Антиглаукоматозное вмешательство выполняли с имплантацией дренажа у 30 кроликов породы шиншилла (30 глаз). При последующем гистологическом исследовании серийные срезы глаз окрашивали гематоксилин-эозином и по Ван-Гизон.

2. Результаты и их обсуждение

2.1. Влияние плазмы неполимеризующихся газов на структуру трековых мембран

Проведенные исследования воздействия плазмы воздуха на полиэтилентерефталатные

трековые мембраны обоих типов позволили установить следующий ряд закономерностей. Во-первых, при обработке ПЭТФ ТМ в плазме ВЧ-разряда в воздухе происходит травление как внешней поверхности мембран, так и поверхности пор, сопровождающееся уменьшением толщины мембран и увеличением их эффективного диаметра пор (табл. 1). Результат газоразрядного травления пор трековых мембран иллюстрирует рис. 1, на котором представлены микрофотографии поверхностей исходной и обработанной в плазме воздуха мембран. Видно, что диаметр пор на поверхности модифицированной мембраны выше в сравнении с контрольным образцом. Как показывают проведенные эксперименты, скорость травления зависит от величины параметров разряда (давления плазмообразующего газа и мощности разряда) – при увеличении параметров разряда скорость травления возрастает (см. табл. 1). На величину скорости травления также влияет изменение состава плазмообразующего газа. Так, замена воздуха на азот снижает скорость травления – эффективный диаметр пор мембран, полученных травлением в плазме азота, как правило, меньше диаметра пор аналогичных мембран, образуемых в плазме воздуха. Варьирование соотношения азота и кислорода в составе плазмообразующего газа показывает, что при повышении концентрации кислорода происходит увеличение скорости травления (табл. 2). Введение кислорода в состав газа, таким образом, повышает активность плазмы. Использование же в качестве плазмообразующего газа чистого кислорода позволяет значительно повысить скорость травления, что дает возможность интенсифицировать процесс газоразрядного травления.

Во-вторых, результаты исследований показывают: воздействие плазмы неполимеризующихся газов на трековые мембраны приводит к образованию асимметричных мембран – форма пор мембран, образуемых в процессе газоразрядного травления, изменяется [2, 6]. При этом в зависимости от выбранных параметров разряда травление можно производить либо в части канала, либо по



Таблица 1

Изменение характеристик мембран в процессе обработки в плазме воздуха

Давление газа, Па	Мощность разряда, Вт	Толщина, мкм	Краевой угол смачивания, °	Эффективный диаметр пор, мкм		Водопроницаемость при $\Delta P = 4 \times 10^4$ Па, мл/мин см^2	
				Мембрана I	Мембрана II	Мембрана I	Мембрана II
–	–	10.0	65	0.220	0.395	2.2	5.4
0.15	70	9.9	20	0.230	0.405	2.7	6.7
0.25	70	9.8	25	0.235	0.425	3.1	7.6
4.0	70	9.4	30	0.245	0.445	3.6	8.4
10.5	70	9.0	35	0.255	0.460	4.1	9.1

Примечание. Длительность воздействия 10 мин. Мембрана I имеет диаметр пор 0.2 мкм, мембрана II – диаметр пор 0.4 мкм.

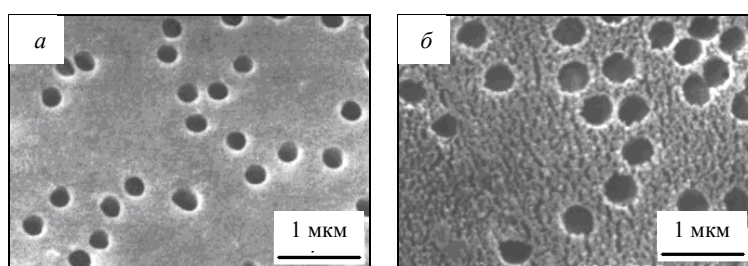


Рис. 1. Электронные микрофотографии поверхностей исходной ПЭТФ ТМ с эффективным диаметром пор 0.2 мкм (а) и обработанной в плазме воздуха мембраны (б). Параметры разряда: давление газа в вакуумной камере 0.25 Па, мощность разряда 100 Вт, длительность воздействия 10 мин

Таблица 2

Изменение характеристик мембраны с диаметром пор 0.4 мкм в процессе обработки в плазме различного состава

Состав плазмообразующего газа	Газопроницаемость при $\Delta P = 5 \times 10^3$ Па, мл/мин см^2	Эффективный диаметр пор, мкм	Пористость, %	Водопроницаемость при $\Delta P = 4 \times 10^4$ Па, мл/мин см^2
–	215	0.395	6.1	5.4
N_2	300	0.435	7.4	8.4
$\text{N}_2 + \text{O}_2$ (3:1)	350	0.455	8.1	8.9
$\text{N}_2 + \text{O}_2$ (1:1)	365	0.460	8.3	9.1
$\text{N}_2 + \text{O}_2$ (1:3)	375	0.465	8.5	10.0
O_2	630	0.540	11.4	17.9

Примечание. Параметры разряда: давление газа 22.5 Па, мощность разряда 400 Вт, длительность воздействия 5 мин.

всей длине каналов пор. В обоих случаях образуются асимметричные трековые мембраны. Данный результат иллюстрирует рис. 2, на котором представлена схема структуры исходной ТМ (рис. 2, а) и модифицированных в плазме воздуха мембран (рис. 2, б–г).

Изменение формы пор мембран при воздействии плазмы подтверждается исследованием металлических реплик пор, полученных электрохимическим осаждением меди в порах мембран (рис. 3).

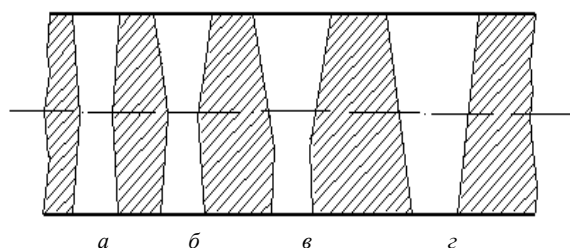


Рис. 2. Схема структуры пор исходной ПЭТФ ТМ (а) и мембран, модифицированных в плазме воздуха (б–г)

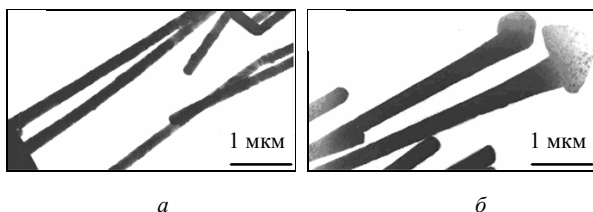


Рис. 3. Электронные микрофотографии металлических реплик с пор исходной ПЭТФ ТМ с эффективным диаметром пор 0.2 мкм (а) и обработанной в плазме воздуха мембраны (б). Параметры разряда: давление газа в вакуумной камере 46.5 Па, мощность разряда 300 Вт, длительность воздействия 10 мин

Видно, что после обработки ПЭТФ ТМ в плазме воздуха форма пор мембраны изменяется – поры приобретают асимметричную (в данном случае коническую) форму. На изменение формы пор указывает также сравнительный анализ диаметров пор на поверхности исходного образца и среднего диаметра пор модифицированных в плазме мембран. Наибольший интерес представляют мембраны, у которых травлению подверглась только часть каналов пор (см. рис. 2, б, в). В результате газоразрядного травления в слое таких мембран формируются конусообразные углубления, увеличивающие объемную пористость (см. табл. 2), что отражается на поведении мембран в процессе фильтрации. Как показывают экспериментальные данные, производительность по воде асимметричных мембран выше в сравнении с исходной мембраной (см. табл. 2). Незатронутый в процессе травления слой, структура которого остается без изменения, определяет селективные свойства мембран. Незначительные изменения в данном слое при обработке в плазме не вызывают заметного снижения селективности разделения. Варьирование параметров разряда и длительности воздействия плазмы приводит к изменению как размера конусообразной части пор, так и толщины незатронутого в процессе травления слоя. Это дает возможность получать большой ассортимент асимметричных трековых мембран с различными характеристиками.

2.2. Влияние плазмы неполимеризующихся газов на поверхность трековых мембран

При воздействии плазмы неполимеризующихся газов на полиэтилентерефталатные трековые мембраны происходит измене-

ние свойств ее поверхностного слоя. Это подтверждается данными ИК-спектроскопии обработанных в плазме образцов мембран (табл. 3). При анализе МНПВО ИК-спектров обработанных в плазме воздуха образцов мембран, записанных с использованием призмы из германия, глубина проникновения ИК-излучения в образце которой составляет 0.69 мкм, было обнаружено увеличение интенсивности полосы поглощения 1720 см^{-1} , связанной с валентными колебаниями карбонила (C=O) карбоксильных групп. При варьировании параметров плазменного разряда наблюдается изменение концентрации поверхностных групп: повышение мощности разряда и давления плазмообразующего газа вызывает образование большего числа функциональных групп. Обработка в плазме воздуха, таким образом, приводит к повышению содержания в поверхностном слое мембран карбоксильных групп, образование которых может быть объяснено следующим. При воздействии активных частиц плазмы происходит деструкция полимерных цепей на поверхности, причем преимущественно в аморфной фазе, обладающей меньшей плотностью и потому более подверженной окислению [7].

Увеличение содержания карбоксильных групп в поверхностном слое мембран приводит к повышению отрицательного заряда пор.

Таблица 3

Результаты ИК-спектрофотометрического исследования модифицированных в плазме воздуха ПЭТФ ТМ с диаметром пор 0.2 мкм

Режим обработки		Увеличение концентрации COOH-групп, %	Соотношение интенсивностей полос			Изменения в структуре поверхности мембран
Давление воздуха, Па	Мощность разряда, Вт		I_{1473} / I_{1455}	I_{1343} / I_{1370}	I_{973} / I_{1043}	
–	–	–	4.0	5.15	2.10	–
0.15	70	4	3.85	4.95	2.00	Аморфизация
0.25	70	7	3.75	4.75	1.95	То же
4.0	70	19	3.55	4.5	1.80	»
10.5	70	28	4.35	5.65	2.45	Кристаллизация

Примечание. Длительность воздействия плазмы 10 мин.



Действительно, измерение поверхностного заряда пор мембран методом потенциала течения, обработанных в плазме воздуха, показывает, что на их поверхности в водных растворах образуется больший отрицательный заряд в сравнении с исходной мембраной. Для примера укажем следующее. Если величина заряда поверхности пор исходной полиэтилентерефталатной трековой мембраны с диаметром пор 0.4 мкм составляет 1.17×10^{-2} Кл/м², то для модифицированной в плазме воздуха (при давлении газа в вакуумной камере 13.5 Па и мощности разряда 300 Вт) мембраны эта величина составляет 1.62×10^{-2} Кл/м².

Для характеристики структурных изменений, возникающих в мембранах при их обработке в плазме, были рассчитаны соотношения интенсивностей полос поглощения 1473 и 1455, 1343 и 1370, 973 и 1043 см⁻¹. Полосы поглощения при 1473 и 1343 см⁻¹ характеризуют деформационные колебания СН₂-групп в транс-конформации, а 1455 и 1370 см⁻¹ – деформационные колебания в гош-конформации. Полосы поглощения 973 и 1043 см⁻¹ относят к колебаниям всей цепи кристаллической и аморфной фазы соответственно. Проведенные измерения показывают (см. табл. 3), что в результате обработки в плазме воздуха при малых значениях параметров разряда происходит аморфизация вследствие деструкции полимерных цепей. При увеличении давления в газовой фазе и мощности разряда наблюдается ориентация на поверхности полимера. При сравнении ИК-спектров модифицированных мембран и исходной, записанных обычным способом и с использованием призмы KRS-5 (глубина проникновения ИК-излучения в образце которой составляет около 1.5 мкм), не обнаруживается каких-либо изменений – сигнал от объемного слоя образца в этом случае перекрывает слабый сигнал от поверхностного слоя. Это указывает на то, что изменения при обработке ПЭТФ мембран в плазме исследуемого газа происходят в тонком поверхностном слое, не затрагивая объема полимерной матрицы.

На основании вышеизложенного можно заключить, что обработка ПЭТФ ТМ в плазме воздуха приводит к образованию на их поверхности тонкого модифицированного слоя с нарушенной структурой, содержащего деструктированные макромолекулы с окисленными группами в местах разрыва химических связей. Воздействие плазмы вызывает, кроме того, значительные морфологические изменения поверхности. На первоначально гладкой полимерной поверхности появляются многочисленные кратеры – окисленно-деструктированные области, возникновение которых объясняется различием скоростей травления аморфных и кристаллических областей полимера [8]. Поверхность мембран становится шероховатой (см. рис. 1, б). Размеры кратеров при варьировании условий обработки и длительности воздействия разряда изменяются (рис. 4) и эти изменения наиболее выражены при воздействии плазмы воздуха. Развитие эрозии поверхности мембран и их гидрофилизация обуславливают повышение смачиваемости – величина краевого угла смачивания мембран существенно уменьшается (см. табл. 1). Сравнительный анализ данных, приведенных в табл. 1, показывает, что изменение параметров разряда влияет на величину предельного значения краевого угла смачивания. Повышение давления плазмообразующего газа при определенной мощности разряда и длительности обработки способствует достижению меньшего значения величины краевого угла смачивания. Проведенные аналогичные исследования позволили установить, что увеличение мощности разряда также способствует достижению предельного значения величины краевого угла смачивания за более короткое время воздействия.

Увеличение содержания карбоксильных групп в поверхностном слое мембран, вызывающее повышение отрицательного заряда пор в растворе, а также развитие шероховатости поверхности и приводят к положительному результату – уменьшению адсорбции белков и других составляющих внутриглазной жидкости (их диаметр около 0.2 мкм),

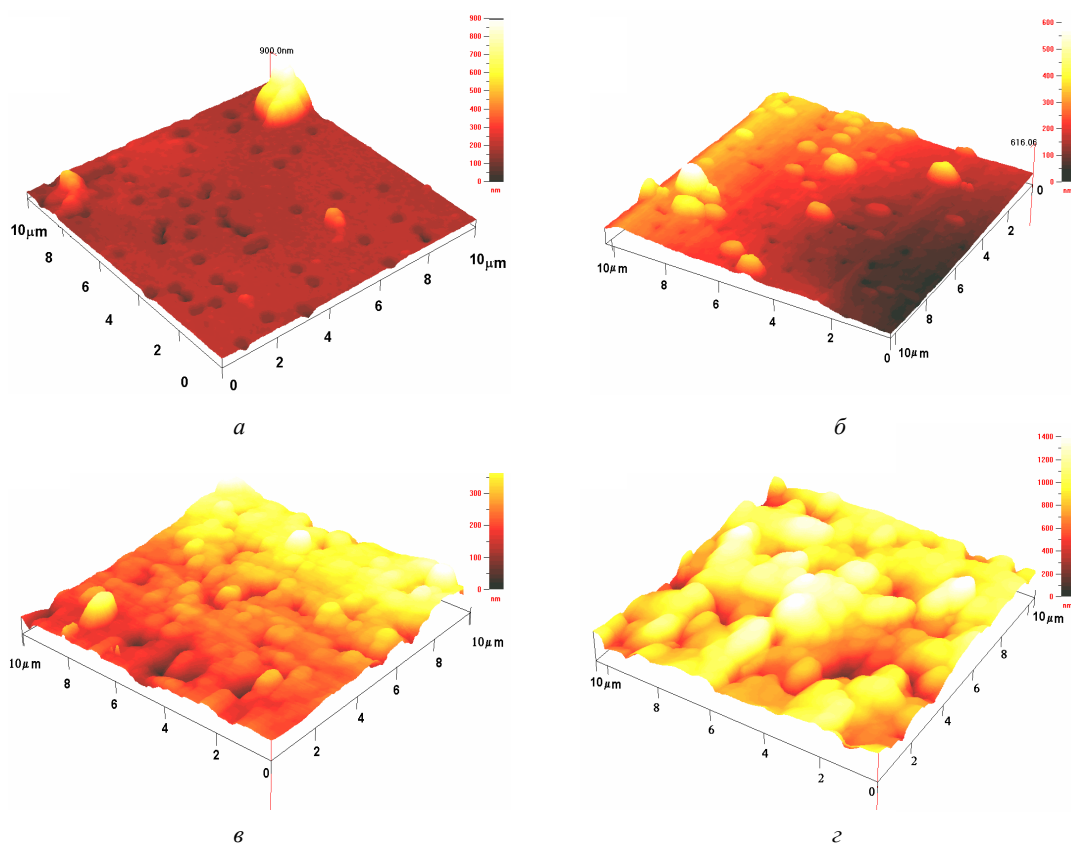


Рис. 4. Микрофотографии поверхности исходной ПЭТФ ТМ с диаметром пор 0.4 мкм (а) и обработанных в плазме воздуха мембран в течение 1 (б), 5 (в) и 10 мин (г). Параметры разряда: давление газа в вакуумной камере 53.5 Па, мощность разряда 60 Вт

а также клеток крови [9]. Данный результат обусловлен отталкиванием молекул белков, имеющих также отрицательный заряд.

2.3. Использование трековых мембран с наноструктурированной поверхностью при антиглаукоматозных операциях в эксперименте

При определении токсического действия эксплатордренажа на окружающие ткани после имплантации его в переднюю камеру 10 глаз кроликов срок наблюдения составил 30 дней. Воспалительная реакция у экспериментальных животных соответствовала 0-й степени воспаления в 25 глазах и в 5 случаях – 1-й степени (слабо выраженная реакция) и полностью купировалась на 7-й день после стандартного противовоспалительного лечения. В результате исследования цитотоксичности дренажей при нанесении на монослой фибробластов экстракта дренажа не было выявлено гибели клеток и их морфологических изменений. Токсичность соответствовала 0-й степени (по 5-балльной шкале).

После антиглаукоматозных операций во всех случаях при биомикроскопии определялись плоские разлитые фильтрационные подушечки. Слизистая оболочка над фильтрационной подушкой была хорошо васкуляризирована (рис. 5).

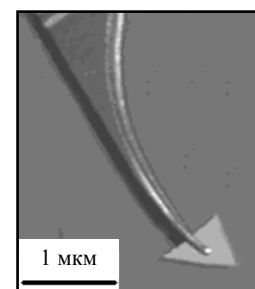


Рис. 5. Внешний вид дренажа из ПЭТФ ТМ, используемого при антиглаукоматозных операциях

Избыточного рубцевания и формирования псевдокистозных полостей не наблюдалось. Спустя две недели уровень внутриглазного давления составил 17.6 ± 2.6 мм рт. ст. Эта тенденция сохранялась в течение 12 месяцев.



В ходе морфологических исследований было установлено, что в тканях, окружающих имплантат, отсутствовали выраженные реактивные воспалительные изменения. Через 2 недели определялась умеренная клеточная реакция. Вокруг дренажа сформировалась тончайшая соединительнотканная капсула с единичными фибробластами и фиброцитами. Через 4 недели визуализировалось свободное пространство между дренажом и склерой; слабо выраженная инфильтрация гистиоцитами и единичными фибробластами. В случаях имплантации дренажей, обработанных в плазме кислорода, между имплантатом и склерой капсула отсутствовала. Определялись лишь единичные участки нежной волокнистой соединительной ткани и свободное пространство на всем протяжении. Через 1 год после имплантации признаков биодеструкции не обнаружено. Дренаж сохранял свои функциональные свойства.

Заключение

Суммируя полученные результаты, можно заключить следующее. Воздействие плазмы ВЧ-разряда в неполимеризующихся газах на полиэтилентерефталатные трековые мембраны приводит к образованию асимметричных трековых мембран с повышенной производительностью, структура и химический состав поверхностного слоя которых изменены – наноструктурированы. Наличие наноструктурированного слоя на поверхности мембран вызывает изменение целого ряда свойств ПЭТФ ТМ. Увеличение содержания карбоксильных групп в поверхностном

слое мембран приводит к повышению степени их гидрофильности. Развитие эрозии поверхности мембран и их гидрофилизация обуславливают повышение смачиваемости ПЭТФ ТМ, величина которой зависит от интенсивности разряда и длительности его воздействия. Увеличение содержания карбоксильных групп в поверхностном слое мембран, вызывающее повышение отрицательного заряда пор в растворе, а также развитие шероховатости поверхности и приводят к уменьшению адсорбции белков и других составляющих внутриглазной жидкости, а также клеток крови. Повышение пористости модифицированных мембран приводит к улучшению их фильтрационных характеристик.

Список литературы

1. Флеров Г. Н. // Вестн. АН СССР. 1984. № 4. С. 35.
2. Dmitriev S. N., Kravets L. I., Sleptsov V. V. // Nucl. Instr. and Meth. B. 1998. Vol. 142. P. 43.
3. Мулдер М. Введение в мембранную технологию / пер. с англ. ; под ред. Ю.П. Ямпольского, В.П. Дубяги. М. : Мир, 1999. 513 с.
4. Реутов В. Ф., Дмитриев С. Н. // Рос. хим. журн. 2002. Т. 46, №5. С. 74.
5. Беллами Л. Инфракрасные спектры сложных молекул. М. : Изд-во иностр. лит., 1963. 590 с.
6. Kravets L. I., Dmitriev S. N., Sleptsov V. V., Elinson V. M. // Surf. Coat. Technol. 2003. Vol. 174–175. P. 821.
7. Иванов С. И. // Химия высоких энергий. 1983. Т. 17, № 3. С. 253.
8. Чалых А. Е., Петрова И. И., Василенко Ж. Г., Герасимов В. И., Брусенцова В. Г. // Высокомолек. соед. 1974. Т. 16А, № 6. С. 1289.
9. Kamath S., Bhattacharyya D., Padukudru C. et al. // J. Biomed. Mater. Res. Part A. 2007. Vol. 86. P. 617.

ХРОНИКА

УДК 535.1:372.853+1.113

КРУГЛЫЙ СТОЛ

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

Модератор: Медведев Борис Абрамович

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

Представлена работа круглого стола «Человек и свет в естественно-научной и художественной картине мира. III» на секции по истории, методологии и философии оптического образования XIV Международной школы для молодых ученых и студентов по оптике, лазерной физике и биофотонике, прошедшей в Саратове 5–8 октября 2010 года.

Ключевые слова: оптическое образование, методология, философия.

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

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 the XIV International School for Young Scientists and Students on Optics, Laser Physics and Biophotonics, which was of October 5–8, 2010, 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;

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

Профессор кафедры философии Саратовского государственного технического университета (СГТУ), д-р филос. наук Дуплинская Юлия Михайловна;

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

Заведующий кафедрой «Приборостроение» СГТУ, д-р физ.-мат. наук Мельников Леонид Аркадьевич;

Профессор кафедры «Математика и моделирование» СГТУ, д-р физ.-мат. наук Паршков Олег Михайлович;

Доцент кафедры компьютерной физики СГУ, канд. физ.-мат. наук Цой Валерий Иванович;

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

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

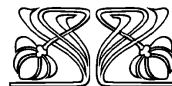
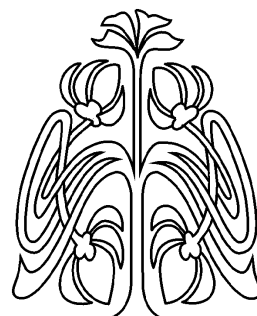
Заведующий кафедрой теоретической и математической физики СГУ, профессор, д-р физ.-мат. наук Бабков Лев Михайлович;

Head of Bio-Photonics & Bio-Medical Imaging, University of Otago, New Zealand, professor Игров Меглинский

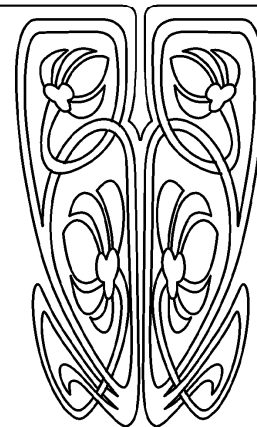
Б. А. Медведев

КВАНТОВО-ОПТИЧЕСКИЕ АНАЛОГИИ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ПСИХОЛОГИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ КРЕАТИВНОЙ ЛИЧНОСТИ

Исследования в области развития креативности инженеров и молодых ученых представляются одними из самых значимых для решения современных проблем университетского образования. При этом проблема



ПРИЛОЖЕНИЯ





инициации креативности ученого актуализирует фундаментальный вопрос Хайдеггера: «Что требуется, чтобы мы осуществили мышление соответственно его сущности?» – Не понимание ли того, что, говоря словами Ж. Бодрийяра, «мысль, стремящаяся стать событием во вселенной, должна находиться с ней в состоянии подобия»?

Необходимость расширения границ рационального мышления в области «дальних пределов человеческой психики» и формирования более динамичного аспекта на природу творчества актуализирует проблему моделирования психики человека и приведение её в соответствие с планетарным масштабом его деятельности.

Исходя из сентенции К. Г. Юнга, согласно которой «сознание – дискретный феномен», наша модель (см. : *Медведев Б. А.* Антропо-космоцентрическая модель психологической структуры креативной личности // В мире научных открытий. Красноярск: Изд-во ООО «Научно-инновационный центр», 2010. № 6.2 (12). С. 302–305) в первом приближении, по аналогии с квантованным энергетическим спектром электрона в атоме, представляется в виде дискретного набора уровней сознания, сходящихся к нижней границе континуального спектра архетипов коллективного бессознательного. Развиваются идеи К. Левина об актуальности привнесения физических понятий в область аналитической психологии, используются античные идеи космоцентризма и русского космизма в трудах Циолковского, Вернадского и Чижевского. По ассоциации с представлением о дискретности изменённых состояний сознания Чарльза Тарта постулируется положение о наличии в психологической структуре креативной личности творческих состояний сознания, которые характеризуются повышенной способностью к образному мышлению, восприятием довербальных форм и образов. При использовании квантово-оптических аналогий с вероятностями спонтанных и индуцированных переходов модель дает возможность описания интуитивных процессов в мышлении в виде «квантовых» скачков с переносом прообразов знания из континуума коллективного бессознательного в психологической структуре личности на один из вакантных уровней сознания.

Соглашаясь с М. Хайдеггером в том, что «...истина, как непотаенность бытия, не обязательно привязана к телесному воплощению», мы исходим из представлений М. Мамардашвили о

том, что «пространство психического, можно думать, простирается в особое измерение, или четвертое состояние бытия, о котором, по меньшей мере, можно сказать, что оно не является евклидово-декартовым и явно требует применения понятий сложных гиперпространств, аппарата современных топологий и, возможно, фазовых и еще более сложных неметризованных представлений пространства-времени». Импульсом к движению мышления в этом направлении является вопрос М. Хайдеггера : «Пространство – однородная, ни в одной из мыслимых точек ничем не выделяющаяся, по всем направлениям равноценная, но чувственно не воспринимаемая разъятость?». Его сомнение инициирует предлагаемую нами дискуссию по целому ряду вопросов: Не может ли Я-концепция, отнесенная к психологии креативной личности, быть дополнена принятием тезиса – «"Я" – расширяющаяся вселенная»? «Я» – как образ расширяющегося сознания ребенка. «Я» – как отражение расширяющейся вселенной Фридмана и Хаббла, «Я» – как интериоризация космоса в соответствии с представлениями Плотина, согласно которым «...если мир мог стать еще большим, чем он есть, то и тогда у души хватило бы сил на все, потому что и тогда он весь содержался бы во всей душе» и «так как идея неделима, она...становится присущей сразу всей вселенной...». Креативность, таким образом, предполагает актуализацию ноосферного мышления, вовлеченного в расширяющуюся сферу деятельности человеческого духа – в пневмосферу Флоренского. С различными орбитами нашего мышления, «светящимися» в пневмосфере, сопоставляются уровни сознания, соответствующие определенным ступеням развития цивилизации. Выделяются орбиты мышления и соответствующие им уровни сознания Античности, Средневековья, эпохи Возрождения, века Просвещения, Нового и Новейшего времени. В свою очередь, каждый из перечисленных уровней расщепляется на систему подуровней, отражающих структуру психики с сознанием, ориентированным на предметные области знания. При этом мы предполагаем, что коллективное бессознательное Юнга является атрибутивным элементом структуры психики для всей системы дискретных уровней её сознания.

Придавая современное звучание платоновским представлениям о круговращениях мышления в «Тимее», мы полагаем, что мышление ис-



следователя совершает два круговращения: первое, внешнее – вокруг предмета познания; второе, внутреннее – «вокруг своей оси», которое ассоциируется с прохождением фаз творческого цикла. При достижении фазы, граничащей с творческим состоянием сознания, инициируется скачок мышления на новую «орбиту», более близкую к сущности познаваемого. Просматривается подобие модели движения мышления креативной личности с планетарной моделью водородоподобного атома в случае замены ядра на объект познания, а вместо электрона, совершающего орбитальное и спиновое движение, рассматривается внешнее и внутреннее круговращение мышления.

В. В. Розен

**ПРОБЛЕМА ЦЕЛОСТНОСТИ МИРА
В СВЕТЕ РАЗВИТИЯ ЕСТЕСТВОЗНАНИЯ**

Представления о мире как целостном единстве впервые сформировались в Древней Греции. Сотворение мира греки представляли как превращение беспорядочного хаоса в упорядоченный космос (от греч. «косм» – порядок). Порядок есть выражение некой первоначальной сущности, которая разными философами (Пифагор, Платон, Аристотель, Демокрит, Эпикур) трактовалась по-разному. В дальнейшем, начиная с эпохи Возрождения, восходящие к античности представления о целостности мира приобретают естественнонаучную основу. Попытаемся обозначить важнейшие направления разработки этой глобальной философской идеи. Несколько упрощая, единство мира можно рассматривать в следующих аспектах.

1. Физическое единство мира состоит в единстве физических законов. Прорывом в осознании этого послужили законы Ньютона о движении. После Ньютона стало ясно, что одни и те же законы управляют движением всех тел – и на Земле, и в далеком космосе. Это нанесло сокрушительный удар по космической дихотомии Аристотеля о разделении мира на подлунный и надлунный с разным характером их законов и протекающих в них процессов. В Новое время огромную роль в осознании физической целостности мира сыграли законы сохранения материи и энергии.

2. Химическое единство мира проявляется, прежде всего, в одинаковости химического состава. Все тела – и на Земле, и в космосе – состоят из одних и тех же элементов. Более того, не су-

ществует особых атомов для живых организмов (тайна жизни глубже!) – этот факт лежит в основе единства живого и неживого.

3. Системное единство мира проявляется в согласованности происходящих в мире процессов – как в пространстве, так и во времени. Согласование ритмичности огромного количества внешне различных систем, составляющих реальный мир, называется синхронизацией. Кто же выступает синхронизатором, «дирижером» этого огромного оркестра? Ими являются, в первую очередь, электромагнитные поля, пронизывающие Землю и все космическое пространство. В частности, опыты, проведенные в последние годы, подтвердили, что взаимосвязи между животными осуществляются с помощью электрических сигналов, распространяемых посредством электромагнитных полей. Именно электромагнитные взаимодействия связывают космическое пространство в единую целостную структуру. Свет ответит на вопрос: «А что дальше?»

О. М. Паршков

**ПРОРЫВ В ОБЛАСТИ ФИЗИЧЕСКОЙ НАУКИ,
СКОРРЕ ВСЕГО, БУДЕТ СВЯЗАН
С ЛАЗЕРНЫМИ ТЕХНОЛОГИЯМИ, Т.Е. СО СВЕТОМ...**

Более трёх веков прошло с тех пор, как на основе законов Ньютона возникла классическая механика. Более двух веков – с тех пор, как уравнения Максвелла легли в основу теории электромагнитного поля. Примерно один век – с революционного научного прорыва, завершившегося созданием теории относительности и квантовой теории. Итак, раз в сто лет мир физической науки получает новый импульс, значительно меняющий представления об окружающем мире. Должен ли нарушиться этот временной порядок? Где очередной прорыв в неизвестное, будет ли он вообще? Эти вопросы пока остаются без ответов. Лично я верю в неисчерпаемость Природы, в невозможность полного познания её законов, но верю также и в способность человеческого разума непрерывно углублять знания о физическом мире, так что я думаю – очередной прорыв в мир неизвестного близок. Но где? Свет ответит на вопрос: «А что дальше?». Свету уже приходилось участвовать в научных революциях при возникновении теории относительности и квантовой механики, когда технология исследования его свойств достигла уровня, достаточного для проведения опыта



Майкельсона и изучения фотоэффекта. Это было сто лет назад. С тех пор технология работы со светом достигла впечатляющих успехов, прежде всего усилиями лазерной физики. Многие вопросы, обсуждаемые великими умами прошлого века и, как казалось ранее, имеющие чисто академический интерес, приобрели новые аспекты, допускающие экспериментальную проверку. Известные соображения Эйнштейна по поводу неполноты квантовой теории и существования скрытых параметров были сняты экспериментами Аспе с сотрудниками при проверке неравенств Белла. В ряде прецизионных лазерных экспериментов, например эксперименте Цайлингера с сотрудниками, экспериментальному изучению подвергались перепутанные состояния квантовых систем, принцип неопределённости подвергался непосредственной проверке в эксперименте Пфлигора – Менделя. Перечисление всего сделанного лазерной физикой и, следовательно, светом, вряд ли возможно.

Недавно в издательстве «Интеллект» вышла интересная книга Дж. Гринштейна и А. Зайонца «Квантовый вызов». Авторы в популярной форме излагают многие аспекты применения лазерных технологий для обоснования фундаментальных аспектов квантовой механики и теории относительности. В книге имеются и различные интерпретации экспериментов с фотонами, причем авторы часто приводят совершенно разные трактовки одного и того же эксперимента. Это обстоятельство отражает тот факт, что в научном сообществе возрос интерес к фундаментальным аспектам физики. Возрастание этого интереса стимулировано свойствами света и наличием новых тонких технологий его изучения. Некоторые трактовки результатов экспериментов со светом уже не укладываются в рамки известных теоретических представлений. Таковыми, например, является ряд соображений, связанных с эффектом квантовой нелокальности и коллапса волновой функции. На мой взгляд, пока нет ещё строго обоснованных указаний на то, что в каком-либо конкретном эксперименте обнаружен эффект, не укладывающийся в рамки квантовой теории. Однако вероятность этого события, по-видимому, возрастает год за годом. И если прорыв в области физической науки произойдёт, то он, скорее всего, будет связан с лазерными технологиями, т.е. со светом.

В. П. Рябухо

ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ И ВРЕМЕННЫЕ МАСШТАБЫ ОПТИЧЕСКОГО ВОЛНОВОГО ПОЛЯ

Образные представления о свете в оптике тесно связаны с пространственными и временными масштабами волнового поля. В первую очередь, оптическое поле характеризуется временным T и пространственным λ периодами колебаний, которым ставятся в соответствие временные $\omega = 2\pi/T$ и пространственные $k = 2\pi/\lambda = \omega/v$ частоты (v – скорость распространения поля). Пространственный период и, соответственно, пространственная частота поля по разным направлениям x, y, z разные, поэтому волновое поле характеризуется набором пространственных частот k_x, k_y, k_z , в том числе и плоская монохроматическая волна произвольного направления распространения.

Немонохроматическое поле со спектром временных частот $G(\omega)$ конечной ширины $\Delta\omega$ характеризуется временным масштабом – временем когерентности $\tau_c \approx 2\pi/\Delta\omega$ и соответствующим пространственным корреляционным масштабом – длиной временной когерентности $l_c \approx v\tau_c$. Аналогично волновое поле со сложным амплитудно-фазовым пространственным распределением, в частности с нелинейным в пространстве изменением фазы, имеет спектр пространственных частот $W(k_x, k_y, k_z)$ конечной ширины $\Delta k_x, \Delta k_y, \Delta k_z$, что эквивалентно пространственному непостоянству частот поля $k_x(x, y, z), k_y(x, y, z), k_z(x, y, z)$. Такое волновое поле характеризуется пространственными корреляционными масштабами – длинами поперечной когерентности $\rho_{\perp x} \approx 2\pi/\Delta k_x, \rho_{\perp y} \approx 2\pi/\Delta k_y$, а также длиной продольной когерентности $L_c \approx 2\pi/\Delta k_z$ в направлении распространения поля и соответственно объемом когерентности $V_c \approx \rho_{\perp x} \cdot \rho_{\perp y} \cdot L_c$. С масштабом L_c связано представление о волновом цуге и о его длине.

Ширина спектра пространственных частот в продольном направлении Δk_z определяется и шириной спектра временных частот $\Delta\omega$, и шириной угловых направлений распространения поля $\Delta\theta$. Если волновое поле имеет высокую направленность – узкий спектр угловых направлений, $\Delta\theta \approx 0$, то длина продольной когерентности – длина волнового цуга, равна длине временной когерентности $L_c \approx l_c$. Если же поле имеет достаточно узкий спектр временных частот, $\Delta\omega \ll \omega$, то длина волнового цуга определяется шириной спектра угло-



вых направлений распространений поля, $L_c \approx \lambda / 2 (\sin \Delta\theta/2)^2 = \rho_z$. Величина ρ_z имеет смысл длины коррелированного пробега волнового возмущения. В общем случае длина продольной когерентности определяется и шириной спектра временных частот $\Delta\omega$ и шириной спектра угловых направлений $\Delta\theta$, $L_c^{-1} \approx l_c^{-1} + \rho_z^{-1}$ (Рябухо В. П., Лякин Д. В., Лычагов В. В. Длина продольной когерентности оптического поля // Оптика и спектроскопия. 2009. Т. 107, № 2. С. 296–301). При $l_c \ll \rho_z$ величина ρ_z приобретает смысл длины коррелированного пробега волнового цуга.

Вблизи протяженного пространственно некогерентного источника волновое поле имеет широкий спектр угловых направлений и поэтому длина волнового цуга равна ρ_z . В этой области пространства волновой цуг не распространяется как целое возмущение, а испытывает непрерывные декорреляционные изменения. С удалением от источника угловой спектр сужается, и волновое возмущение формируется в виде волнового цуга длиной l_c , который распространяется без декорреляционных изменений на расстояние ρ_z . В дальней области дифракции ρ_z с необходимостью стремится к бесконечности.

Пространственные и временные масштабы оптического поля имеют исключительно важное значение в теории многих прикладных направлений волновой оптики, в частности, в оптике рассеивающих сред, в голографии и оптической обработке информации, в оптических измерениях, включая оптическую низкокогерентную интерферометрию, микроскопию и томографию, активно развивающихся в настоящее время и имеющих важное прикладное значение.

В. И. Кочубей

КАК РАСПОЗНАТЬ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЮ

Вопрос, возникающий при регистрации излучения какого-либо образца: «Является ли данное излучение люминесценцией?» – не может быть однозначно решен, исходя лишь из результатов измерений серийным прибором и анализа определения люминесценции. Классические определения люминесценции, данные Вавиловым («Люминесценция представляет собой свечение, избыточное над тепловым излучением тела, если это избыточное излучение продолжается после прекращения возбуждения в течение времени, превышающего период световой волны ($t \cong 10\text{--}14$ с)»

и «Люминесценция – это собственное, неравновесное излучение возбужденных сложных частиц или образованных ими тел»), подразумевают возможность измерения времени затухания излучения на уровне 10^{-10} – 10^{-14} с. Такие измерения недоступны для серийных флуориметров, поэтому принятие решения может быть основано только на рассмотрении дополнительных данных, таких как понимание возможных физических процессов, вызывающих излучение в данном образце, представления о характерных для условий эксперимента диапазонах возможной люминесценции и теплового излучения, знание состава образца, как химического, так и структурного, возможность наличия полос рамановского рассеяния. Часть вопросов можно снять грамотной постановкой эксперимента специалистом-профессионалом в области исследования люминесценции. Но отсюда же следует и другой вывод: измерив спектральные характеристики излучения образца, определить, что это люминесценция, без дополнительных исследований невозможно.

В то же время существует ряд действий, которые должен выполнить оператор при исследовании излучения образца. Свойства образца характеризуются: спектром излучения, спектром возбуждения излучения (в случае фотолюминесценции), поляризационными характеристиками излучения и зависимостью его от температуры образца. Так как необходимо отделить возможную люминесценцию от теплового излучения, необходимо знать температуру образца – при температурах, сравнимых с комнатной, тепловое излучение в видимой и ультрафиолетовой областях спектра практически отсутствует. Для возникновения излучения необходимо передать образцу некоторую энергию. Наиболее часто встречающиеся виды регистрируемого при этом излучения, не являющегося люминесценцией – это обычное отражение или рассеяние возбуждающего излучения, а также параметрическое излучение и комбинационное рассеяние. Признаком первых двух эффектов является отсутствие спектрального сдвига люминесценции относительно длины волны возбуждающего света. Параметрическое излучение, в частности генерация второй гармоники возбуждающего света, – это нелинейный процесс, при котором мощность излучения нелинейно зависит от мощности возбуждения. Комбинационное рассеяние можно определить, слегка изменяя длину волны возбуждающего света. При этом спектр



комбинационного рассеяния смещается в ту же сторону, спектр люминесценции не изменяется. При помощи таких простых действий можно определить, что регистрируемое излучение является, скорее всего, люминесценцией. Однако и в этом случае возможны ошибки. Классическим примером является лазерная генерация красителя, возникающая за счет резонатора, образованного стенками кюветы. Таким образом, окончательный ответ возможен только при полном анализе свойств, структуры образца и условий эксперимента.

В. И. Цой, Л. А. Мельников

ПРИМЕНЕНИЕ ПРИНЦИПА СООТВЕТСТВИЯ В ОПТИКЕ

Классическим примером соответствия в оптике служит то, что комплексному коэффициенту Фурье электрического дипольного момента соответствует матричный элемент дипольного момента квантового перехода. Это соответствие позволяет существенно сокращать работу по проверке разноликих формул для вероятностей оптических переходов и сил осцилляторов.

Принцип соответствия полезен также для описания некоторых деталей картины распространения света. Одним из примеров является вращение плоскости поляризации в неплоском луче. Этот эффект почти не упоминается в учебниках и справочниках по общей физике, хотя важность знания о нем очевидна. Эффект был предсказан Рытовым путем решения уравнений Максвелла, но в то же время эффект можно описать наглядным способом, опираясь на принцип соответствия. В поле с лучевой структурой в окрестности каждой точки луча волну можно рассматривать как почти плоскую поперечную волну. Учитывая непрерывность тангенциальных полей, легко показать, что в криволинейном луче линейно поляризованное колебание сохраняет свою ориентацию по отношению к главной нормали и бинормали в каждой точке луча, если соприкасающаяся плоскость не испытывает поворотов вокруг луча. При кручении соприкасающейся плоскости вокруг луча плоскость поляризации поворачивается в сопутствующей лучу системе координат в противоположном направлении, в чем и состоит рытовское вращение.

Другим важным примером является локализация потока энергии с помощью вектора Пойнтинга. Типично представление о том, что в сво-

бодном пространстве световая энергия всегда распространяется по линиям вектора Пойнтинга, как при ламинарном течении жидкости. Но есть много случаев, когда вектору Пойнтинга нельзя придать столь ясного смысла. Например, при суперпозиции распространяющихся под углом друг к другу монохроматических волн с одной частотой, в зависимости от поляризации волн, могут появиться осциллирующие в пространстве составляющие вектора Пойнтинга, которым не соответствует какая-либо переносимая энергия. Этот парадокс снимается усреднением вектора Пойнтинга на участках с размерами, пропорциональными длине волны. Такие участки допустимо считать минимальным поперечником трубок, внутри которых локализованы потоки энергии. На тех пространственных масштабах, когда длиной волны можно пренебречь, трубки бесконечно тонки и возникает картина лучевого распространения по линиям вектора Пойнтинга в согласии с принципом соответствия.

Ю. М. Дуплинская

ФИЗИЧЕСКАЯ РЕАЛЬНОСТЬ И СТРУКТУРА ЯЗЫКА

Если задать вопрос: зависят ли представления о реальности, в том числе и «физической реальности», от грамматики нашего языка, то естественной реакцией, очевидно, будет недоумение: при чем тут вообще грамматика, если речь идет о физике? Но так можно думать лишь до тех пор, пока мы сравниваем мышление субъектов, говорящих на *грамматически соизмеримых* языках. Например, все европейские языки грамматически соизмеримы: везде имеются сходные части речи, подлежащее и сказуемое и т. д. Исследования американских лингвистов Э. Сепира и Б. Уорфа, изучавших мышление индейцев, языки которых *грамматически несоизмеримы* с европейскими, привели к выводу: интуиция «самоочевидного», как в логике, так и в естествознании, отражает не структуры реальности, а, всего-навсего, лингвистические структуры (см.: Сепир Э. Избранные труды по языкознанию и культурологии. М.: Издат. группа «Прогресс», 1993. 656 с.; Уорф Б. Отношение норм поведения и мышления к языку. Наука и языкознание. Лингвистика и логика // Новое в лингвистике. М., 1960. С. 135–198).

Как замечает Э. Сепир, любое правило осознается в качестве правила тогда и только тогда,



когда есть исключения. Если же у правила нет ни одного исключения, то его не считают за правило и вообще не осознают. Существуют некие правила нашего мышления, которые нами не осознаются, так как эти правила не имеют ни одного исключения. Осознать их может только лингвист, сравнивающий мышление людей, говорящих на грамматически несоизмеримых языках. Существует «неявная грамматика» – *криптотип* языка, которая состоит из правил, не имеющих в данном языке ни одного исключения. Криптотип – это система базовых классификаций языка, которые и составляют основу «интуитивно самоочевидного» в мышлении. Например, криптотип индоевропейской семьи языков содержит два главных класса слов: существительные, обозначающие предмет, и глаголы, обозначающие действия. Поэтому наше мышление разбивает реальность на предметы и действия; для нас это первичное и, так сказать, «естественное» разбиение реальности. Именно в этой грамматической интуиции укоренена наша физика, которая изучает «движение» «тел», то есть действие предметов.

А вот язык, к примеру, индейцев *хопи* основан на ином криптотипе. В этом языке нет ни существительных, ни глаголов; ни подлежащего, не сказуемого. Язык хопи состоит исключительно из *событий* и разбивает универсум на (1) события краткой длительности и (2) события, продолжающиеся долго. Поэтому человек, говорящий на хопи, не увидит в мире ни «предметов», ни их «действий». (А в самом деле, стоит задуматься: может быть, штампы нашего языка мешают нам заметить, насколько условным является разбиение реальности на «предметы» и «действия»?) Если бы народ, говорящий на хопи, создал свою физику, то в ней, считают Э. Сепир и Б. Уорф, не было бы понятий «тело», «действие», «вещество», «движение тела». В этой физике не было бы также понятия одновременности и вообще измеряемого времени, а значит, и таких понятий, как «скорость» и «ускорение». Проблематика времени как в европейской философии, так и в европейской науке обусловлена, опять же, особой грамматической интуицией. Нам кажется вполне естественным употребление *количественных числительных* по отношению к времени. Не происходит ли идея «измеряемого времени» в физике из таких естественных для европейца выражений, как «десять дней *больше*, чем девять дней»? Задумаем-

ся: а возможно ли вообще «измерение» времени и не абсурдно ли употребление категории *количества* по отношению к времени? Ведь, строго говоря, по отношению к времени применима только идея *порядка*, но не *количества*. На хопи, отмечают Сепир и Уорф, невозможно выражение «десять дней *больше*, чем девять дней», а только «десятый день *позже* девятого».

Физика, базирующаяся на грамматической интуиции хопи, считают Сепир и Уорф, выражала бы *чистые интенсивности*, помимо их пространственной и предметной проекции. Ни один из европейских языков не может выразить чистой интенсивности; мы воспринимаем интенсивность, только проецируя ее в пространство. Мы не замечаем метафоричности таких выражений, как «повышение интенсивности», «понижение интенсивности». А ведь интенсивность не может ни «повышаться», ни «понижаться», ни «увеличиваться», ни «уменьшаться»: все это пространственные метафоры. На этой скрытой метафоричности и основана наша физика. Таким образом, делается вывод, что ньютоновские понятия пространства и времени – «не суть данные реальности». Они заданы грамматикой языка; «именно из этого источника их взял Ньютон».

С. П. Позднева

УЧЕНИЕ О ЦВЕТЕ. ГЁТЕ КАК ФИЗИК-ОПТИК

В философской традиции цвет становился предметом рефлексии в связи с общими мировоззренческими размышлениями онтологического, гносеологического и эстетического характера (Платон, Аристотель, Демокрит и др.). В Средневековье и современной религиозной философии цвет рассматривается в рамках метафизики света как проявление метафизического, божественного света, который воплощается в природе (Я. Бёме, Я. Линдбланд, Е. Трубецкой, П. Флоренский и др.) В эпоху Возрождения мыслители обращаются к эстетически-выразительным характеристикам цвета (Леонардо да Винчи, Микеланджело и др.). В философии Нового времени цвет упоминается в связи с проблемой разделения «первичных» (объективных) и «вторичных» (субъективных) качеств материальных объектов (Ф. Бэкон, Дж. Локк, Т. Гоббс, Дж. Беркли, Д. Юм и др.).

В XVII в. в связи с развитием естественных наук феномен цвета переключался из философских трудов в лаборатории физиков. Чуть позже эста-



фету физиков приняли другие естествоиспытатели – физиологи, химики, биологи, математики... Согласно И. В. Гёте (см. : *Гёте И. В. Избранные сочинения по естествознанию*. М., 1957), мир представлен нам первоначально в качестве цветных плоскостей, из которых наш глаз вычленяет формы предметов. Для возникновения цвета, по убеждению Гёте, необходимы свет и тьма. Цвет, по существу, есть свет, модифицированный тьмой. В самой близости к свету возникает желтая модификация, непосредственно у тьмы — синяя. Гармоничное смещение обоих этих цветов образует зеленый. Но возможна также и интенсификация каждого из них в отдельности. Постепенно сгущаемые, они просвечивают красноватыми оттенками, превращаясь: синий – в фиолетовый, желтый – в оранжевый. Их соединение дает ярчайший и чистейший пурпур, который, по словам Гёте, «частично актуально, частично потенциально содержит в себе все остальные цвета».

По Гёте выходит, что именно в красном содержится то, что, по Ньютону, содержится в белом. Эти шесть цветов – синий, зеленый, фиолетовый, желтый, оранжевый и пурпурный – лежат в основании всего «Учения о цвете».

Мы можем с уверенностью сказать, что цвет очевиден, и он полностью ограничен чувственной сферой. Гёте никогда не начинает с теоретизирования, но приходит к нему одновременно с созерцанием: «Самое высокое было бы понять, что все фактическое есть уже теория: синева неба раскрывает нам основной закон хроматики (науки о цвете). Не нужно только ничего искать за феноменами. Они сами составляют учение». Гёте перифразирует это утверждение в своем ответе Шиллеру: «Я вижу идеи». Такова высшая точка соединения рационализма и эмпиризма, устраняющая крайности того и другого.

«То, что мы обнаруживаем в опыте, является большей частью лишь случаями, которые при некоторой внимательности могут быть подведены под общие эмпирические рубрики. С этого момента все постепенно подходит под более высокие правила и законы, которые, однако, открываются не рассудку через слова и гипотезы, а созерцанию опять-таки через феномены. Мы называем их первофеноменами, ибо в явлении нет ничего выше их». Такова общая формула Гёте.

Критика взглядов Ньютона у Гёте выходила за рамки естественно-научной проблематики и

вырастала до духовной культуры в целом; борьба за свет оказывалась борьбой за духовность, за оочеловеченное мировоззрение. Цвет был конкретным предлогом, речь же шла не о цвете, а о человеке.

Если Ньютона не интересует ничто, кроме математически-количественных характеристик – от 400 до 800 миллиардов колебаний частицы в секунду, то Гёте же интересует всё, вплоть до чувственно-моральных воздействий цвета. Цвет – это целый мир, включающий разнообразнейшую гамму переживаний. Он – живопись и математика, нравственность и эстетика, медицина и быт.

Цвет Ньютона не нуждается в глазе: ему совершенно безразлично, кто с ним имеет дело — дизайнер, полиграфист, водитель или текстильщик (не будем перебирать множество других факторов). Свет и тьму, мир красок вообще Ньютон принимал как нечто объективно существующее, не понимая, что их существование – результат зрительных способностей людей.

Гёте исходит именно из предметов чувственного созерцания, твердо зная, что в случае надобности они сами приведут его к «объектам понимающего рассудка». Он исследовал цвет, и цвет сам вывел его на понимание света. Свет оказался здесь не частицей и не волной, а своеобразным аналогом типа (абстракции) в мире цветовых явлений. Подобно типу, пронизывающему органический мир и своеобразно проявляющемуся в каждой отдельной спецификации, не сводясь к ней полностью, свет предстает как подвижное единство цветового многообразия, где каждый цвет специфически представляет (реализует) его через темную среду, никогда не совпадая с ним в полной мере. Свет поэтому, с одной стороны, видим непосредственно в цвете; с другой стороны, сам по себе он абсолютно незрим, хотя именно ему и обязано зрение своим существованием. В этом выводе весь Гёте: его взгляд художника и мыслителя на цвет оказывается шире и многограннее взгляда Ньютона.

Шопенгауэр вспоминает свой любопытный разговор с Гёте, где его угораздило доказывать великому эмпирику и реалисту тезис «Мир есть мое представление»: «Как! – сказал он мне, взглянув на меня своими глазами Юпитера. – Свет, по-вашему, существует лишь постольку, поскольку Вы его видите? Нет! Вас самих не было бы, если бы свет Вас не видел».



А. Г. Роках

ОДНОЦВЕТИЕ И МНОГОЦВЕТНОСТЬ У ИОСИФА БРОДСКОГО

Для начала заметим, что цвет и оптика – близкие родственники, а положить на цвет взгляды известного русско-американского поэта, лауреата Нобелевской премии интересно потому, что он, живя в России, в силу обстоятельств, в основном от него не зависящих, был мало известен соотечественникам. Но хорошая поэзия как явление культуры, в частности идеологии, живет дольше своего автора. Иногда гораздо дольше. Такие явления в истории культуры известны. Так, например, восточные идеологии – буддизм, даосизм, кришнаизм – лишь спустя два – три тысячелетия после своего возникновения стали известны западному миру. И здесь интерес к ним вспыхнул с новой силой, породив ассоциации, наводящие на размышление и в светской науке. Об этом пишет Ф. Капра в своей книге «Дао физики», проводя аналогии между выводами восточного мистицизма и современной физики. Еще раньше на это обстоятельство указал знаменитый физик Нильс Бор, с удивлением обнаруживший, что принцип дополнительности, предложенный им, был известен в китайской философии уже два тысячелетия.

Феномен Бродского, русского поэта, но как бы пришедшего к нам с Запада, тоже достоин рассмотрения. Прежде всего, Бродского надо читать. За совершенством формы хорошо угадывается мысль, способная вызвать ответную мысль и сделать читателя духовно богаче. Вот что он сам говорит о процессе творчества в Нобелевской лекции 1987 года: «Если искусство чему-то и учит (и художника в первую голову), то именно частности человеческого существования. Будучи наиболее древней – и наиболее буквальной – формой частного предпринимательства, оно вольно или невольно поощряет в человеке именно его ощущение индивидуальности, уникальности, отдельности, превращая его из общественного животного в личность». Можно уподобить процессуально этот процесс выделению одного цвета разложением белого света в спектр.

Приведем еще один пример высказываний Бродского о самом процессе творчества: «Пишущий стихотворение пишет его, прежде всего, потому, что стихотворение – колоссальный ускоритель

сознания, мышления, мироощущения. Испытав это ускорение единожды, человек уже не в состоянии отказаться от повторения этого опыта, он впадает в зависимость от этого процесса, как впадают в зависимость от наркотиков или алкоголя. Человек, находящийся в подобной зависимости от языка, я полагаю, и называется поэтом». Легко просматривается аналогия – зависимость от математики при решении физической задачи. Не случайно Р. Фейнман и называл математику языком физики.

Однако как же быть с многоязычной культурой, функцией которой не в меньшей степени является поэт? И снова мы сталкиваемся с характерным приемом в рассуждениях И. Бродского – выделением одного, в данном рассуждении наиболее характерного, луча из многоцветья. Можно и здесь привести параллель, но уже не с физикой, а с психологией. Говоря о влиянии коллективного бессознательного на процесс художественного творчества, известный психолог Карл Юнг уподобил его хвосту, «виляющему» собакой. А коллективное бессознательное особенно выпукло (оптический термин!) представлено в поэтическом языке.

Б. А. Медведев

ВМЕСТО ЗАКЛЮЧЕНИЯ : О КРЕАТИВНОМ АСПЕКТЕ ГУМАНИЗАЦИИ И ГУМАНИТАРИЗАЦИИ ОПТИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ

Если слово *творить* по Далю означает давать бытие, то креативность как способность творить в контексте выступления участников Круглого стола означает способность давать бытие мысли.

Креативность в онтологическом аспекте предполагает у исследователя:

способность к мышлению отдаленными аналогиями по Лейбницу;

способность к оперированию ассоциациями по сходству У. Джеймса;

нелинейность, аказуальность, парадоксальность и латеральность мышления;

чувство удивления и способность к импровизации;

детское восприятие, сохраняющее феномен расширяющегося сознания;

инстинктивное сомнение по поводу очевидных истин;



умение «учиться, одновременно разучиваясь» по Хайдеггеру;

метафоричность мышления и понимание того, что «прекрасное выше всякой логической категории» по А. Ф. Лосеву;

«поэтическое чутье, как критерий истины»
Эдгара По

и, наконец, согласие с представлением Пола Фейерабенда о том, что «не существует идеи, сколь бы устаревшей и абсурдной она ни была, которая не способна улучшить наше познание».