



ФИЗИКА

УДК 621.372.8.001.24

ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ РЕЗОНАТОРЫ: МЕТОД ИНТЕГРАЛЬНЫХ И ИНТЕГРОДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

М.В. Давидович

Саратовский государственный университет,
кафедра радиотехники и электродинамики
E-mail: DavidovichMV@info.sgu.ru

Рассмотрены объемные интегральные и интегродифференциальные уравнения, описывающие стационарные собственные моды открытых диэлектрических резонаторов, конкретизированные для цилиндрического случая. Предложены алгоритмы их решения. Численно итерационными методами исследованы собственные колебания $H_{01\delta}$ и H_{011} цилиндрического диэлектрического резонатора.

Dielectric Resonators: The Integral and Integrodifferential Equations Methods

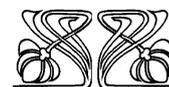
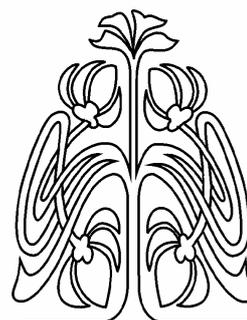
M.V. Davidovich

The volume integrodifferential and integral equations which are describing the stationary eigenmodes of open dielectric resonators have been considered and concretized for cylindrical case. The numerical algorithms for its solutions are proposed. The $H_{01\delta}$ and H_{011} eigen oscillations of cylindrical dielectric resonator have been numerically investigated using the iteration technique.

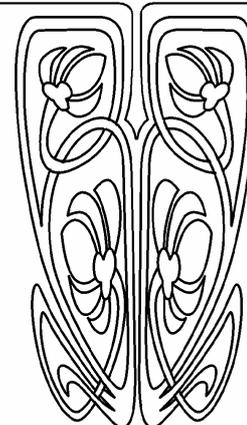
Введение

Методам анализа диэлектрических резонаторов (ДР) посвящено большое число работ (см., например, монографию [1] и приведенный в ней список литературы), при этом использовались различные методы: приближенные эвристические (например, метод магнитной стенки), теория возмущений (разложение по малому параметру) [2], метод частичных областей (МЧО), или сшивания, с получением поверхностных интегральных уравнений (ПИУ) [1], метод ПИУ [3], метод объемного интегрального уравнения (ОИУ) [4]. Из них строгими являются методы ПИУ и ОИУ, причем последний является наиболее универсальным, поскольку позволяет анализировать неоднородные ДР произвольной формы. Однако в литературе он достаточно полно не рассмотрен. В публикации [4] с помощью него анализируется мода $H_{01\delta}$ однородного цилиндрического диэлектрического резонатора (ЦДР), причем в конечном итоге используется теория возмущений. Из-за сложности определения коэффициентов разложения МЧО для ЦДР так и не был строго реализован, а был заменен приближенным подходом [1], не позволяющим определять радиационные добротности колебаний.

В работе рассмотрены ОИУ и объемно-поверхностные интегродифференциальные уравнения (ИДУ) для произвольных анизотропных и неоднородных ДР, конкретизированные и численно исследованные для ЦДР.



НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ





1. Интегральные и интегродифференциальные уравнения

Открытый диэлектрический резонатор в виде диэлектрического тела объема V с проницаемостью $\hat{\epsilon}(\vec{r})$, ограниченного замкнутой поверхностью S произвольной формы, описывается однородным объемным гиперсингулярным интегральным уравнением (ИУ)

$$\vec{E}(\vec{r}) = (\nabla \nabla \cdot + k^2) \times \int_V G(k, \vec{r} - \vec{r}') [\hat{\epsilon}(\vec{r}') - \hat{\mathcal{E}}] \vec{E}(\vec{r}') dV' \quad (1)$$

В уравнении (1) $k = \omega / c$, $G(k, \vec{r}) = (4\pi |\vec{r}|)^{-1} \exp(-jk|\vec{r}|)$, проницаемость $\hat{\epsilon}$ может, вообще говоря, зависеть от частоты и быть тензором, соответственно чему $\hat{\mathcal{E}}$ означает единичный тензор. Далее явные зависимости от частоты (волнового числа k) для скалярной функции Грина G , проницаемости и электрического поля \vec{E} будем для удобства опускать. Формальное внесение дифференциального оператора $\nabla \nabla \cdot \equiv grad \bullet div$, действующего в (1) на нештрихованные координаты (координаты точки наблюдения), под интеграл приводит к появлению в ядре сильной неинтегрируемой особенности типа $|\vec{r} - \vec{r}'|^{-3}$, что делает невозможным применение кусочно-постоянных функций (или квадратурных формул) для непосредственного численного решения. Получающийся интеграл в обычном смысле расходится, и правую часть (1) следует понимать в обобщенном смысле как распределение (обобщенную функцию) [5], а ИУ (1) можно трактовать как псевдоинтегральное. Операторы, соответствующие ИУ (1), называют также псевдодифференциальными [5–7].

ИУ (1) определяет комплексные волновые числа k (частоты колебаний) соответствующего ДР, при этом зависимость проницаемости от координат позволяет описывать большое разнообразие структур. Модификация ИУ (1) путем введения поверхностных электрических токов и объемного магнитного тока поляризации делает возможным учет металлических экранов и магнитных свойств ДР. В целях компактности изложения эти задачи здесь не рассматриваются. Если проницаемость однородна и может быть выне-

сена за знак интеграла, ИУ (1) существенно упрощается. Вместо ИУ (1) будем использовать эквивалентное ему интегродифференциальное уравнение (ИДУ) [8]:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \int_V \{k^2 G(\vec{r} - \vec{r}') [\hat{\epsilon}(\vec{r}') - \hat{\mathcal{E}}] \vec{E}(\vec{r}') + \nabla G(\vec{r} - \vec{r}') \nabla' \cdot [(\hat{\epsilon}(\vec{r}') - \hat{\mathcal{E}}) \vec{E}(\vec{r}')]\} dV' + \oint_S [\hat{\epsilon}(\vec{r}') - \hat{\mathcal{E}}] (\vec{\nu}'(\vec{r}') \vec{E}(\vec{r}')) \nabla' G(\vec{r} - \vec{r}') dS' \quad (2)$$

Термин ИДУ будем применять к уравнению, в котором на неизвестную функцию действуют как операторы интегрирования, так и операторы дифференцирования, причем ее производные могут находиться как под знаком интеграла, так и вне него. Последний случай сводится к первому формальным введением дельта-особенности в ядро. В [9] и в ряде других работ под ИДУ понимают уравнение типа (1), в котором дифференциальный оператор действует на интегральный оператор (интеграл). ИДУ (2) является сингулярным с интегрируемой особенностью. Его можно получить, используя, например, формулы Стреттона–Чу [9], или же непосредственно применяя векторные интегральные теоремы и перенося в (1) операции дифференцирования с ядра на подынтегральную функцию [8]. Поскольку нормальная компонента электрического поля имеет скачок на поверхности S , в поверхностном интеграле в формуле (2) следует взять ее внутреннее значение. Внешнее значение, соответствующее вакууму, будем обозначать символом «+», а внутреннее – соответственно как $\vec{E} \equiv \vec{E}^-$. Наличие скачка приводит к появлению на S поверхностной плотности связанного заряда $\hat{\sigma}(\vec{r}) = [\hat{\epsilon}(\vec{r}) - \hat{I}] E_{\vec{\nu}}^-(\vec{r})$, $\vec{r} \in S$. В случае скалярной проницаемости ИДУ (2) может быть преобразовано в объемно-поверхностное ИУ [4, 9]:

$$\vec{E}(\vec{r}) = \int_V \{k^2 G(\vec{r} - \vec{r}') [\epsilon(\vec{r}') - 1] \vec{E}(\vec{r}') - \epsilon^{-1}(\vec{r}') [\vec{E}(\vec{r}') \nabla' \epsilon(\vec{r}')] \nabla' G(\vec{r} - \vec{r}')\} dV' + \oint_S [\epsilon(\vec{r}') - 1] (\vec{\nu}'(\vec{r}') \vec{E}(\vec{r}')) \nabla' G(\vec{r} - \vec{r}') dS',$$

поскольку тогда в силу соленоидальности вектора $\epsilon(\vec{r}) \vec{E}(\vec{r})$ имеем



$$\nabla \cdot [(\varepsilon(\vec{r}) - 1)\vec{E}(\vec{r})] = -\nabla \cdot \vec{E}(\vec{r}) = \varepsilon^{-1}(\vec{r})\vec{E}(\vec{r})\nabla \varepsilon(\vec{r}).$$

В этом случае $\sigma(\vec{r}) = [\varepsilon(\vec{r}) - 1]E_v^-(\vec{r}) = E_v^+(\vec{r}) - E_v^-(\vec{r})$, т.е. поверхностная плотность заряда является скалярной величиной и выражается через скачок поля. Поверхностные интегралы в (2) и (3) появляются, если тело имеет резкую границу, т.е. функция $\varepsilon(\vec{r})$ на S разрывная и скачком уменьшается до единицы. Если же $\varepsilon(\vec{r})$ гладкая и плавно уменьшается до единицы в некотором внутреннем приповерхностном слое, то $E_v^+(\vec{r}) = E_v^-(\vec{r})$ и поверхностный интеграл не возникает, однако в указанном слое имеется объемная плотность заряда. Нетрудно показать, что в пределе при уменьшении толщины такого слоя до нуля объемный интеграл по нему эквивалентен поверхностному интегралу от получающегося скачка нормальной компоненты поля. Еще один подход к анализу ДР может быть основан на сингулярном ИУ, получаемом из (1) путем выделения особенности $G(0, \vec{r})$ в ФГ $G(k, \vec{r}) = G(0, \vec{r}) + \Delta G(k, \vec{r})$ и соответствующего ей внеинтегрального члена путем интегрирования по бесконечно малому шару, окружающему точку наблюдения. Такое ИУ не содержит поверхностных интегралов.

Далее будем рассматривать ИУ (3), поскольку оно описывает достаточно широкий класс краевых задач для ДР и имеет по сравнению с (1) ядро с пониженной максимальной особенностью типа производной потенциала простого слоя [10]. Если проницаемость является кусочно-постоянной величиной, то объем V (и соответственно интеграл) разбивается на подобласти, внутри которых $\nabla \varepsilon = 0$. При этом нормальная компонента поля приобретает скачки на границах раздела, и необходимо добавить к поверхностному интегралу соответствующие интегралы по двусторонним поверхностям раздела S^\pm . В этом случае ядро объемного интегрального оператора имеет слабую особенность типа

$|\vec{r} - \vec{r}'|^{-1}$. При нахождении точки наблюдения на поверхности особенность в поверхностном интеграле $\nabla' G$ является интегрируемой, если интеграл понимать в смысле главного значения. При этом интеграл от нее по участку, вырезаемому бесконечно малой сферой с центром в точке \vec{r} , равен нулю. Поэтому к ИУ (3) можно применять численные методы с использованием кусочно-постоянных объемных и поверхностных элементов (или соответствующие квадратурные формулы).

Рассмотрим цилиндрические ДР, для чего используем представление ФГ в цилиндрической системе координат [11]. Один из способов такого представления заключается в замене переменных $x = \rho \cos(\varphi)$, $y = \rho \sin(\varphi)$ в соответствующих декартовых представлениях, например,

$$G(\rho, \varphi, z | \rho', \varphi', z') = (4\pi R)^{-1} \exp(-jkR), \quad (4)$$

$$R = \left(\rho^2 + \rho'^2 - 2\rho\rho' \cos(\varphi - \varphi') + (z - z')^2 \right)^{1/2}.$$

Можно выполнить указанную замену и в других декартовых представлениях ФГ, описываемых приведенными в [11] соотношениями, например, в (2.8) и (2.14), или же использовать представление (2.15) (далее все аналогичные ссылки будут соответствовать указанной работе). Однако часто более удобно применять непосредственные представления ФГ в цилиндрической системе (формулы (2.17), (2.18), (2.20), (2.21) и (2.22)). Наличие нескольких видов представлений ФГ создает удобства при вычислении интегралов в матричных элементах, поскольку есть возможность выбрать наиболее подходящую формулу, для которой они вычисляются наиболее просто, а также позволяет решить задачу несколькими алгоритмами. При переходе в цилиндрическую систему координат вектор-потенциал \vec{A} и вектор \vec{E} преобразуются по формулам (2.63), при этом ИУ (3) приобретает вид



$$E_\rho(\rho, \varphi, z) = k^2 \int_V G(\bar{r} - \bar{r}') [\varepsilon(\bar{r}') - 1] \times \\ \times \{E_\rho(\bar{r}') \cos(\varphi - \varphi') + E_\varphi(\bar{r}') \sin(\varphi - \varphi')\} dV' - \\ - \int_V \left\{ \varepsilon^{-1}(\bar{r}') [\bar{E}(\bar{r}') \nabla' \varepsilon(\bar{r}')] \frac{\partial G(\bar{r} - \bar{r}')}{\partial \rho'} \right\} dV' + \\ + \oint_S [\varepsilon(\bar{r}') - 1] (\bar{v}'(\bar{r}') \bar{E}(\bar{r}')) \frac{\partial G(\bar{r} - \bar{r}')}{\partial \rho'} dS', \quad (5)$$

$$E_\varphi(\rho, \varphi, z) = k^2 \int_V G(\bar{r} - \bar{r}') [\varepsilon(\bar{r}') - 1] \times \\ \times \{E_\varphi(\bar{r}') \cos(\varphi - \varphi') - E_\rho(\bar{r}') \sin(\varphi - \varphi')\} dV' - \\ - \int_V \left\{ \varepsilon^{-1}(\bar{r}') [\bar{E}(\bar{r}') \nabla' \varepsilon(\bar{r}')] \frac{\partial G(\bar{r} - \bar{r}')}{\rho' \partial \varphi'} \right\} dV' + \\ + \oint_S [\varepsilon(\bar{r}') - 1] (\bar{v}'(\bar{r}') \bar{E}(\bar{r}')) \frac{\partial G(\bar{r} - \bar{r}')}{\rho' \partial \varphi'} dS', \quad (6)$$

$$E_z(\rho, \varphi, z) = \\ = k^2 \int_V G(\bar{r} - \bar{r}') [\varepsilon(\bar{r}') - 1] E_z(\bar{r}') dV' - \\ - \int_V \left\{ \varepsilon^{-1}(\bar{r}') [\bar{E}(\bar{r}') \nabla' \varepsilon(\bar{r}')] \frac{\partial G(\bar{r} - \bar{r}')}{\partial z'} \right\} dV' + \\ + \oint_S [\varepsilon(\bar{r}') - 1] (\bar{v}'(\bar{r}') \bar{E}(\bar{r}')) \frac{\partial G(\bar{r} - \bar{r}')}{\partial z'} dS'. \quad (7)$$

В связанных ИУ (5)–(7) для компактности записи использованы координаты \bar{r} и \bar{r}' , которые следует рассматривать в цилиндрической системе (например, как в (4)). Элемент объема имеет вид $dV' = \rho' d\rho' d\varphi' dz'$, а вид элемента поверхности dS' зависит от координаты точки на цилиндре.

В случае, если поле не зависит от координаты φ , указанные ФГ можно упростить, выполнив интегрирование по углу. Пусть, например, рассматриваются азимутально-симметричные H -колебания изотропного ЦДР радиуса r_0 и высоты h . Тогда отлична от нуля лишь E_φ -компонента, и ИУ (5)–(7) приобретает вид [4]

$$E_\varphi(\rho, z) = \\ = k^2 \int_{S_M} (\varepsilon(\rho', z') - 1) \bar{G}(\rho, z | \rho', z') \rho' d\rho' dz', \quad (8)$$

где S_M – меридианное сечение: $0 \leq \rho \leq r_0$, $|z| \leq h/2$, а ядро имеет представление

$$\bar{G}(\rho, z | \rho', z') = \\ = \int_0^{2\pi} \cos(\varphi - \varphi') G(\rho, \varphi, z | \rho', \varphi', z') d\varphi'. \quad (9)$$

ФГ (9) не зависит от φ и представляется также удвоенным интегралом типа (9) по области $(0, \pi)$. Действительно, сделаем в (9) замену переменных $\vartheta = \varphi' - \varphi$. Поскольку R и G периодичны по ϑ с периодом 2π , значение интеграла (9) по области $(-\varphi, 2\pi - \varphi)$ не зависит от значения φ . В [4] предложено вычислять ФГ (9), разлагая экспоненту в (4) в ряд и выражая рекуррентно получающиеся интегралы через эллиптические интегралы первого и второго рода. Но для ФГ (9) есть и другие представления, например, из (2.18) следует

$$\bar{G}(\rho, z | \rho', z') = \\ = \frac{1}{2} \int_0^\infty \frac{J_1(\chi\rho) J_1(\chi\rho') \exp(-\sqrt{\chi^2 - k^2} |z - z'|)}{\sqrt{\chi^2 - k^2}} \chi d\chi, \quad (10)$$

а из (2.22) соответственно получим

$$\bar{G}(\rho, z | \rho', z') = \\ = \frac{-j}{4} \int_0^\infty \left\{ H_1^{(2)}(\sqrt{k^2 - \gamma^2} \rho) J_1(\sqrt{k^2 - \gamma^2} \rho') \right\} \times \\ \times \exp(-j\gamma(z - z')) d\gamma. \quad (11)$$

В (11) верхнее значение в фигурной скобке надо брать при $\rho < \rho'$, а нижнее – при $\rho > \rho'$. Представления ФГ (9)–(11) удобны для анализа азимутально-симметричных $H_{0n\delta}$ и $E_{0n\delta}$ типов колебаний. Для гибридных $HE_{mn\delta}$ и $EH_{mn\delta}$ типов ФГ имеют вид (2.18) и (2.22), в суммах которых необходимо оставить только один азимутальный член $\exp(-jm(\varphi - \varphi'))$.

2. Понижение особенности методом непосредственного интегрирования

Рассмотрим другой метод получения ИУ с пониженной особенностью, заключающийся в интегрировании ИУ (1) по координатам точки наблюдения. Для простоты будем считать проницаемость скалярной величиной и константой. Согласно теореме Гельмгольца любой вектор однозначно мо-



жет быть представлен своей соленоидальной и потенциальной частями [12, 13], поэтому разобьем электрическое поле на соленоидальную и потенциальную части: $\vec{E} = \vec{E}_s + \vec{E}_p$, или

$$\vec{E}(\vec{r}) = \nabla \times \vec{C} - \nabla \Phi. \quad (12)$$

Далее индекс s означает соленоидальную, а p – потенциальную части векторов. Наша цель состоит в переформулировке ИУ (1) и эквивалентного ему ИУ (3) для величин \vec{C} и Φ . Поскольку \vec{E} – полярный вектор, то Φ – скаляр, а \vec{C} – аксиальный вектор (псевдовектор). Выбор этих величин неоднозначен, так как \vec{C} может быть дополнен градиентом произвольного псевдоскаляра Ψ , а потенциал Φ определен с точностью до произвольной константы c_0 . Для того чтобы исключить неоднозначность в выборе вектора \vec{C} , подчиним его условию $\nabla \cdot \vec{C} = 0$, т.е. будем считать его соленоидальным. Таким образом, введенные величины удовлетворяют соотношениям

$$\nabla \cdot \vec{E}(\vec{r}) = -\nabla^2 \Phi, \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{E}(\vec{r}) &= \nabla \times \nabla \times \vec{C} = \\ &= (\text{grad} \cdot \text{div} - \nabla^2) \vec{C} = -\nabla^2 \vec{C}. \end{aligned} \quad (14)$$

Далее следует подставить (12) в (3) и произвести разделение вихревых и потенциальных частей на два уравнения. В соотношении (3) сразу выделяем потенциальный вектор $\vec{E}_{0p}(\vec{r}) = -\nabla U$, где

$$\begin{aligned} U(\vec{r}) &= -\int_V G(\vec{r} - \vec{r}') \varepsilon^{-1} [\vec{E}(\vec{r}') \nabla' \varepsilon] d\vec{r}' + \\ &+ (\varepsilon - 1) \oint_S G(\vec{r} - \vec{r}') \vec{\nu}(\vec{r}') \vec{E}^-(\vec{r}') dS'. \end{aligned} \quad (15)$$

Функция U есть потенциал, созданный плотностью заряда поляризации. Для однородного диэлектрика объемный интеграл исчезает, поскольку объемной плотности заряда поляризации нет, и (15) представляет собой потенциал поверхностной плотности заряда σ (потенциал простого слоя). Рассмотрим оставшийся объемный интеграл, который преобразуем следующим образом:

$$\begin{aligned} k^2(\varepsilon - 1) \int_V G(\vec{r} - \vec{r}') [\nabla' \times \vec{C}(\vec{r}') - \nabla' \Phi(\vec{r}')] d\vec{r}' = \\ = k^2(\varepsilon - 1) \left\{ \oint_S G(\vec{r} - \vec{r}') \vec{\nu}(\vec{r}') \times \vec{C}(\vec{r}') dS' - \right. \\ \left. - \int_V \nabla' G(\vec{r} - \vec{r}') \times \vec{C}(\vec{r}') dV' - \right. \\ \left. - \oint_S \vec{\nu}(\vec{r}') G(\vec{r} - \vec{r}') \Phi(\vec{r}') dS' + \right. \\ \left. + \int_V \Phi(\vec{r}') \nabla' G(\vec{r} - \vec{r}') dV' \right\}. \end{aligned} \quad (16)$$

При выполнении данного преобразования были использованы теорема о роторе, теорема о градиенте и соотношения векторной алгебры для векторного оператора ∇' [13]. Возьмем дивергенцию от обеих частей (3). При $\vec{r} \notin S$ имеем $\nabla \cdot \vec{E}$, поэтому

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \oint_S G(\vec{r} - \vec{r}') \vec{\nu}(\vec{r}') \times \vec{C}(\vec{r}') dS' = \\ = \nabla \cdot \oint_S G(\vec{r} - \vec{r}') \vec{\nu}(\vec{r}') \Phi(\vec{r}') dS' = -\vec{\rho}(\vec{r}), \quad \vec{r} \notin S. \end{aligned}$$

На поверхности указанные величины терпят скачок. В частности, дивергенция второго интеграла равна нулю. Ротор от соотношения (16) в силу (3) совпадает с $\nabla \times \vec{E}$. Поверхностные интегралы разделим на соленоидальные и потенциальные части:

$$\begin{aligned} \oint_S G(\vec{r} - \vec{r}') \vec{\nu}(\vec{r}') \times \vec{C}(\vec{r}') dS' &= \vec{M}_s(\vec{r}) + \vec{M}_p(\vec{r}), \\ \oint_S G(\vec{r} - \vec{r}') \vec{\nu}(\vec{r}') \Phi(\vec{r}') dS' &= \vec{P}_s(\vec{r}) + \vec{P}_p(\vec{r}). \end{aligned}$$

Разделяя соленоидальные и потенциальные части в (3), получаем два уравнения:

$$\begin{aligned} \nabla \times \vec{C}(\vec{r}) &= k^2(\varepsilon - 1) \left\{ \vec{M}_s(\vec{r}) - \vec{P}_s(\vec{r}) + \right. \\ &\left. + \int_V \vec{C}(\vec{r}') \times \nabla' G(\vec{r} - \vec{r}') dV' \right\}, \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} -\nabla \Phi(\vec{r}) &= -k^2(\varepsilon - 1) \left\{ \vec{P}_p(\vec{r}) - \vec{M}_p(\vec{r}) + \right. \\ &\left. + \nabla \int_V \Phi(\vec{r}') G(\vec{r} - \vec{r}') dV' \right\} - \nabla U(\vec{r}). \end{aligned} \quad (18)$$

Общий интеграл последнего уравнения есть



$$\Phi(\vec{r}) = k^2(\epsilon - 1) \times \left\{ \Psi_0(\vec{r}) - \Phi_0(\vec{r}) + \int_V \Phi(\vec{r}') G(\vec{r} - \vec{r}') dV' \right\} + U(\vec{r}) + c_0, \quad (19)$$

где

$$\vec{P}_p(\vec{r}) = -\nabla\Phi_0(\vec{r}), \quad \vec{M}_p(\vec{r}) = -\nabla\Psi_0(\vec{r}). \quad (20)$$

Неизвестные потенциалы Φ_0 и Ψ_0 удовлетворяют уравнению Пуассона:

$$\nabla^2\Phi_0(\vec{r}) = -\nabla \cdot \oint_S \vec{v}(\vec{r}') G(\vec{r} - \vec{r}') \Phi(\vec{r}') dS' = \oint_S \Phi(\vec{r}') \vec{v}(\vec{r}') \nabla' G(\vec{r} - \vec{r}') dS' = -\vec{\rho}(\vec{r}), \quad (21)$$

$$-\nabla \cdot \oint_S G(\vec{r} - \vec{r}') \vec{v}(\vec{r}') \times \vec{C}(\vec{r}') dS' = -\vec{\rho}(\vec{r}) = \nabla^2\Psi_0(\vec{r}). \quad (22)$$

Решение этого уравнения методом Фурье (методом ФГ) имеет вид

$$\begin{pmatrix} \Phi_0(\vec{r}) \\ \Psi_0(\vec{r}) \end{pmatrix} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \int d\vec{r}' \frac{\vec{\rho}(\vec{r}') \exp(-j\vec{k}(\vec{r} - \vec{r}'))}{k^2}. \quad (23)$$

В (23) первые два интеграла берутся по бесконечной области пространства \vec{r}' и пространственной спектральной области $\vec{k} = \vec{x}_0 k_x + \vec{y}_0 k_y + \vec{z}_0 k_z$. Используя свернутый вид ФГ [11], можно (23) представить как

$$\Phi_0(\vec{r}) = \int d\vec{r}' G_0(\vec{r} - \vec{r}') \oint_S \Phi(\vec{r}'') \vec{v}(\vec{r}'') \nabla'' G(\vec{r}' - \vec{r}'') dS''. \quad (24)$$

Проинтегрируем далее уравнение (17):

$$\nabla \times \vec{C}(\vec{r}) = k^2(\epsilon - 1) \left\{ \vec{M}_s(\vec{r}) - \vec{P}_s(\vec{r}) + \int_V \vec{C}(\vec{r}') \times \nabla' G(\vec{r} - \vec{r}') dV' \right\},$$

$$\vec{C}(\vec{r}) = k_0^2(\epsilon - 1) \left\{ \vec{C}_1(\vec{r}) - \vec{C}_2(\vec{r}) + \vec{r}_3(\vec{r}) \right\}. \quad (25)$$

Здесь

$$\nabla \times \vec{C}_1(\vec{r}) = \vec{M}_s(\vec{r}), \quad \nabla \times \vec{C}_2(\vec{r}) = \vec{P}_s(\vec{r}), \quad (26)$$

$$\vec{C}_3(\vec{r}) = \int_V G(\vec{r} - \vec{r}') \vec{C}(\vec{r}') dV'. \quad (27)$$

Для удовлетворения вектором (25) условию $\nabla \cdot \vec{C} = 0$ достаточно потребовать, чтобы векторы \vec{C}_i ($i = 1, 2, 3$) были соленоидальными. Поэтому, взяв ротор от соотношений (26) и (27), получим, что эти неизвестные векторы должны также удовлетворять уравнениям Пуассона с правыми частями $-\vec{M}_s(\vec{r})$, $-\vec{P}_s(\vec{r})$ и $-\vec{N}(\vec{r})$ соответственно. Тогда выражения для этих векторов будут иметь форму (23), в которой для вектора \vec{C}_1 следует поверхностный интеграл из соотношения (21) заменить на ротор вектора \vec{M}_s , для вектора \vec{C}_2 – соответственно на ротор вектора \vec{P}_s , а для \vec{C}_3 – на ротор вектора (27).

В результате получены новые связанные ИУ (19) и (25). Связь осуществляется в силу того, что нормальная компонента поля на S (поверхностная плотность заряда $\sigma(\vec{r}) = (\epsilon - 1)E_v^-(\vec{r})$) в (15) и (19) определяется потенциальной и соленоидальной частями \vec{E} . При $k \rightarrow 0$ функция (19) определяет потенциал плотности заряда поляризации тела, который согласно принципам электростатики на бесконечности должен стремиться к нулю. Для этого необходимо положить $c_0 = 0$, при этом $\Phi(\vec{r}) = U(\vec{r})$. Полученные новые ОИУ являются связанными через поверхностные интегралы уравнениями Фредгольма второго рода с пониженной по сравнению с (1) сингулярностью ядер.

3. Поля в дальней зоне

Приведенные ИУ и ИДУ следует решать в объеме V резонатора, однако представления (1)–(3) справедливы во всем пространстве. В дальней зоне $\vec{r} \gg \vec{r}'$, поэтому производными в (1) можно пренебречь, а в (2) и (3) оставить член, пропорциональный $|\vec{r} - \vec{r}'|^{-1}$. Перейдем в сферическую систему координат, в которой скалярную ФГ можно представить в следующем виде: $G(\vec{r} - \vec{r}') \approx G(\vec{r}) e^{jkr' \cos(\psi)}$. Здесь как обычно $\cos(\psi) = \cos(\theta)\cos(\theta') +$



+ $\sin(\theta)\sin(\theta')\cos(\varphi - \varphi')$ – косинус угла между векторами \vec{r} и \vec{r}' . Обозначим \vec{E}_n и $\omega_n = \omega'_n + j\omega''_n$ затухающее во времени собственное поле и комплексную частоту моды с номером n , $\omega''_n > 0$. Тогда для собственной моды имеем

$$\vec{E}_n(\vec{r}) = \frac{\omega_n^2 \exp(-j\omega_n r/c)}{4\pi c^2} \vec{F}(\theta, \varphi). \quad (28)$$

Функция \vec{F} зависит от распределения электрического поля в объеме V и определяет диаграммы направленности излучения ДР для указанной моды [14]:

$$\vec{F}(\theta, \varphi) = \int_V e^{j\omega_n r' \cos(\psi)/c} [\mathcal{E}(\vec{r}') - \mathcal{F}]\vec{E}(\vec{r}')r'^2 \times \sin(\theta') dr' d\theta' d\varphi'.$$

Как видно, поля собственных мод (28) возрастают на бесконечности [15], что связано с экспоненциальным их убыванием во времени: более дальним расстояниям соответствуют более ранние моменты времени излучения (определяемые запаздыванием r/c), когда энергия колебаний в объеме V была экспоненциально больше. Модуль функции (28) имеет минимум в точке $r_n = c/\omega''_n$. Если эта точка соответствует дальней зоне, то в заданном направлении внутри V поле может иметь колебательный характер, затем по мере удаления от ДР его модуль убывает до указанного радиуса, а затем начинает возрастать. Для высокочастотных колебаний $r_n \gg a$, что оправдывает приближенный метод вычисления действительных собственных частот [1] путем замены полей (28) на убывающие.

4. Численные алгоритмы и результаты

В общем виде все колебания ДР определяются ИДУ (2). Для изотропного диэлектрика можно также использовать ИУ (3), которое для ЦДР имеет вид (5)–(7). Последние уравнения описывают все типы колебаний в изотропном случае. Для однородного ЦДР $\nabla \mathcal{E} = 0$, поэтому вторые объемные интегралы в этих соотношениях исчезают, а перед первыми получаем спектральный параметр $k^2(\mathcal{E} - 1)$. ИУ (5)–(7) можно решить

численно, используя, например, метод обобщенных взвешенных невязок [16] и вытекающие из него методы: Ритца, Трефтца, моментов, Галеркина, коллокаций. В силу комплексности скалярной ФГ спектральный параметр становится комплексным даже в отсутствие потерь в диэлектрике. Общее численное решение спектральной задачи хотя и является строгим и универсальным, но требует нахождения комплексных корней $\omega_n = \omega'_n + j\omega''_n$ характеристического уравнения, обычно представляющего собой определитель с матричными элементами в виде несобственных интегралов в спектральной пространственной области от трансцендентных специальных функций. Необходимость приближенного численного вычисления матричных элементов, усечение бесконечного определителя, ошибки округления при его численном вычислении, приближенное определение его корней может приводить к большим погрешностям, особенно при определении резонансных частот колебаний высших типов. Поэтому целесообразно использовать методы разложения интегрального оператора по малым параметрам. Пусть ДР характеризуется некоторым размером a . В качестве такового могут служить максимальный радиус ЦДР (при этом предположим, что его высота h меньше a). Тогда для низших мод при больших \mathcal{E} малым безразмерным спектральным параметром будет $\kappa = ka = 2\pi a/\lambda$ (поскольку $\lambda \mathcal{E}^{-1/2} \sim a$). Исходным для построения основанных на этом численных методов служит разложение экспоненты в ФГ (4) в ряд:

$$G(\vec{r} - \vec{r}') = \sum_{n=0}^{\infty} (-jk)^n G_n(R) = \frac{1}{4\pi R} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-jkR)^n}{n!}. \quad (29)$$

Ограничимся N членами такого разложения. В силу равномерной непрерывности (29) в V можно ИУ (3) представить в операторном виде

$$\vec{E} = k^2 \sum_{n=0}^N (-jk)^n \mathcal{K}_n \vec{E} - \sum_{n=0}^N (-jk)^n \mathcal{E}_n \vec{E} + \sum_{n=0}^N (-jk)^n \mathcal{S}_n \vec{E}, \quad (30)$$



где входящие в (30) линейные интегральные операторы выражаются так:

$$\hat{K}_n \vec{E} = \frac{1}{4\pi n!} \int_V R^{n-1} (\vec{r} - \vec{r}') [\varepsilon(\vec{r}') - 1] \vec{E}(\vec{r}') dV',$$

$$\mathcal{K}_n \vec{E} = \frac{1}{4\pi n!} \int_V \varepsilon^{-1}(\vec{r}') [\vec{E}(\vec{r}') \nabla' \varepsilon(\vec{r}')] \times \nabla' R^{n-1} (\vec{r} - \vec{r}') dV',$$

$$\mathcal{S}_n \vec{E} = \frac{1}{4\pi n!} \oint_S [\varepsilon(\vec{r}') - 1] (\vec{v}'(\vec{r}') \vec{E}(\vec{r}') \times \nabla' R^{n-1} (\vec{r} - \vec{r}') dS'.$$

Введем скалярное произведение в пространстве искомого решения:

$$(\vec{u}, \vec{v}) = \int_V \vec{u}^* (\vec{r}) \vec{v}(\vec{r}) dV.$$

Тогда согласно методу обобщенных взвешенных невязок [16] исходная краевая задача эквивалентна отысканию нулевых стационарных значений ($E = 0$) функционала

$$E = \left(\vec{E}, \vec{E} \right) - k^2 \sum_{n=0}^N (-jk)^n \left(\vec{E}, \mathcal{K}_n \vec{E} \right) + \sum_{n=0}^N (-jk)^n \left(\vec{E}, \mathcal{K}_n \vec{E} \right) - \sum_{n=0}^N (-jk)^n \left(\vec{E}, \mathcal{S}_n \vec{E} \right). \quad (31)$$

В силу структуры разложения (29) соотношение (31) является разложением по малому параметру ka . В случае метода Галеркина $\vec{E} = \vec{E}$, и функционал становится квадратичным. Рассмотрим низшие порядки по волновому числу k . При $N=0$ будем иметь

$$k^2 = \frac{(\vec{E}, \vec{E}) + (\vec{E}, \hat{L}_0 \vec{E}) - (\vec{E}, \hat{S}_0 \vec{E})}{(\vec{E}, \hat{K}_0 \vec{E})}. \quad (32)$$

Соотношение (32) можно рассматривать как функционал для определения собственных частот в нулевом приближении. В этом приближении частоты действительные. В работе [4] предложено использовать соответствующие (32) собственные функции для вычисления высших порядков. Однако это не облегчает задачу, поскольку аналитически они не известны. Члены $(\vec{E}, \mathcal{S}_n \vec{E})$ с поверхностными и объемными интегралами исчезают только для азимутально-симметричных H -колеба-

ний, а члены $(\vec{E}, \mathcal{K}_n \vec{E})$ – в случае кусочно-постоянной проницаемости. Наличие поверхностного интеграла свидетельствует о связанной плотности поверхностного заряда, возникающей из-за поляризации диэлектрика. Для высокочастотных колебаний этот интеграл должен либо отсутствовать, либо быть малым, поскольку излучение главным образом связано с соответствующим ему дипольным током поляризации. Разложим поле по полной ортонормированной в V системе векторных функций (в качестве таковых можно взять, например, объемные кусочно-постоянные векторные конечные элементы (КЭ)):

$$\vec{E}(\vec{r}) = \sum_{m=1}^M E_m \vec{e}_m(\vec{r}). \quad (33)$$

В случае объемных КЭ в каждом элементе имеется три вектора с тремя ортогональными поляризациями, поэтому число разбиений объема V равно $M/3$. Разложение (33) приводит к уравнению в виде равенства нулю определителя размерности $M \times M$, в каждом матричном элементе которого имеется член k^{N+2} максимальной степени. Таким образом, характеристическое уравнение представляет собой полином по k степени $M(N+2)$ с действительными и мнимыми коэффициентами, который можно записать как

$$D(k) = D_0 - jkD_1 - k^2D_2 + jk^3D_3 + k^4D_4 - \dots - j^{MN} k^{M(N+2)} D_{M(N+2)} = \det(A_{mm}) = 0. \quad (34)$$

Здесь введены безразмерные матричные элементы, которые имеют вид

$$A_{mm'} = \delta_{mm'} + \sum_{n=0}^N (-jk)^{n+2} e_{mm'}^{(n)} + \sum_{n=0}^N (-jk)^n C_{mm'}^{(n)} = \sum_{n=0}^{N+2} (-jk)^n d_{mm'}^{(n)},$$

$$e_{mm'}^{(n)} = a^{-(n+2)} (\vec{e}_m, \mathcal{K}_n \vec{e}_{m'}),$$

$$C_{mm'}^{(n)} = a^{-n} \left\{ (\vec{e}_m, \mathcal{K}_n \vec{e}_{m'}) - (\vec{e}_m, \mathcal{S}_n \vec{e}_{m'}) \right\},$$

при этом $d_{mm'}^{(n)} = \delta_{mm'} \delta_{n0} + C_{mm'}^{(n)}$ для $n < 2$, $d_{mm'}^{(n)} = e_{mm'}^{(n-2)} + C_{mm'}^{(n)}$ для $2 \leq n \leq N$ и



$d_{mm'}^{(n)} = e_{mm'}^{(n-2)}$ при $n > N$. Входящие в (34) коэффициенты выражаются через определители, в которых учтены только матричные элементы, дающие указанную степень спектрального параметра. Например,

$$D_0 = \det(d_{mm'}^{(0)}), \quad D_{M(N+2)} = \det(d_{mm'}^{(N+2)}).$$

Нахождение корней полинома является более простой задачей, нежели поиск комплексных корней определителя с матричными элементами в виде интегралов от трансцендентных функций спектрального параметра. Однако порядок многочлена (34) может быть очень большим, поэтому для его уменьшения необходимо согласовывать параметры N и M . Если необходимо найти первые K собственных значений, то целесообразно выбрать $K = N = M$. Если же для некоторой моды из физических соображений приближенно известна собственная функция \bar{E} , то уравнение (31) приобретает вид полнома $D(k) = E = 0$, где величина E (31) определена при $\bar{E} = \bar{E}$. Ограничившись $N = 2$, получим уравнение четвертой степени, решение которого известно аналитически.

Рассмотрим другой подход, основанный на асимптотическом [17] разложении ФГ типа (9) по малому параметру ka . Для колебаний с азимутальным индексом m скалярную ФГ можно записать так:

$$G(\rho, \rho', \varphi - \varphi', z - z') = \frac{\exp(-jm(\varphi - \varphi'))}{4\pi} \times \left\{ -jG^{(1)}(\rho, \rho', z - z') + G^{(2)}(\rho, \rho', z - z') \right\}. \quad (35)$$

Здесь первая функция комплексная и имеет вид

$$G^{(1)}(\rho, \rho', z - z') = \int_0^k \frac{J_m(\chi\rho)J_m(\chi\rho') \exp(-j\sqrt{k^2 - \chi^2}|z - z'|)}{\sqrt{k^2 - \chi^2}} \chi d\chi, \quad (36)$$

а вторая – действительная и представляется интегралом

$$G^{(2)}(\rho, \rho', z - z') = \int_k^\infty \frac{J_m(\chi\rho)J_m(\chi\rho') \exp(-\sqrt{\chi^2 - k^2}|z - z'|)}{\sqrt{\chi^2 - k^2}} \chi d\chi. \quad (37)$$

В интеграле (36) сделаем замену $\chi = k\alpha$, а в интеграле (37) разложим квадратные корни по малому параметру $(k/\chi)^2 < 1$:

$$(\chi^2 - k^2)^{-1/2} = \chi^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!} (k/\chi)^{2n},$$

$$(\chi^2 - k^2)^{1/2} = \chi \left\{ 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n-3)!!}{(2n)!!} (k/\chi)^{2n} \right\}. \quad (38)$$

Поскольку ряды (38) сходятся неравномерно, соответствующие разложения следует трактовать как асимптотические [17]. Первая функция приобретает вид

$$G^{(1)}(\rho, \rho', z - z') = k \int_0^1 J_m(k\alpha\rho)J_m(k\alpha\rho') \times \frac{\left\{ \cos(k\sqrt{1-\alpha^2}(z-z')) - j \sin(k\sqrt{1-\alpha^2}|z-z'|) \right\}}{\sqrt{1-\alpha^2}} \alpha d\alpha$$

и при $k \rightarrow 0$ стремится к нулю, как k^{2m+1} . Ее разложение по параметру k дается разложением в ряды функций Бесселя и тригонометрических функций. Оставляя члены не более второго порядка (что дает четвертый порядок по k), получим:

$$G^{(1)} \approx \frac{k^{2m+1} \rho \rho'}{2^{2m}} \int_0^1 \left\{ \frac{\alpha^{2m+1}}{(m!)^2 \sqrt{1-\alpha^2}} - \frac{k^2 \alpha^{2m+3}}{\sqrt{1-\alpha^2}} \times \left[\frac{(\rho^2 + \rho'^2)}{4(m+1)!} + \frac{((1-\alpha^2)(z-z')^2)}{2(m!)^2} \right] - \frac{jk\alpha^{2m+1}|z-z'|}{(m!)^2} \right\} d\alpha.$$

Вторая функция выражается в форме

$$G^{(2)} = \sum_{n=0}^N \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!} \int_k^\infty J_m(\chi\rho)J_m(\chi\rho') e^{-\chi|z-z'|} \times \left\{ \frac{k^{2n}}{\chi^{2n}} + \left(\frac{k^{2n+2}}{2\chi^{2n+1}} + \frac{k^{2n+4}}{8\chi^{2n+3}} + \dots \right) |z-z'| + \dots \right\} d\chi.$$

Входящие в нее интегралы последовательным интегрированием по частям разлагаются



в ряд по параметру k . Например, после однократного интегрирования

$$I_{mn} = k^n \int_k^\infty \chi^{-n} J_m(\chi\rho) J_m(\chi\rho') e^{-\chi|z-z'|} d\chi =$$

$$= \frac{k}{n-1} J_m(k\rho) J_m(k\rho') e^{-k|z-z'|} -$$

$$- k^n \int_k^\infty \frac{\chi^{1-n}}{1-n} [J_m(\chi\rho) J_m(\chi\rho') e^{-\chi|z-z'|}] d\chi.$$

Однако такая процедура неудобна. Поэтому сделаем в (18) замену $\alpha = \sqrt{\chi^2 - k^2}$ и разложим $G^{(2)}$ в ряд Тейлора в окрестности нуля по параметру k^2 :

$$G^{(2)} = \int_0^\infty J_m(\rho\sqrt{\alpha^2 + k^2}) J_m(\rho'\sqrt{\alpha^2 + k^2}) \times$$

$$\times \exp(-\alpha|z-z'|) d\alpha = G_0^{(2)} + k^2 G_2^{(2)} + k^4 G_4^{(2)} + \dots$$

Здесь первые два члена имеют вид

$$G_0^{(2)} = \int_0^\infty J_m(\rho\alpha) J_m(\rho'\alpha) \exp(-\alpha|z-z'|) d\alpha,$$

$$G_2^{(2)} = \frac{1}{2} \int_0^\infty \alpha^{-1} \{ \rho J'_m(\rho\alpha) J_m(\rho'\alpha) +$$

$$+ \rho' J'_m(\rho'\alpha) J_m(\rho\alpha) \} \exp(-\alpha|z-z'|) d\alpha.$$

Рассмотренные ряды являются асимптотическими, и их необходимо обрывать при достижении заданной точности [17].

Очень удобными для численного анализа ДР являются итерационные методы одновременного решения ИУ (ИДУ) и характеристического уравнения. На рис. 1–5 в качестве примера приведены результаты анализа $H_{01\delta}$ и H_{011} мод однородного и неоднородного ЦДР. Использованы метод прямой итерации в форме метода последовательных приближений (МПП) и метод минимальных невязок (ММН) с замораживанием значений ФГ от спектрального параметра на предыдущем шаге, примененные к ИУ и строгому характеристическому уравнению. Были использованы одномерные кусочно-постоянные и дифференцируемые (в виде полиномов второго порядка) КЭ, заданные по трем узлам [18]. Оба метода сходятся к одним и тем же результатам за несколько итераций по параметру k .

Объемные (двумерные) КЭ строились в виде прямого произведения одномерных КЭ. На каждой итерации по параметру k вычислялась зависящая от него матрица и выполнялось несколько (или несколько десятков) итераций для получения решения ИУ в виде собственной функции с нормировкой на единицу. Рис. 1 демонстрирует сходимость в за-

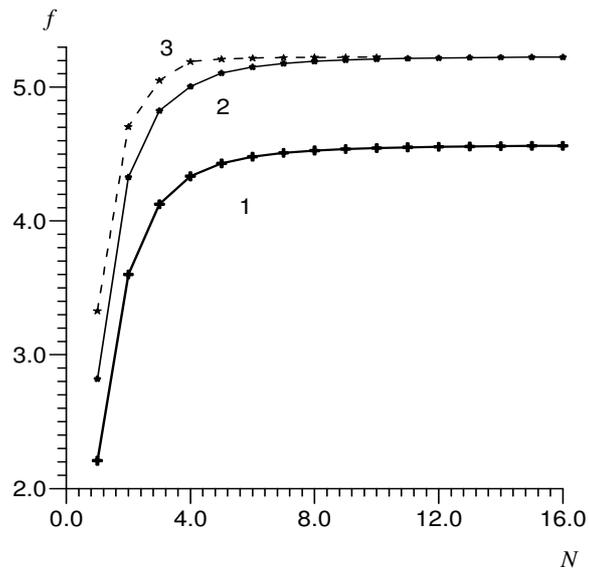


Рис. 1. Сходимость результатов для собственных частот f (ГГц) ЦДР от числа базисных функций N при кусочно-постоянной (1, 2) и полиномиальной квадратичной (3) аппроксимациях для $\epsilon = 38$, $r_0 = 5$ мм: $h = 7$ мм (1); $h = 4$ мм (2, 3)

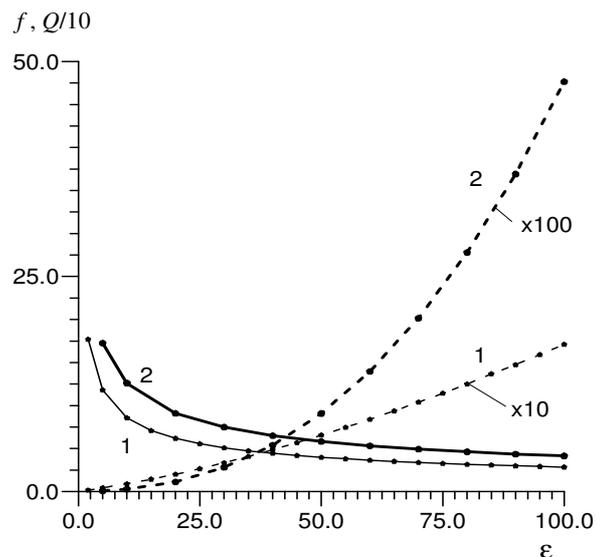


Рис. 2. Зависимости резонансной частоты f (ГГц) и добротности Q однородного ЦДР $r_0 = 5$ мм, $h = 7$ мм от значения диэлектрической проницаемости: 1 – мода $H_{01\delta}$, 2 – мода H_{011}

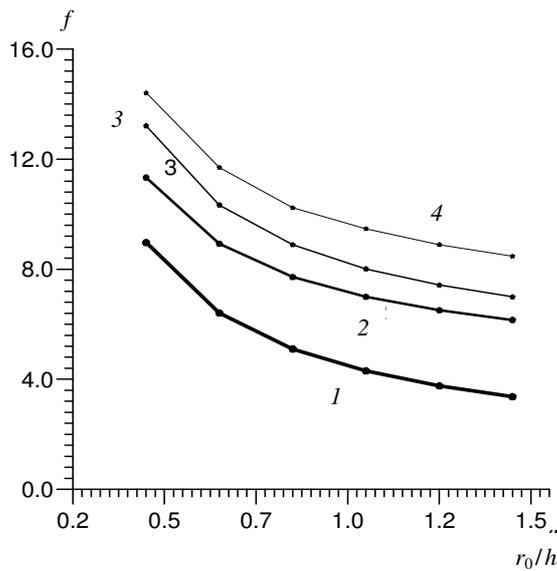


Рис. 3. Зависимость резонансной частоты f (ГГц) от формы ЦДР для однородного (1, 2) диэлектрика с $\epsilon = 50$ и неоднородного вдоль оси z диэлектрика (3, 4) для $h = 5$ мм: 1 – мода $H_{01\delta}$; 2, 3, 4 – мода H_{011}

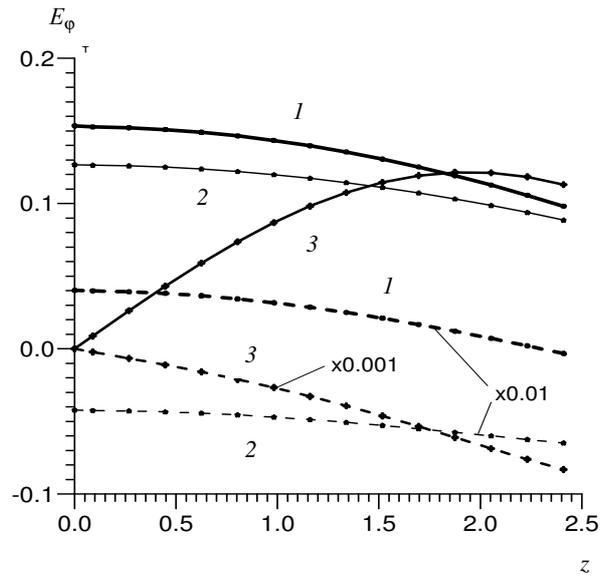


Рис. 5. Зависимость $\text{Re}(E_\varphi)$ (сплошные кривые) и $\text{Im}(E_\varphi)$ (штриховые кривые) от координаты z (мм) для ЦДР $\epsilon = 100$, $r_0 = h = 5$ мм: 1, 2 – мода $H_{01\delta}$ при $\rho = 3, 4$ и $\rho = 1.66$ мм; 2 – мода H_{011} при $\rho = 4.46$ мм

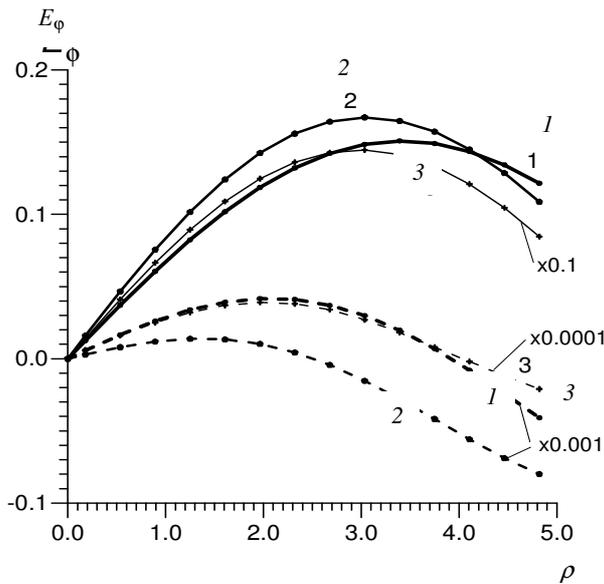


Рис. 4. Зависимость $\text{Re}(E_\varphi)$ (сплошные кривые) и $\text{Im}(E_\varphi)$ (штриховые кривые) от координаты ρ (см) для ЦДР $\epsilon = 100$, $r_0 = h = 5$ мм: 1 – мода $H_{01\delta}$ при $z = 0.09$; 2 – мода H_{011} при $z = 2.41$; 3 – мода H_{011} при $z = 0.09$

висимости от числа разбиений (узлов) по каждой из двух координат. Число пробных функций (порядок матрицы) здесь N^2 . При использовании гладких КЭ размерность задачи снижается примерно в 4 раза. Результаты для собственных частот примерно на 1–1.5% ниже, чем данные из [4]. В частности,

для кривых (2, 3) уточнение по методу Эйткена дает $f = 5.237524$ ГГц, тогда как в [4] $f = 5.289$ ГГц. С другой стороны, решение самосопряженной задачи с линейным вхождением собственного значения k^{-2} (т.е. для ФГ при $k = 0$) рассмотренными методами дает значения, практически совпадающие с [4]. На рис. 2 представлены резонансные частоты и добротности однородного ЦДР как функции диэлектрической проницаемости. Частоты H_{011} колебаний при рассмотренной форме ДР примерно в полтора раза, а добротности – на порядок выше, чем для низшего типа $H_{01\delta}$ колебаний, поскольку в первом случае Q связана с магнитно-дипольным излучением, в во втором – с магнитно-квадрупольным. Рис. 3 представляет зависимость резонансной частоты от формы однородного и неоднородного вдоль оси z диэлектрика. Кривая 3 соответствует неоднородному диэлектрику с проницаемостью $\epsilon(z) = 25(1 + \cos(\pi z/h))$, а кривая 4 – проницаемости $\epsilon(z) = 1 + 49 \cos(\pi z/h)$. В последнем случае при $z = \pm h/2$ отсутствует скачок ϵ . На рис. 4 и 5 приведены распределения электрического поля E_φ в зависимости от координат ρ и z . Для обеих мод по обеим координатам обра-



зуются неполные стоячие полуволны. Действительные составляющие поля существенно больше мнимых составляющих, при этом отношение их порядка Q .

Заключение

Получены ИУ и ИДУ, описывающие собственные колебания ДР произвольной формы, которые конкретизированы для ЦДР. Предложен метод асимптотического разложения ядра по малому параметру, позволяющий получать характеристическое уравнение в виде полинома по спектральному параметру. Предложены и реализованы для ЦДР эффективные итерационные алгоритмы решения задач на собственные значения. Задачи о возбуждении ДР следует формулировать добавлением к полученным уравнениям неоднородных членов, соответствующих возбуждающему полю. В реальных конструкциях ДР расположен на элементах крепления, поэтому важно учитывать наличие металлических тел. Обобщение приведенных уравнений при наличии бесконечного идеально проводящего экрана получается методом изображений для скалярной ФГ, что, в частности, использовано для моды H_{011} . Для двух параллельных экранов необходимо уже учитывать бесконечное число изображений. ДР в прямоугольном волноводе и в прямоугольном экране можно проанализировать с помощью метода двумерных и трехмерных изображений [19, 20]. Соответствующие ряды для ФГ хорошо сходятся. Наличие произвольных экранов или металлических тел требует введения члена в виде поверхностного интеграла от искомого распределения поверхностной плотности тока, что может существенно усложнить анализ, поскольку требует решения комбинированного поверхностно-объемного ИУ для распределения поля и тока. Тем не менее рассмотренные методы представляются более общими и перспективными для численных расчетов, чем МЧО и связанный с ним метод ПИУ, поскольку последние применимы только к ДР с координатными поверхностями, а метод ПИУ [3] – к однородным ДР.

Библиографический список

1. Ильченко М.Е., Взятыйшев В.Ф., Гассанов Л.Г., Безбородов Ю.М., Бергер М.Н., Добромыслов В.С., Капилович Б.Ю., Нарытник Г.Н., Федоров В.Б., Черный Б.С. Диэлектрические резонаторы. М.: Радио и связь, 1989. 328 с.
2. Van Bladel J. On the resonances of dielectric resonator of very high permittivity // IEEE Trans. Vol.MTT-23, №2. P.199–208.
3. Васильев Е.Н. Возбуждение тел вращения. М.: Радио и связь, 1987. 272 с.
4. Гольдберг Л.Б., Пензяков В.В. Расчет аксиально-симметричных H -колебаний в диэлектрических резонаторах методом интегральных уравнений // РЭ. 1982. Т.27, №9. С.1735–1740.
5. Эскин Г.Э. Краевые задачи для эллиптических псевдодифференциальных уравнений. М.: Наука. 1973. 232 с.
6. Тейлор М. Псевдодифференциальные операторы. М.: Мир, 1985. 472 с.
7. Ильинский А.С., Смирнов Ю.Г. Дифракция электромагнитных волн на проводящих экранах (псевдодифференциальные операторы в задачах дифракции). М.: ИПРЖР, 1996. 176 с.
8. Davidovich M.V. Regularization of kernels for volume integral equations // Modeling in applied electromagnetics and electronics. Saratov: Saratov University Press, 2006. Iss.7. P.30–38.
9. Вычислительные методы в электродинамике / Под ред. Р. Миттры. М.: Мир, 1977. 486 с.
10. Гюнтер Н.М. Теория потенциала и ее применения к основным задачам математической физики. М.: ГИТТЛ, 1953. 416 с.
11. Марков Г.Т., Чаплин А.Ф. Возбуждение электромагнитных волн. М.: Радио и связь, 1983. 296 с.
12. Дао Л.Ц. Математические методы в физике. М.: Мир, 1965. 296 с.
13. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М.: Наука, 1973. 832 с.
14. Гольдштейн Л.Д., Зернов Н.В. Электромагнитные волны. М.: Сов. радио, 1971. 664 с.
15. Вайнштейн Л.А. Открытые резонаторы и открытые волноводы. М.: Сов. радио, 1966. 476 с.
16. Бреббия К., Теллес Ж., Вроубел Л. Методы граничных элементов. М.: Мир, 1987. 524 с.
17. Олвер Ф. Асимптотика и специальные функции. М.: Наука, 1990. 528 с.
18. Давидович М.В. Метод конечных элементов в пространственно-временной области для нестационарной электродинамики // ЖТФ. 2006. Т.76, вып.1. С.13–23.
19. Давидович М.В. К нестационарной теории возбуждения резонатора // РЭ. 2001. Т.46, №10. С.1198–1205.
20. Давидович М.В. К нестационарной теории возбуждения волноводов // Там же. №11. С.1285–1292.

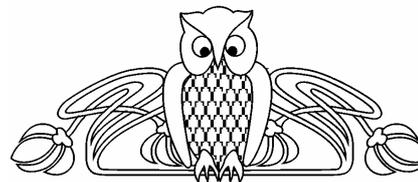


УДК 612.841.5:532.72:51

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДИФFUЗИИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ И ИММЕРСИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ В ТКАНЯХ ГЛАЗА ЧЕЛОВЕКА

М.М. Стольниц, А.Н. Башкатов, Э.А. Генина, В.В. Тучин

Саратовский государственный университет,
кафедра оптики и биомедицинской физики
E-mail: StolnizMM@info.sgu.ru



Представлена математическая модель, описывающая диффузию лекарственных препаратов и иммерсионных жидкостей в тканях глаза человека. Получены аналитические выражения для распределения концентрации диффундирующей жидкости, хорошо аппроксимирующие точное решение на малых или на больших временах.

Mathematical Model of Drags and Immersion Liquids Diffusion in Human Ocular Tissues

M.M. Stolnitz, A.N. Bashkatov, E.A. Genina, V.V. Tuchin

Mathematical model of drags and immersion liquids diffusion in human ocular tissues is presented. Analytic expressions are derived for diffusing liquid concentration, which give good approximations for exact solution at small or large time.

Введение

Развитие методов диагностики и терапии различных офтальмологических заболеваний требует разработки математических моделей, описывающих транспорт лекарственных препаратов и иммерсионных агентов в биологических тканях, как при поверхностном, так и при интритканевом их введении.

В настоящее время существенный прогресс в разработке данных моделей достигнут, например, в области дерматологии [1–4]. В то же время анализ литературы показывает, что разработка математических моделей, адекватно описывающих транспорт лекарственных препаратов при их транссклеральном введении, еще далека от завершения.

Другой важной проблемой оптики биотканей является проблема транспорта оптического излучения через фиброзные ткани человеческого тела. Сильное светорассеяние приводит к существенным потерям в данных биотканях зондирующего излучения, снижению разрешающей способности диагностических и эффективности терапевтических методов [5–7]. Управление оптическими па-

раметрами биотканей является решением данной проблемы. Хорошо известно, что рассеяние в биотканях определяется различием показателей преломления структурных компонент биотканей (коллагеновых волокон, митохондрий и т.д.) и окружающей их интритканевой жидкости. Замещение интритканевой жидкости иммерсионной жидкостью с показателем преломления большим, чем у интритканевой жидкости, приводит к существенному снижению светорассеяния. Однако, несмотря на многочисленные исследования, связанные с управлением оптическими параметрами биотканей [5, 8–10], решение проблемы еще далеко от завершения. В настоящее время практически полностью отсутствуют математические модели, описывающие взаимодействие биотканей с осмотически активными иммерсионными жидкостями, и надежные экспериментальные данные по коэффициентам диффузии.

В связи с этим в настоящей работе представлена математическая модель, описывающая диффузию лекарственных препаратов и иммерсионных жидкостей в тканях глаза человека.

1. Математическая модель

Структурно в тканях глаза человека можно выделить три основных слоя [11, 12], характеризующихся различными коэффициентами диффузии. Это конъюнктива (толщина слоя порядка 200 мкм), склера (толщина слоя порядка 500 мкм) и пигментный эпителий (толщина слоя порядка 10 мкм). Однако последний слой намного тоньше второго и может рассматриваться как бесконечно тонкая пленка с эффективным коэффициентом проницаемости.



Рассмотрим принципиальную схему эксперимента (рис. 1): на поверхность образца глазной ткани наносится слой жидкости, которая начинает диффундировать в глубь ткани. Поперечные размеры области аппликации достаточно велики, чтобы можно было пренебречь влиянием границ на процессы в центральной части образца, где проводятся наблюдения, а количество жидкости в слое, за счет непрерывной подпитки остается постоянным в течение времени эксперимента.



Рис. 1. Схема слоев глазной ткани с нанесенным слоем жидкости: 1 – конъюнктива; 2 – склера; 3 – пигментный эпителий. Для наглядности соотношения толщин слоев не соблюдены

Тогда с точки зрения математической физики задачу можно сформулировать следующим образом. Пусть имеется плоская двухслойная среда, однородная в поперечном направлении, так что задача сводится к одномерной. На верхней границе первого слоя осуществляется обмен со слоем жидкости постоянной концентрации, причем выполняются граничные условия 1-го рода. Систему координат выберем в соответствии с рис. 2. Здесь a_j, d_j ($j = 1, 2$) – координата начала и толщина j -го слоя¹ соответственно. Распределение концентрации жидкости U_j как функции координаты z и времени t есть решение уравнения диффузии в каждом слое, характеризующемся коэффициентом диффузии D_j . На границах между слоями выполняются условия сопряжения, выражающие равенство концентраций и потоков. На нижней границе второго слоя выполняются граничные условия 3-го рода – происходит обмен со средой с нулевой концентрацией диффундирующей жидкости (физически это соответствует постоянному оттоку жидкости от границы и, следовательно, отсутствию её обратного потока в биоткань).

¹ Практически всегда можно положить $a_1 = 0$, как это и изображено на рисунке, однако для упрощения это сделано в окончательных выражениях.

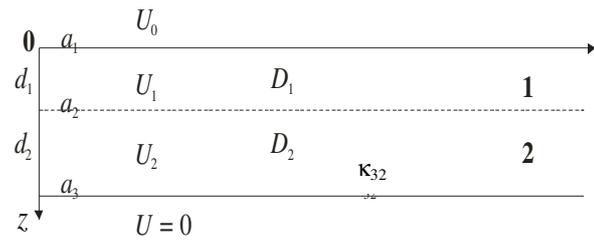


Рис. 2. Система координат и обозначения для краевой задачи

Определим функцию, задающую распределение концентрации диффундирующей жидкости в слоях, как

$$U(z, t) = U_j(z, t), \quad \text{при } a_j \leq z \leq a_{j+1}.$$

Тогда краевая задача для нее включает:

уравнение диффузии

$$\frac{\partial U_j(z, t)}{\partial t} = \delta_j^2 \frac{\partial^2 U_j(z, t)}{\partial z^2}, \quad \delta_j^2 = D_j, \quad j = 1, 2; \quad (1)$$

граничные условия

$$U_1(a_1, t) = U_0,$$

$$\left(\delta_2^2 \frac{\partial U_2(z, t)}{\partial z} + \kappa_{32} U_2(z, t) \right) \Big|_{z=a_3} = 0, \quad (2)$$

где U_0 – постоянная концентрация жидкости за границами исследуемой среды; κ_{32} – коэффициент проницаемости на границе 2-го слоя и окружающей среды, который определяется через коэффициент диффузии и толщину третьего слоя: $\kappa_{32} = \delta_3^2 / d_3$;

условия сопряжения на границе слоев

$$U_2(a_2, t) = U_1(a_2, t),$$

$$\delta_2^2 \frac{\partial U_2(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=a_2} = \delta_1^2 \frac{\partial U_1(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=a_2}; \quad (3)$$

начальные условия

$$U(z, t) \Big|_{t=0} = 0, \quad \text{при } a_1 \leq z \leq a_3. \quad (4)$$

Введём безразмерные переменные:

$$t_j = \left(\frac{\delta_j}{d_j} \right)^2 t, \quad z_j = \frac{z - a_j}{d_j} \quad \text{при } a_j \leq z \leq a_{j+1},$$

$$u_j(z_j, t_j) = \frac{U_j(z_j, t_j)}{U_0}, \quad j = 1, 2, \quad (5)$$

$$d_j = a_{j+1} - a_j.$$



При этом краевая задача (1) – (4) запишется в виде

$$\frac{\partial u_j(z_j, t_j)}{\partial t_j} = \frac{\partial^2 u_j(z_j, t_j)}{\partial z_j^2}, \quad j=1,2, \quad (1')$$

$$u_1(0, t_1) = 1,$$

$$\left(\delta_2^2 \frac{\partial u_2(z_2, t_2)}{\partial z_2} + \kappa \delta_{32} u_2(z_2, t_2) \right) \Big|_{z_2=1} = 0, \quad (2')$$

$$u_2(0, t_2) = u_1(1, t_1),$$

$$\frac{\partial u_2(z_2, t_2)}{\partial z_2} \Big|_{z_2=0} = \delta d_{21} \frac{\partial u_1(z_1, t_1)}{\partial z_1} \Big|_{z_1=1}, \quad (3')$$

$$u_j(z_j, t_j) \Big|_{t_j=0} = 0, \quad (4')$$

где

$$\kappa \delta_{32} = \kappa_{32} \frac{d_2}{\delta_2^2} = \delta d_{23}, \quad t_2 = \delta_{12} d_{21} t_1, \quad (6)$$

$$\delta d_{ij} = \delta_{ji}^2 d_{ij}, \quad \delta_{ij} = \frac{\delta_i}{\delta_j}, \quad d_{ij} = \frac{d_i}{d_j}.$$

2. Результаты и их обсуждение

Аналитическое решение краевой задачи (1')–(4') получим с помощью преобразования Лапласа [13, 14]. При начальных условиях вида (4') применение преобразования Лапласа приводит к общему выражению, из которого можно получить виды решения, хорошо сходящиеся или на больших, или на малых временах. Решения первого вида получаются с помощью теории вычетов и представляют собой ряды Фурье, а с помощью разложения функции-образа в ряд и обратного преобразования Лапласа его членов получают решения в виде кратных рядов экспонент и функций ошибок. Хотя такой ряд громоздок и мало пригоден для практических расчетов, уже первые его члены дают достаточную точность как раз в том интервале значений t , где плохо сходятся ряды Фурье. Таким образом, комбинация решений обоих видов охватывает весь интервал времени проведения эксперимента.

Применим преобразование Лапласа

$$F_L(z, s) = \int_0^\infty f(z, t) e^{-st} dt$$

к соотношениям (1') – (4'). Пользуясь правилами работы с L -образами [15], сведем краевую задачу к системе обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{d^2 u_{jL}(z_j)}{dz_j^2} - q_j^2 u_{jL}(z_j) = 0, \quad q_j = \frac{d_j}{\delta_j} \sqrt{s}, \quad j=1,2$$

$$u_{1L}(0) = \frac{1}{s},$$

$$u_{2L}(0) = u_{1L}(1),$$

$$\frac{du_{2L}(z_2)}{dz_2} \Big|_{z_2=0} = \frac{du_{1L}(z_1)}{dz_1} \Big|_{z_1=1}$$

$$\left(u_{2L}(z_2) + \frac{1}{\kappa \delta_{32}} \frac{du_{2L}(z_2)}{dz_2} \right) \Big|_{z_2=1} = 0$$

Начальное условие при этом автоматически учтено.

Будем искать решение (7) в виде

$$u_{jL}(z_j) = A_j \operatorname{sh}(q_j z_j) + B_j \operatorname{ch}(q_j z_j). \quad (8)$$

Подставляя (8) в (7), после ряда преобразований получаем:

$$u_{1L}(z_1) = \frac{1}{s} \frac{\delta_{12} S_1(q_2) \operatorname{ch}(q_2 z_1) - S_2(q_2) \operatorname{sh}(q_2 z_1)}{\kappa \delta_{32} R_1(q_1, q_2) + q_2 R_2(q_1, q_2)},$$

$$u_{2L}(z_2) = \frac{\delta_{12}}{s} \frac{\kappa \delta_{32} \operatorname{sh}(q_2 z_2) + q_2 \operatorname{ch}(q_2 z_2)}{\kappa \delta_{32} R_1(q_1, q_2) + q_2 R_2(q_1, q_2)}, \quad (9)$$

где

$$S_1(q_2) = \kappa \delta_{32} \operatorname{sh}(q_2) + q_2 \operatorname{ch}(q_2),$$

$$S_2(q_2) = \kappa \delta_{32} \operatorname{ch}(q_2) + q_2 \operatorname{sh}(q_2),$$

$$q_2 z_1 = q_1 (z_1 - 1),$$

$$R_1(q_1, q_2) = \delta_{12} \operatorname{ch}(q_1) \operatorname{sh}(q_2) + \operatorname{sh}(q_1) \operatorname{ch}(q_2),$$

$$R_2(q_1, q_2) = \delta_{12} \operatorname{ch}(q_1) \operatorname{ch}(q_2) + \operatorname{sh}(q_1) \operatorname{sh}(q_2),$$

$$q_2 z_2 = q_2 (1 - z_2).$$

Выполнение обратного преобразования Лапласа с помощью теории вычетов дает следующие выражения для безразмерных концентраций диффундирующей жидкости в слоях ткани:

$$u_1(z_1, t_1) = 1 - \frac{\kappa \delta_{32}}{\kappa \delta_{32} (\delta d_{21} + 1) + \delta d_{21}} z_1 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{P_1(\mu_{1m}, z_1) \exp(-\mu_{1m}^2 t_1)}{\mu_{1m} Q(\mu_{1m})}, \quad (10)$$



$$P_1(\mu_{1m}, z_1) = [\kappa\delta_{32} \cos(\delta_{12}d_{21}\mu_{1m}) + \delta_{12}d_{21}\mu_{1m} \sin(\delta_{12}d_{21}\mu_{1m})] \sin[\mu_{1m}(1-z_1)] - \delta_{12} [\kappa\delta_{32} \sin(\delta_{12}d_{21}\mu_{1m}) + \delta_{12}d_{21}\mu_{1m} \cos(\delta_{12}d_{21}\mu_{1m})] \cos[\mu_{1m}(1-z_1)],$$

$$P_2(\mu_{1m}, z_2) = \kappa\delta_{32} \sin[\delta_{12}d_{21}\mu_{1m}(1-z_2)] + \delta_{12}d_{21}\mu_{1m} \cos[\delta_{12}d_{21}\mu_{1m}(1-z_2)],$$

$$Q(\mu_{1m}) = Q_1(\mu_{1m}) - \delta_{12}d_{21}\mu_{1m}Q_2(\mu_{1m})$$

$$Q_1(\mu_{1m}) = [\kappa\delta_{32}(1 + \delta d_{21}) + \delta d_{21}] \times \cos(\mu_{1m}) \cos(\delta_{12}d_{21}\mu_{1m}) - \delta_{12} [\kappa\delta_{32}(1 + d_{21}) + d_{21}] \times \sin(\mu_{1m}) \sin(\delta_{12}d_{21}\mu_{1m})$$

$$Q_2(\mu_{1m}) = \delta_{12}(1 + d_{21}) \sin(\mu_{1m}) \cos(\delta_{12}d_{21}\mu_{1m}) + (1 + \delta d_{21}) \cos(\mu_{1m}) \sin(\delta_{12}d_{21}\mu_{1m}),$$

где $\mu_{1m}, m=1, 2, 3, \dots$ – положительные корни уравнения

$$\begin{aligned} &\kappa\delta_{32} [\delta_{12} \cos(\mu_1) \sin(\delta_{12}d_{21}\mu_1) + \sin(\mu_1) \cos(\delta_{12}d_{21}\mu_1)] + \\ &+ \delta_{12}d_{21}\mu_1 [\delta_{12} \cos(\mu_1) \cos(\delta_{12}d_{21}\mu_1) - \sin(\mu_1) \sin(\delta_{12}d_{21}\mu_1)] = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

При $\kappa\delta_{32} = \infty$ решение (10) совпадает с решением из [14, гл. XII, §8]. Первые члены в формулах (10), очевидно, представляют стационарное решение, к которому приближаются распределения концентрации жидкости в обоих слоях при $t \rightarrow \infty$. Следовательно, с течением времени вклад каждого ряда в значения концентраций уменьшается, и для достижения необходимой точности приближения требуется все меньше первых членов ряда. Уже при $t_1 \geq 1$ для практических расчетов достаточно первых пяти членов. С другой стороны, при $t_1 \approx 0$ даже для получения общего вида распределений концентрации жидкости, качественно совпадающего с реальным, требуется больше 1000 членов ряда. Результаты расчетов по формулам (10) приведены на рис. 3. Следует отметить не имеющие физического смысла осцилляции решения при $t = 0$ и недостаточно большое число членов ряда Фурье.

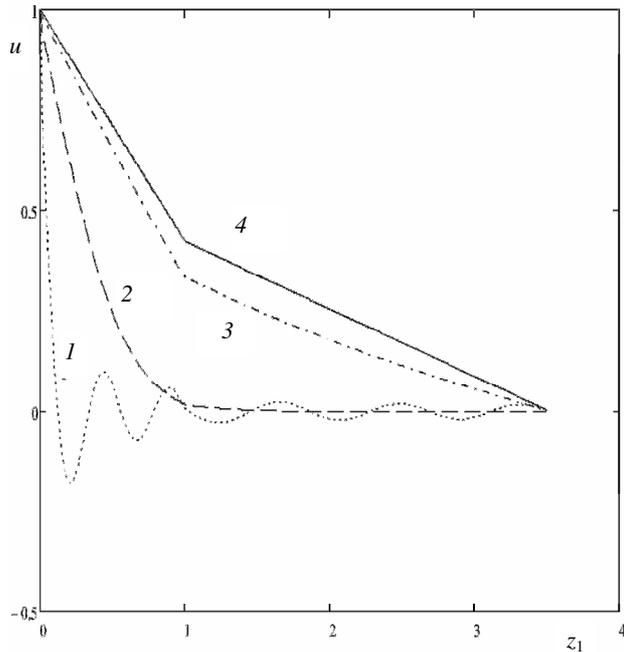


Рис.3. Распределение концентрации диффундирующей жидкости при различных значениях t , рассчитанное по формулам (10) (учитываются первые 10 членов ряда Фурье): 1 – $t_1 = 0$; 2 – $t_1 = 0.1$; 3 – $t_1 = 1$; 4 – $t_1 = \infty$

Чтобы получить компактное решение, дающее хорошую точность на малых временах, нужно представить (9) в виде ряда экспонент. Ограничиваясь членами первого порядка малости, имеем:

$$\begin{aligned} u_{1L}(z_1) \approx & \frac{1}{s} \left\{ \frac{\delta_{12}-1}{\delta_{12}+1} \left[\exp\left\{-\frac{d_1}{\delta_1}(2-z_1)\sqrt{s}\right\} + \right. \right. \\ & + \exp\left\{-\left(\frac{d_1}{\delta_1}z_1 + 2\frac{d_2}{\delta_2}\right)\sqrt{s}\right\} \left. \right] + \\ & + \exp\left\{-\left(\frac{d_1}{\delta_1}(2-z_1) + 2\frac{d_2}{\delta_2}\right)\sqrt{s}\right\} + \\ & + \exp\left\{-\frac{d_1}{\delta_1}z_1\sqrt{s}\right\} - \\ & - \frac{2\kappa\delta'_{32}}{\kappa\delta'_{32} + \sqrt{s}} \times \\ & \times \left[\exp\left\{-\left(\frac{d_1}{\delta_1}(2-z_1) + 2\frac{d_2}{\delta_2}\right)\sqrt{s}\right\} + \right. \\ & \left. \left. + \frac{\delta_{12}-1}{\delta_{12}+1} \exp\left\{-\left(\frac{d_1}{\delta_1}z_1 + 2\frac{d_2}{\delta_2}\right)\sqrt{s}\right\} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (13)$$



$$u_{2L}(z_2) \approx \frac{2\delta_{12}}{(\delta_{12}+1)s} \left[\exp \left\{ - \left(\frac{d_1}{\delta_1} + \frac{d_2}{\delta_2} z_2 \right) \sqrt{s} \right\} + \exp \left\{ - \left(\frac{d_1}{\delta_1} + \frac{d_2}{\delta_2} z_2 \right) \sqrt{s} \right\} + \exp \left\{ - \left(\frac{d_1}{\delta_1} + \frac{d_2}{\delta_2} (2-z_2) \right) \sqrt{s} \right\} - \frac{2\kappa\delta'_{32}}{\kappa\delta'_{32} + \sqrt{s}} \exp \left\{ - \left(\frac{d_1}{\delta_1} + \frac{d_2}{\delta_2} (2-z_2) \right) \sqrt{s} \right\} \right],$$

$$\kappa\delta'_{32} = \kappa\delta_{32} \frac{\delta_2}{d_2}.$$

Использование таблиц обратного преобразования Лапласа (см. [15, приложение, формулы (168), (170)) дает:

$$u_1(z_1, t_1) \approx \frac{\delta_{12}-1}{\delta_{12}+1} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{2-z_1}{2\sqrt{t_1}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{z_1+2\delta_{12}d_{21}}{2\sqrt{t_1}} \right) \right] + \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{z_1}{2\sqrt{t_1}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{2-z_1+2\delta_{12}d_{21}}{2\sqrt{t_1}} \right) \right] + 2 \exp \left[\left(\frac{\kappa\delta_{32}}{\delta_{12}d_{21}} \right)^2 t_1 + 2\kappa\delta_{32} \right] \times \left\{ \exp \left[\frac{\kappa\delta_{32}(2-z_1)}{\delta_{12}d_{21}} \right] \operatorname{erfc} \left(\frac{2-z_1+2\delta_{12}d_{21}}{2\sqrt{t_1}} + \frac{\kappa\delta_{32}}{\delta_{12}d_{21}} \sqrt{t_1} \right) + \frac{\delta_{12}-1}{\delta_{12}+1} \exp \left[\frac{\kappa\delta_{32}z_1}{\delta_{12}d_{21}} \right] \operatorname{erfc} \left(\frac{z_1+2\delta_{12}d_{21}}{2\sqrt{t_1}} + \frac{\kappa\delta_{32}}{\delta_{12}d_{21}} \sqrt{t_1} \right) \right\} \quad (14)$$

$$u_2(z_2, t_1) \approx \frac{2\delta_{12}}{\delta_{12}+1} \left\{ \operatorname{erfc} \left(\frac{1+\delta_{12}d_{21}z_2}{2\sqrt{t_1}} \right) - \operatorname{erfc} \left(\frac{1+\delta_{12}d_{21}(2-z_2)}{2\sqrt{t_1}} \right) \right\} + 2 \exp \left[\left(\frac{\kappa\delta_{32}}{\delta_{12}d_{21}} \right)^2 t_1 + \frac{\kappa\delta_{32}}{\delta_{12}d_{21}} [1+\delta_{12}d_{21}(2-z_2)] \right] \times \operatorname{erfc} \left(\frac{1+\delta_{12}d_{21}(2-z_2)}{2\sqrt{t_1}} + \frac{\kappa\delta_{32}}{\delta_{12}d_{21}} \sqrt{t_1} \right)$$

Анализ выражений (14) показывает, что они дают точное решение при $t_1 = 0$. Действительно, в этом случае все члены обеих формул, кроме одного, равны 0 при всех значениях z_1, z_2 . Что же касается третьего члена в $u_1(z_1, t_1)$, то при $z_1 = 0$ в его аргументе появляется неопределенность «0/0», и его значение зависит от порядка перехода к пределам $z_1 \rightarrow +0, t_1 \rightarrow +0$. А это полностью совпадает с начальными условиями: нулевое значение концентрации на всем протяжении исследуемой ткани и единичное – на границе первого слоя. Если же $t_1 > 0$, но всё еще мало ($t_1 \ll \min\{2, \delta_{12}d_{21}\}$), то $u_1(z_1, t_1) \approx 0$, при $z_1 \gg t_1$ и $u_1(z_1, t_1) \approx 1$ в противоположном случае. Таким образом, наблюдается резкий «диффузионный фронт», который становится более пологим при больших t_1 . Результаты расчетов по формулам (14) приведены на рис. 4.

Полученные результаты показывают, что при достаточно малых временах распределение концентрации диффундирующей жидкости определяется только параметрами первого слоя и условиями на его границе с внешней средой.

В качестве примера рассмотрим три лекарственных препарата: инулин, надолол и тинолол. В таблице приведены значения ко-

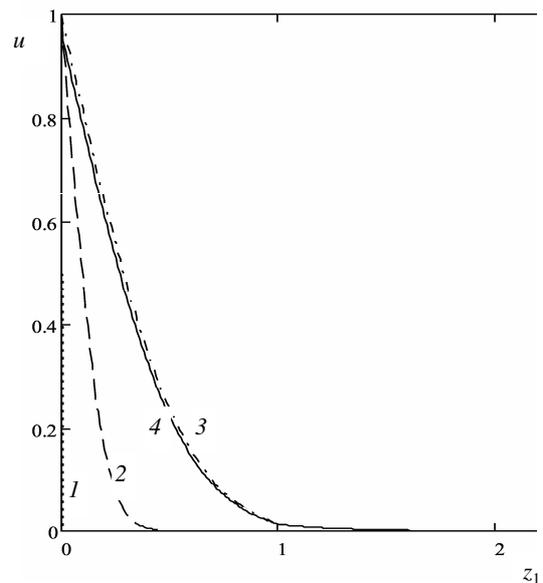


Рис. 4. Распределение концентрации диффундирующей жидкости при различных значениях t , рассчитанное по формулам (14): 1 – $t_1 = 0$; 2 – $t_1 = 0.01$; 3 – $t_1 = 0.09$; 4 – $t_1 = 0.09$ (кривая 4 рассчитана по формуле (10))



Диффузионные характеристики тканей глаза для трёх лекарственных препаратов

Глазная ткань	Диффундирующее вещество	Коэффициент проницаемости P , м/с	Коэффициент распределения K	Коэффициент диффузии D , м ² /с
Конъюнктив	Инулин	3.8×10^{-8}	1	7.8×10^{-12}
	Надолол	5.3×10^{-7}	0.23	4.61×10^{-10}
	Тинолол	5.2×10^{-7}	1.61	6.46×10^{-11}
Склера	Инулин	9.0×10^{-8}	1	4.5×10^{-11}
	Надолол	3.9×10^{-7}	0.23	8.48×10^{-10}
	Тинолол	4.1×10^{-85}	1.61	1.27×10^{-10}

коэффициентов проницаемости и «коэффициентов распределения» конъюнктивы и склеры согласно обзору [16]. В свою очередь, коэффициент проницаемости P связан с коэффициентом диффузии D выражением $P = KD/l$ [2, 17], где K – коэффициент распределения и l – толщина слоя. Рассчитанные коэффициенты диффузии данных лекарственных препаратов приведены в последнем столбце таблицы. При этом безразмерный параметр $k\delta_{32}$ может принимать значения из диапазона 20–50. Это позволяет рассчитать, например, время выхода концентрации диффундирующего вещества на стационар $t_{\text{стац}}$, определяемое как промежуток времени от начала процесса диффузии, за которое распределение концентрации становится близким к стационарному с некоторой заданной точностью, например, неотличимо визуально на графике. Для безразмерной величины $t_{1\text{стац}}$ расчёты дают значение ≈ 3.5 , что соответствует времени $t_{\text{стац}} \approx 1.8 \times 10^4$, 300 и 2150 с для инулина, надолола и тинолола соответственно.

Таким образом, получены аналитические выражения для распределения концентрации диффундирующей жидкости в двухслойной среде, моделирующей ткань глаза человека. Формулы достаточно компактны и удобны для расчетов, в том числе для решения обратных задач.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 06-02-16740-а) и U.S. Civilian Research and Development Foundation for the Independ-

ent States of the Former Soviet Union (грант № REC-006/SA-006-00).

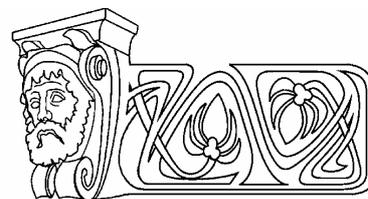
Библиографический список

1. Томашевич М.С., Воротникова Т.В., Быков В.А. Моделирование систем доставки биологически активных веществ в кожу и подлежащие ткани // Биомедицинские технологии и радиоэлектроника. 2006. №3. С.31–37.
2. Schaefer H., Redelmeier T.E. Skin Barrier: Principles of percutaneous absorption. Basel: Karger, 1996. 322 p.
3. Watkinson A.C., Brain K.R. Basic mathematical principles in skin permeation // J. Toxicology: Cutaneous and Ocular Toxicology. 2002. Vol.21, №4. P.371–402.
4. Yamashita F., Bando H., Koyama Y. et al. In vivo and in vitro analysis of skin penetration enhancement based on a two-layer diffusion model with polar and nonpolar routes in the stratum corneum // Pharm. Res. 1994. Vol.11, №2. P.185–191.
5. Bashkatov A.N., Genina E.A., Tuchin V.V. Optical immersion as a tool for tissue scattering properties control // Perspectives in Engineering Optics / Eds. K. Singh, V.K. Rastogi. New Delhi, India: Anita Publications, 2002. P.313–334.
6. Tuchin V.V. Optical clearing in tissues and blood. Bellingham, WA: SPIE Press, 2005. 256 p.
7. Tuchin V.V. Tissue optics: Light scattering methods and instruments for medical diagnosis. Bellingham, WA: SPIE Press, 2007. 840 p.
8. Башкатов А.Н., Генина Э.А., Синичкин Ю.П., Кочубей В.И., Лакодина Н.А., Тучин В.В. Определение коэффициента диффузии глюкозы в склере глаза человека // Биофизика. 2003. Т. 48, №2. С.309–313.
9. Bashkatov A.N., Genina E.A., Sinichkin Yu.P., Kochubey V.I., Lakodina N.A., Tuchin V.V. Glucose and mannitol diffusion in human dura mater // Biophys. J. 2003. Vol.85, №5. P.3310–3318.
10. Tuchin V.V. Optical clearing of tissues and blood using the immersion method // J. Phys. D: Appl. Physics. 2005. Vol.38, №15. P.2497–2518.
11. Hammer M., Roggan A., Schweitzer D., Muller G. Optical properties of ocular fundus tissues – an in vitro study using the double-integrating-sphere technique and inverse Monte Carlo simulation // Phys. Med. Biol. 1995. Vol.40, №6. P.963–978.
12. Nemati B., Dunn A., Welch A.J., Rylander III H.G. Optical model for light distribution during transscleral cyclophotocoagulation // Appl. Opt. 1998. Vol.37, №4. P.764–771.
13. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1972. 736 с.
14. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел / Пер. с англ. М.: Наука, 1964. 488 с.
15. Дёч Г. Руководство к практическому применению преобразования Лапласа и Z-преобразования / Пер. с англ. М.: Наука, 1971. 288 с.
16. Prausnitz M.R., Noonan J.S. Permeability of cornea, sclera, and conjunctiva: a literature analysis for drug delivery to the eye // J. Pharm. Sci. 1998. Vol.87, №12. P.1479–1488.
17. Котык А., Яначек К. Мембранный транспорт. Междисциплинарный подход / Пер. с англ. М.: Мир, 1980. 342 с.



УДК 535+57 (023)

ФОТОДИНАМИЧЕСКОЕ ВОЗДЕЙСТВИЕ КРАСНОГО (625 нм) И ИНФРАКРАСНОГО (805 нм) ИЗЛУЧЕНИЯ НА БАКТЕРИИ *P. ACNES*, ОБРАБОТАННЫЕ ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРАМИ



Е.С. Тучина, В.В. Тучин, Г.Б. Альтшулер*, И.В. Ярославский*

Саратовский государственный университет,
кафедра

* Паломар Медикал Технолоджис, Бурлингтон, США

E-mail: firstflower@yandex.ru

Исследованы закономерности индуцированного красным и инфракрасным излучением подавления колониеобразующей способности бактерий *Propionibacterium acnes* в присутствии таких фотосенсибилизаторов, как метиленовый синий и индоцианин зеленый. Установлен дозозависимый эффект действия красного и инфракрасного излучения. Полученные результаты рассматриваются с точки зрения оценки эффективности действия излучения в сочетании с фотосенсибилизаторами при фотодинамической терапии кожных гнойно-воспалительных заболеваний.

Photodynamic Influence of Red (625 nm) and Infra-Red (805 nm) Radiation on Bacteria *P. Acnes* Processed by Photosensitizers

E.S. Tuchina, V.V. Tuchin, G.B. Altschuler, I.V. Yaroslavsky

It was shown, that *Propionibacterium acnes* was rather subjected to action of red and infrared radiation. The effect of the given radiation amplified at this bacteria by various solutions of photosensitizers. The received results are considered from the point of view of an estimation of light action efficiency in a combination to photosensitizers at photodynamic therapy skin suppurative inflammation diseases.

Введение

В последние десятилетия лазерная и световая терапия активно развивается и находит широкое применение при лечении кожных заболеваний [1–3].

Acne vulgaris является хроническим заболеванием сальных желез и встречается достаточно часто. Наибольший интерес в данном случае представляют бактерии *Propionibacterium acnes* (*P. acnes*). Микроорганизмы этого вида входят в состав нормальной микрофлоры кожи человека и заселяют сальные железы. Это грамположительные анаэробные или микроаэрофильные палочки неправильной формы. Особенностью физиологии *P. acnes* является синтез и накопление значительного количества порфирина [4–6].

Как правило при лечении угревой сыпи назначают антибактериальные препараты, а также ретиноиды. Подобная терапия имеет

недостатки, связанные с индивидуальными особенностями пациентов, длительностью и способом применения антибиотиков [7].

Фототерапия может стать удачной альтернативой при лечении угревой сыпи. Применение подобных методов стало возможным в результате исследований по взаимодействию света и биотканей, а также благодаря развитию лазерной и светодиодной техники [8, 9].

В настоящей работе мы исследовали в условиях *in vitro* чувствительность микроорганизмов *P. acnes* к действию красного (625 нм) и инфракрасного (805 нм) излучения в сочетании с применением фотосенсибилизаторов – метиленового синего и индоцианина зеленого.

1. Материалы и методы

В качестве объекта исследования использовали штамм *Propionibacterium acnes* Ac-1450 (коллекция ИБФМ РАН). Микроорганизмы выращивали при температуре 37°C на агаризованной тиогликолевой среде с добавлением 5%-ной гемолизированной кроличьей крови или 0.02% БСА. Посевы инкубировали в анаэроостате в бескислородной среде (газовая смесь N₂:CO₂ = 9:1).

Источником красного излучения служил мощный светодиод с максимумом спектра испускания на длине волны 625 нм и плотностью мощности 31 мВт/см². В ходе экспериментов в качестве источника лазерного излучения использовали лазер (OPC-BO15-MMM-FCTS, Opto Power Corp., Tucson, Arizona) с максимумом спектра испускания на длине волны 805 нм, световодным выходом и плотностью мощности 50 мВт/см² на поверхности среды. Время облучения варьировали от 5 до



30 мин, тем самым набирали дозу облучения, необходимую для подавления образования колоний бактериями.

Для проведения экспериментов использовали 8- или 96-луночную полистирольную планшету с круглодонными ячейками. Содержимое одной ячейки соответствовало одной экспериментальной точке. При проведении опытов по воздействию света источник излучения располагали точно над соответствующей ячейкой. Для достижения необходимой плотности мощности излучения выбирали расстояние от центра ячейки до источника света: 1,5 см – для красного (625 нм) светодиода; 50 см – для инфракрасного (805 нм) лазера. После проведения эксперимента содержимое каждой ячейки переносили с помощью микропипетки на поверхность плотной питательной среды и равномерно распределяли стерильным шпателем.

В качестве фотосенсибилизаторов использовали индоцианин зеленый (ИЗ) и метиленовый синий (МС). Индоцианин зеленый готовили в концентрации 0.1% на основе дистиллированной воды и смеси глицерина, этанола и воды в соотношении 25:45:30. Метиленовый синий готовили в концентрации 0.025% на основе дистиллированной воды и смеси глицерина, этанола и воды в соотношении 25:25:50.

Способность бактерий к образованию колоний оценивали по числу выросших колоний после посева на агаризованную среду анализируемых образцов соответствующих разведений и их выращивания в анаэробных условиях при 37 °С в течение 5 суток.

В работе использовали реактивы фирм «Sigma» (Сент-Луис, США) и индоцианин зеленый производства Aldrich Chemical Co., USA.

Для проведения экспериментов использовали трехсуточную культуру исследуемого штамма *P. acnes*. Методом последовательных разведений достигали концентрации бактериальной взвеси 1000 микробных клеток на миллилитр (мк/мл). Из разведения микроорганизмов 10000 мк/мл 1 мл взвеси вносили в 9 мл растворов фотосенсибилизаторов (ФС), инкубировали в течение 10 мин без доступа света. Из конечного разведения, а также из растворов ФС, взвесью объемом 0.2 мл вносили в ячейки экспериментальной планше-

ты. После воздействия светом в течение 5, 10, 15 и 30 мин культуру переносили на чашки Петри с плотной питательной средой и равномерно распределяли по поверхности агара стерильным шпателем. Учет результатов проводили путем подсчета колониеобразующих единиц (КОЕ) через 5 дней после инкубации при 37 °С. Принято считать, что одна колония на плотной питательной среде является потомством одной микробной клетки. Таким образом, при количественном учете оказываемого воздействия правомерно подсчитывать КОЕ – данный показатель отражает количество выживших под действием неблагоприятного фактора бактериальных клеток. Контролем служили данные колониеобразующей способности бактерий: 1) не обработанных фотосенсибилизаторами и 2) не подвергнутых облучению. Каждая экспериментальная точка является усреднением 10 проведенных опытов.

2. Результаты

Для определения возможной токсичности красителей определяли колониеобразующую способность (КОС) бактерий после их инкубации с фотосенсибилизаторами без облучения. Из рис. 1, а следует, что метиленовый синий не воздействует на КОС микроорганизмов только в концентрации меньше 0.025%. Концентрация индоцианина зеленого < 0.1% не оказывает токсического действия на микроорганизмы (рис. 1, б).

Из литературных данных известно, что длительность обработки клеток микроорганизмов фотосенсибилизаторами может привести к бактериостатическому или бактерицидному эффекту или, напротив, быть недостаточной для достижения фотоинактивации [7]. Представляло интерес изучить закономерности подавления размножения бактерий фотосенсибилизаторами. Для этого клетки преинкубировали с красителями различное время и учитывали число КОЕ. На рис. 2 представлены данные по изменению показателя КОЕ в зависимости от времени преинкубации бактериальных клеток в растворе красителя. Как оказалось, 10–15 мин преинкубации с фотосенсибилизатором достаточно для достижения при последующем облучении значительного снижения КОЕ *P. acnes*.

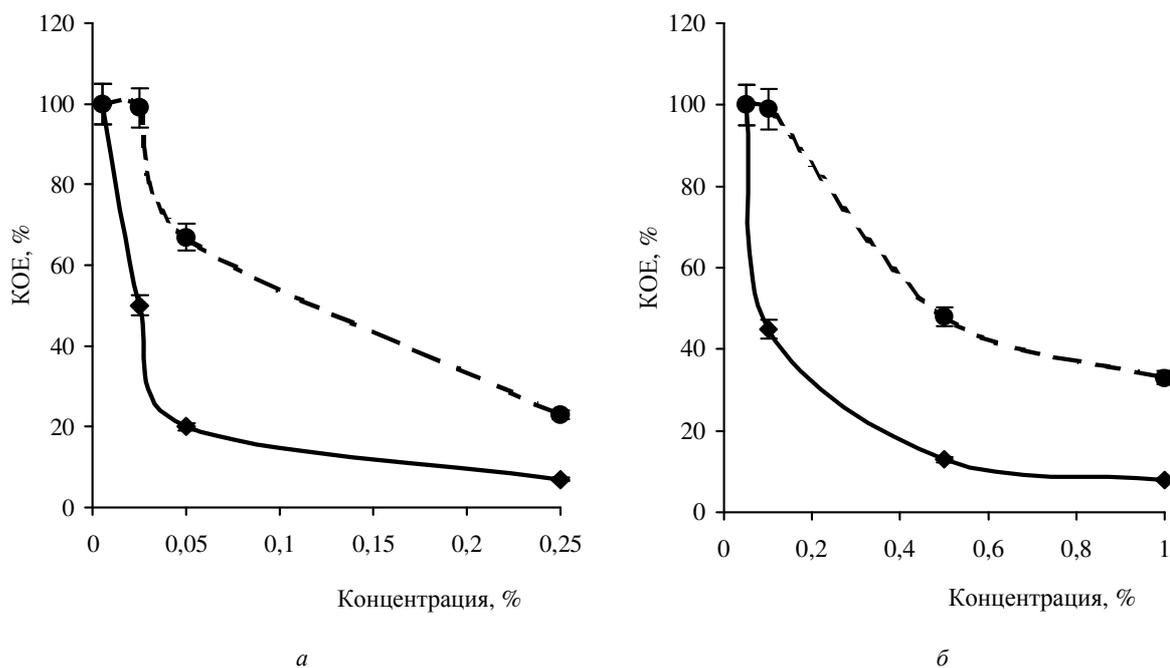


Рис. 1. Влияние различных концентраций красителей в темноте (●) и при облучении (◆) на колониеобразующую способность *P. acnes*: а – обработка метиленовым синим; б – обработка индоцианином зеленым. Воздействовали красным 625 нм и инфракрасным 805 нм излучением в течение 5 мин

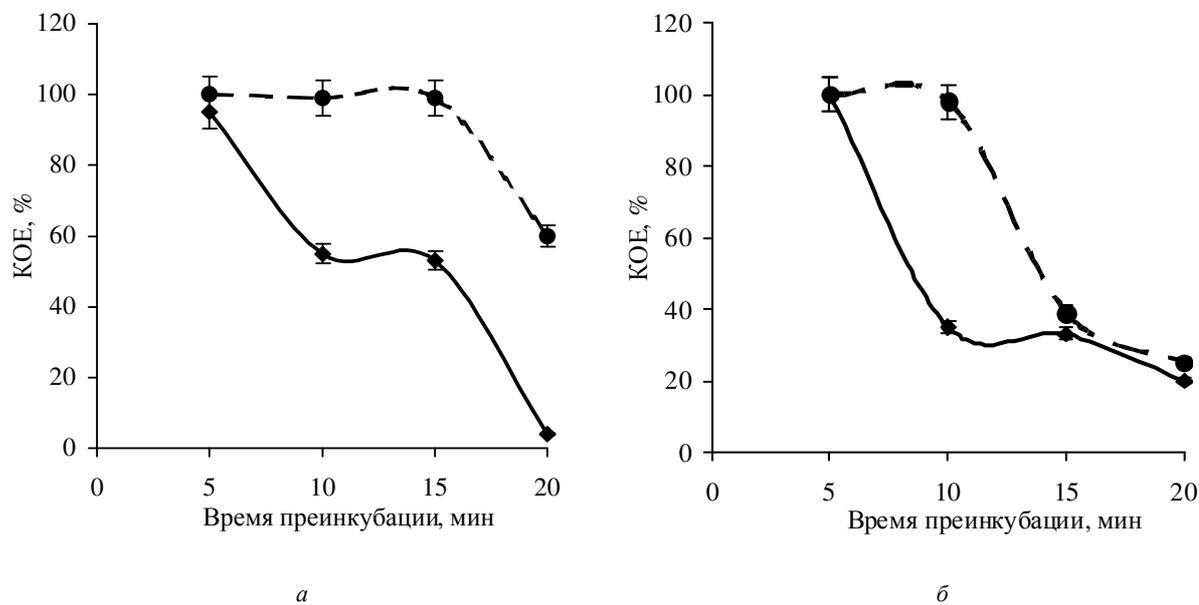


Рис. 2. Зависимость выживаемости бактерий *P. acnes* от длительности преинкубации с красителями в темноте (●) и при облучении (◆): а – с 0.025% метиленовым синим; б – с 0.1% индоцианином зеленым. Воздействовали красным 625 нм и инфракрасным 805 нм излучением в течение 5 мин



Использование красного излучения (625 нм) при фотовоздействии на *P. acnes* было достаточно эффективным. Снижение числа КОЕ происходило после 5 мин облучения на 33%, после 10 мин – на 20%, после 15 мин – на 34%, после 30 мин – на 51%. Применение водного раствора МС в качестве фотосенсибилизатора обуславливало снижение числа КОЕ под воздействием красного излучения в течение 5 мин на 50%, в течение 10 мин – на 40%, в течение 15 мин – на 42%, в течение 30 мин – на 100%. Обработка бактериальных клеток МС в лосьоне на основе глицерина и спирта с последующим действием красного излучения приводило к уменьшению показателя КОЕ на 60% после 5 мин облучения, на 58% – после 10 мин, на 95% – после 15 мин, на 100% – после 30 мин (рис.3).

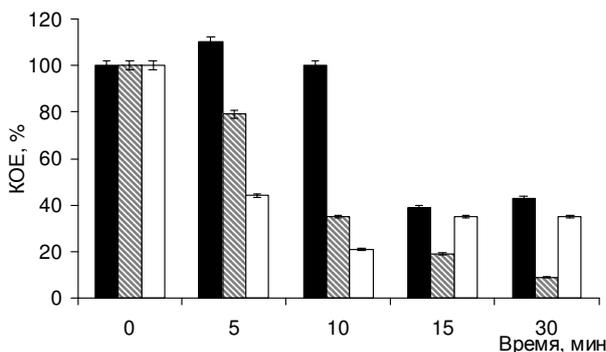


Рис. 3. Действие красного излучение (625 нм) на выживаемость *P. acnes*: ■ – красное излучение, ■ – излучение и водный раствор красителя, □ – излучение и раствор красителя в лосьоне

Воздействие лазерным излучением с длиной волны 805 нм на *P. acnes* в течение 5 мин стимулировало размножение клеток данного микроорганизма, увеличение числа КОЕ относительно контроля составило 10%. Значение КОЕ не отличалось от контрольного после 10 мин воздействия инфракрасного излучения. Сокращение числа КОЕ под действием облучения происходило после 15 мин – на 60%, после 30 мин – на 53%. Применение водного раствора ИЗ в качестве фотосенсибилизатора обуславливало снижение числа КОЕ под воздействием инфракрасного излучения в течение 5 мин на 24%, в течение 10 мин – на 62%, в течение 15 мин – на 80%, в течение 30 мин – на 90%. Обработка бактериальных

клеток ИЗ в лосьоне на основе глицерина и спирта с последующим действием красного излучения приводила к уменьшению показателя КОЕ на 58% после 5 мин облучения, на 79% – после 10 мин, на 63% – после 15 мин, на 64% – после 30 мин (рис. 4).

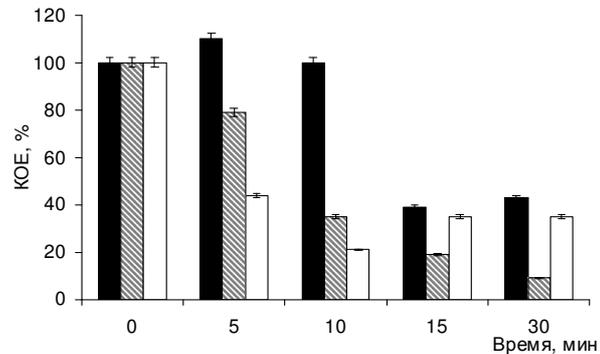


Рис. 4. Действие инфракрасного излучения (805 нм) на выживаемость *P. acnes*: ■ – инфракрасное излучение, ■ – излучение и водный раствор красителя, □ – излучение и раствор красителя в лосьоне

3. Обсуждение

Патогенез угревой сыпи пока недостаточно изучен. По всей видимости, этот процесс обусловлен множеством факторов, в том числе уровнем выделения кожного сала и частотой образования микрокамедонов. *P. acnes* превращает триглицериды сала, изначально обладающие противомикробными свойствами, в безвредные для микроорганизмов жирные кислоты, что приводит к активному развитию транзиторных микроорганизмов. Бактериальные метаболиты служат хемоаттрактантами для лейкоцитов макроорганизма. Известно, что данные клетки играют большую роль в формировании очага воспаления и иммунном ответе, в результате их деятельности и происходит образование камедонов [10].

Использование красного излучения для фотодинамической терапии угревой сыпи является весьма эффективным. Рядом авторов показано, что применение красного светодиода (660 нм) и лазерного излучения (805 нм) в сочетании с соответствующими фотосенсибилизаторами или синим (415 нм) излучением сокращает количество воспаленных угрей на коже пациента, приводит к ускоренному их заживлению [3, 8, 9], в процес-



се светолечения происходит повышение секреции цитокинов фагоцитами, что стимулирует пролиферацию фибробластов кожи, влечет за собой снижение продукции кожного сала и способствует более быстрому обновлению эпидермиса [10].

Лазерная и световая терапия с длинами волн 400–700 нм находит терапевтическое обоснование ввиду фотохимических особенностей молекул порфиринов – эндогенных красителей в клетках *P. acnes*. Наиболее эффективно порфирины поглощают свет с длинами волн 400–420 нм, что соответствует так называемой полосе Core. Но существуют и Q-полосы менее эффективно поглощающие излучение с длинами волн 500–700 нм. Подобное воздействие приводит к образованию порфиринами активных радикалов, которые незамедлительно вызывают разрушение бактериальной клетки [11]. При недостаточном содержании эндогенных порфиринов роль сенсibilизаторов успешно выполняют соответствующие экзогенные красители [8, 9].

Полученные данные об эффективном подавлении размножения бактерий *P. acnes*, обработанных фотосенсibilизаторами, под действием красного (625 нм) и инфракрасного (805 нм) излучения, скорее всего, связаны с многофакторным воздействием в условиях эксперимента, которые в значительной степени соответствуют условиям световой терапии угревой сыпи. А именно в технологии лечения предварительно производится косметическая чистка кожи, что влечет за собой более эффективное снабжение тканей сальной железы, где развиваются бактерии, кислородом воздуха.

Наши эксперименты в той части, где идет облучение светом, проводились на открытом воздухе, поэтому кислородный фактор в некотором подавлении микробной флоры должен быть учтен при интерпретации результатов. С одной стороны, из наших экспериментов следует, что при используемых длительностях облучения на воздухе (5–30 мин) кислородный фактор не является определяющим, тем не менее он может несколько модифицировать отклик бактерий. Интересно в этом смысле проследить за поведением бактерий при воздействии красного

излучения на несенсibilизированные бактерии (см. рис. 3). Хорошо видно, что увеличение времени облучения от 5 до 30 мин приводит сначала к некоторому снижению КОЕ, затем к его повышению и опять к некоторому снижению. Явно видно, что происходит конкуренция нескольких разнонаправленных процессов. Это, во-первых, подавляющее действие кислорода и возбужденных порфиринов, а во-вторых, процесс биостимуляции (более эффективного размножения бактерий) под действием света, который хорошо известен [12]. Важно, что даже действие разведенного в воде фотосенсibilизатора МС, который менее эффективен, чем он же при разведении в глицерино-спиртовом лосьоне, с действием кислорода не могут противостоять биостимуляции. И только к 30-й мин наблюдается резкое уменьшение КОЕ.

Мы также впервые в этой работе обнаружили биостимулирующее действие ИК излучения (805 нм) на бактерии (см. рис. 4), которое компенсируется действием кислорода только к 10-й мин облучения. При этом к 10-й мине мы имеем довольно сильное снижение числа КОЕ для обоих растворов фотосенсibilизатора при разведении ИЗ в воде и глицерино-спиртовом лосьоне. При этом лосьон оказывается более эффективным растворителем.

Как было показано ранее [8, 9, 13], глицерино-спиртовой раствор способствует более эффективному прокрашиванию биотканей за счет увеличения проницаемости мембран клеток, а также способствует более стабильному и сильному поглощению света молекулами фотосенсibilизатора, что в целом соответствует результатам настоящей работы, но уже при исследованиях на микроорганизмах.

Некоторая противоречивость результатов для ИК излучения при времени облучения более 15 мин, когда более эффективным оказывается водный раствор, а в глицерино-спиртовом растворе начинается даже относительный рост числа КОЕ, требует дальнейшего исследования. Возможно, что при сравнительно длительном действии света происходит модификация самих растворов, которая изменяет условия подавления роста бак-



терий. Тем не менее по результатам наших исследований для ИК излучения можно сделать важный практический вывод: время облучения при выбранной плотности мощности 50 мВт/см^2 не должно превышать 10 мин при использовании глицерино-спиртового растворителя.

Авторы выражают признательность Л.Е. Долотову за разработку светодиодного облучателя и помощь при проведении экспериментов.

Представленные результаты получены в ходе работ по гранту CRDF RUB1-570-SA-04 при финансовой поддержке Palomar Medical Technologies, Burlington, USA.

Библиографический список

1. Ross E.V. Acne, Lasers and Light // *Advances in Dermatology*. 2005. Vol.21. P.1–32.
2. Nitzan Y., Dror R., Ladan H., Malik Z., Kimel S., Gottfried V. Structure-activity relationship of porphyrines for photoactivation of bacteria // *Photochem. Photobiol.* 1995. Vol.62. P.342–347.
3. Papageorgiou P., Katsambas A., Chu A.. Phototherapy with blue (415 nm) and red (660 nm) light in the treatment of *acne vulgaris* // *British. J. Dermatol.* 2000. №142. P.973–978.
4. Kjeldstad B., Johnsson A. An action spectrum for blue and near ultraviolet inactivation of *Propionibacterium acnes*: with emphasis on a possible porphyrin photosensitization // *Photochem. Photobiol.* 1986. Vol.43. P.67–70.
5. Simpson N. Antibiotics in acne: time for a rethink // *British. J. Dermatol.* 2001. №144. P.225–227.
6. Kawada A., Aragane Y., Sangen Y., Tezuka T. Acne phototherapy with a high-intensity, enhanced, narrow-band, blue light source: an open study and *in vitro* investigation // *J. Dermatol. Sci.* 2002. Vol.30. P.129–135.
7. Hongcharu W., Taylor C.R., Chang Y. D. Topical ALA-photodynamic therapy for the treatment of *acne vulgaris* // *J. Invest Dermatol.* 2000. Vol.115. P.183–192.
8. Tuchin V.V., Genina E.A., Bashkatov A.N., Simonenko G.V., Odoevskaya O.D., Altshuler G.B. A pilot study of ICG laser therapy of *acne vulgaris*: Photodynamic and photothermolysis treatment // *J. Lasers in Surg. and Med.* 2003. Vol.33, №5. P.296–310.
9. Genina E.A., Bashkatov A.N., Simonenko G.V., Odoevskaya O.D., Tuchin V.V., Altshuler G.B. Low-Intensity ICG-Laser Phototherapy of *Acne Vulgaris*: A Pilot Study // *J. Biomed. Opt.* 2004. Vol.9, №4. P.828–834.
10. Анфимова Н.А., Поткаев Н.Н., Ткаченко С.Б., Шугнина Е.А. Фотодинамическая терапия: патогенетическое обоснование эффективности при вульгарных угрях // *Эксперим. и клин. дерматокосметология*. 2005. №5. С.125–130.
11. Mariwalla K., Rohrer T. Use of lasers and light-based therapies for treatment of *acne vulgaris* // *J. Lasers in Surg. and Med.* 2005. Vol.37. P.333–342.
12. Ovchinnikov I.S., Shoub G.M., Tuchin V.V. Photodynamic effect of laser radiation and methylene blue on some opportunistic pathogenic microorganisms of oral cavity // *Proc. SPIE*. 2000. Vol.4001. P.390–392.
13. Genina E.A., Bashkatov A.N., Simichkin Yu.P., Kochubey V.I., Lakodina N.A., Altshuler G.B., Tuchin V.V. *In vitro* and *in vivo* study of dye diffusion into the human skin and hair follicles // *J. Biomed. Opt.* 2002. Vol.7. P.471–477.

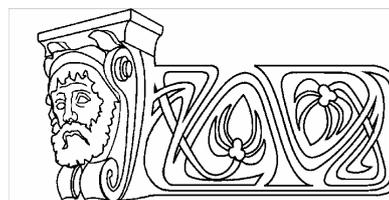
УДК 621.382.029.6

ИССЛЕДОВАНИЕ МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА В КАПСУЛИРОВАННЫХ ПОЛИМЕРОМ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛАХ: МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

А.В. Садовой, М.В. Медведев, В.Ф. Названов

Саратовский государственный университет,
кафедра физики твердого тела
E-mail: avsadovoy@info.sgu.ru

Проведено теоретическое исследование углового распределения рассеянного излучения слоями капсулированных полимером нематических жидких кристаллов для различных значений оптического пропускания. Расчет многократного рассеяния излучения проводился методом Монте-Карло, в качестве фазовой функции использовалось приведенное дифференциальное сечение рассеяния капель жидкого кристалла. Получены результаты, удовлетворяющие данным ранее проведенного эксперимента и расчета на основе приближения однократного рассеяния.



Multiple Light Scattering Investigation in Ppolymer Dispersed Liquid Crystals: Monte-Carlo Simulation

A.V. Sadovoi, A.V. Medvedev, N.F. Nazvanov

Theoretical investigation of angular dispersed of scattered light in polymer dispersed nematic liquid crystals with rather value of optical transmittance was presented in this article. Multiple light scattering was simulated by Monte-Carlo technique using differential cross section of liquid crystal droplet as a phase function. The obtained results have laid in the limits of experimental data and theoretical simulation based on anomalous diffraction approach.



Введение

В настоящее время капсулированные полимером жидкие кристаллы (КПЖК) являются перспективным материалом для развития элементной базы современной оптоэлектроники и информационных технологий. КПЖК представляют собой полимерную пленку с диспергированными в ней каплями жидких кристаллов (ЖК). В таких композициях сочетаются полезные качества, присущие как полимерам, так и ЖК, что позволяет разрабатывать на их основе гибкие дисплеи [1] и другие устройства обработки и отображения информации. Оптические и электрооптические свойства такого материала определяются в основном конфигурацией директора капель ЖК в полимере.

Наиболее распространенными методами описания рассеяния излучения в КПЖК являются приближения аномальной дифракции [2] и Рэлея–Ганса [3] для ЖК капель с размерами больше и меньше длины волны оптического излучения соответственно. Эти методы рассматривают рассеяние на одной капле ЖК и являются приближениями однократного рассеяния излучения. В работе [4] было введено понятие безразмерного электрического или магнитного полей, которое помогло связать однократное приближение рассеяния с влиянием управляющего поля на параметры капли ЖК.

В ряде работ были предприняты попытки улучшить приближение однократного рассеяния излучения введением усреднения по размерам капель [5], параметрам порядка капель [6] и применением теории эффективной среды [7]. Широко исследовалась также теория переноса излучения в приложении к КПЖК [8]. Все вышеперечисленные приближения хорошо описывают пропускание излучения через слой КПЖК, однако в случае углового распределения рассеянного излучения удовлетворяют эксперименту только в случаях низкой концентрации ЖК капель, большого пропускания света и малой толщины слоя КПЖК, то есть без учета влияния эффектов многократного рассеяния излучения в КПЖК.

Известны также работы, посвященные изучению многократного рассеяния излучения в КПЖК с помощью метода Монте-Карло [9–11]. Применение данного метода

моделирования рассеяния излучения в рассеивающих КПЖК слоях позволяет давать лучшее соответствие результатов расчета данным экспериментов.

Ранее в работе [12] нами были приведены результаты изучения углового распределения рассеянного излучения в сильно рассеивающих КПЖК слоях. Получено, что при значении пропускания КПЖК менее 90% приближение однократного рассеяния света не удовлетворяет экспериментальным данным углового распределения рассеянного излучения.

Настоящая работа посвящена моделированию углового распределения рассеянного излучения в капсулированных полимером жидких кристаллах методом Монте-Карло. Проведено сравнение результатов моделирования с ранее полученными данными эксперимента и расчета в приближении однократного рассеяния излучения [13].

Многократное рассеяние света в КПЖК

Расчеты проведены при предположении, что слой КПЖК состоит из нематических жидкокристаллических капель с радиусом $R = 2.4$ мкм, имеющих биполярную структуру [13]. Все капли однородно ориентированы в слое, но слой КПЖК имеет различную суммарную ориентацию директоров капель для различных величин управляющего поля и, следовательно, различных значений пропускания КПЖК слоя. Нами рассмотрены величины пропускания слоя $T = 10, 50$ и 90% . Показатели преломления полимерной матрицы, обыкновенного и необыкновенного луча в нематического ЖК принимались равными $n_p = 1.51$, $n_o = 1.51$ и $n_e = 1.71$ соответственно. Объемная доля ЖК в полимере составляла $C_v = 0.16$. Толщина слоя КПЖК равна $d_s = 107$ мкм. В модели излучение (с длиной волны $\lambda = 0.635$ мкм) падало по нормали к поверхности слоя КПЖК, параллельно направлению электрического поля, приложенного к образцу. Эффекты рассеяния на границах воздух – стеклянная подложка – слой КПЖК не учитывались.

Мы рассматривали падение на образец 1000 фотонов с максимальным числом актов рассеяния, равным 25.



При разыгрывании угла рассеяния фотона на ЖК капле в качестве фазовой функции принималась функция на базе дифференциального сечения рассеяния капли [13], которая записывается следующим образом:

$$\frac{\left[\frac{d\sigma}{d\Omega} \right]}{\sigma_0} = \frac{R^4 k^2}{4 \cdot (\pi R^2)} \left[|H(iv_e, kR \sin \delta)|^2 \cos^2(\alpha_0) + |H(iv_o, kR \sin \delta)|^2 \sin^2(\alpha_0) \right], \quad (1)$$

где $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ – дифференциальное сечение рассеяния капли ЖК, $\sigma_0 = \pi R^2$ – геометрическое поперечное сечение, \mathbf{k} – волновой вектор излучения, α_0 – угол поляризации.

$$H(iv_e, kR \sin \delta) = 2 \int_0^1 \left[1 - \exp(-x^2) \right]^{1/2} J_0(xkR \sin \delta) dx, \quad (2)$$

где δ – угол рассеяния излучения,

$$v_e = 2kR \left(\frac{n_e(\theta)}{n_o} - 1 \right), \quad (3)$$

$$n_e(\theta) = \left[\frac{\cos^2(\theta)}{n_o^2} + \frac{\sin^2(\theta)}{n_e^2} \right]^{-1/2}, \quad (4)$$

θ – угол между директором ЖК капли и направлением приложенного электрического поля, C_0 – функция Бесселя нулевого порядка.

Вид фазовой функции приведен на рис.1.

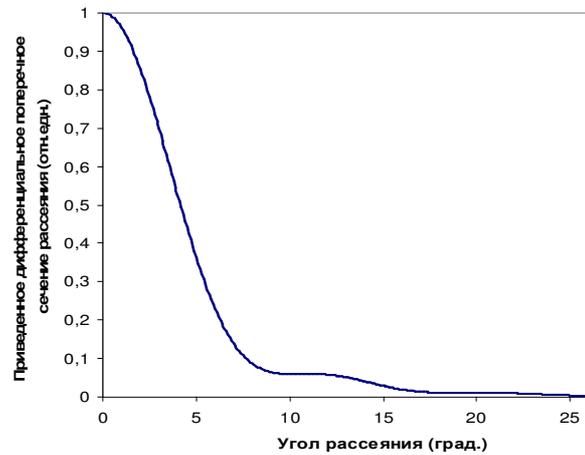


Рис. 1. Зависимость фазовой функции от угла рассеяния излучения ($n_p = 1.51, n_o = 1.51, n_e = 1.71, \alpha_0 = 0^\circ, \theta = 0^\circ, R = 2.4$ мкм)

Полученные результаты моделирования углового распределения рассеянного излучения методом Монте-Карло показаны на рис.2, на котором приведены ранее полученные результаты расчета в приближении однократного рассеяния излучения, а также результаты эксперимента.

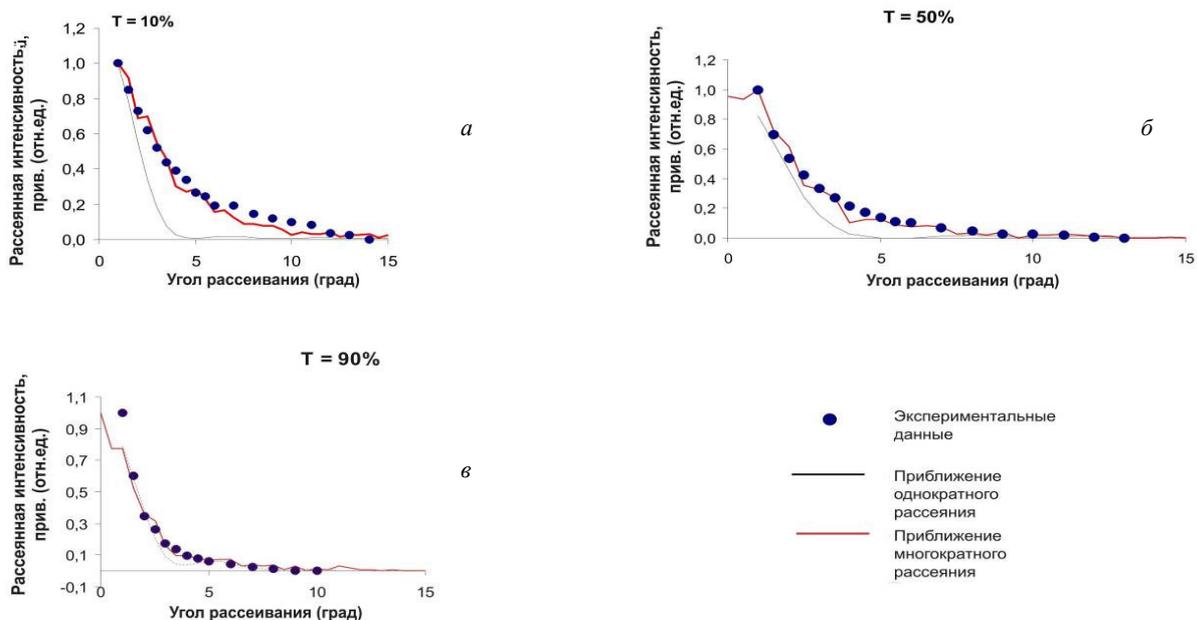


Рис. 2. Зависимости приведенного значения рассеянной интенсивности от угла рассеяния при пропускании слоя $T = 10\%$ (а), 50% (б), 90% (в)



Отметим, что приближение однократно-го рассеяния удовлетворяет данным эксперимента при $T = 90\%$, то есть при высоких управляющих полях. Моделирование же методом Монте-Карло удовлетворяет всем значениям пропускания КПЖК слоя. Стоит заметить, что при увеличении концентрации капель ЖК, толщины слоя КПЖК, разброса капель ЖК по размерам необходимо повышать точность метода моделирования многократного рассеяния с учетом указанных факторов.

Выводы

В работе приведены результаты моделирования многократного рассеяния излучения в слоях капсулированного полимером жидкого кристалла для различных величин пропускания 10%, 50% и 90% на базе метода Монте-Карло с постоянным шагом. В данной модели учитывалось лишь рассеяние, описываемое фазовой функцией, полученной на основе дифференциального сечения рассеяния ЖК каплей. Сравнение расчетов с данными эксперимента показано, что приближение однократного рассеяния излучения удовлетворяет данным эксперимента лишь при величине пропускания более 90%, что есть проявления эффектов многократного рассеяния излучения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 07-02-01467а).

Библиографический список

1. Chari Rankin Ch.M., Johnson D.M. Single-substrate cholesteric liquid crystal displays by colloidal self-assembly // Appl. Phys. Lett. 2006. Vol.88. P.043502.
2. Žumer S. Light scattering from nematic droplets: Anomalous-diffraction approach // Phys. Rev. A. 1988. Vol.37, №10. P.4006–4015.
3. Žumer S., Doane J.W. Light scattering from a small nematic droplet // Phys. Rev. A. 1986. Vol.34, №4. P.3373–3386.
4. Kelly J.R., Palfy-Muhoray P. The optical Response of polymer dispersed liquid crystals // Mol. Cryst. Liq. Cryst. 1994. №243. P.11–19.
5. Aphonin O.A., Nazvanov V.F. Light transmission, linear dichroism and birefringence of nematic/polymer dispersions // Liq. Cryst. 1997. Vol.23, №6. P.845–859.
6. Vicari L. Electro-optic phase modulation by polymer dispersed liquid crystals // J. Appl. Phys. 1997. Vol.81, №10. P.6621–6615.
7. Cox S.J., Reshetnyak V.Yu., Sluckin T.J. Effective medium theory of light scattering in polymer dispersed liquid crystal films // J. Phys. D: Appl. Phys. 1998. №31. P.1611–1625.
8. Dick V.P., Loiko V.A. Model for coherent transmittance calculation for polymer dispersed liquid crystal films // Liq. Cryst. 2001. Vol.28, №8. P.1193–1198.
9. Delica S., Blanca C.M. Monte Carlo model of light scattering in polymer dispersed liquid crystals: polarization effects and defects // Mol. Cryst. Liq. Cryst. 2004. №412. P.501–511.
10. Kelly J.R., Wei W. Multiple scattering in polymer dispersed liquid crystals // Liquid Crystals. 1993. Vol.14, №6. P.1683–1694.
11. Neijen J., Botts H., Paulissen J. Multiple scattering of light from polymer dispersed liquid crystal material // Liq. Cryst. 1997. Vol.22, №3. P.255–264.
12. Садовой А.В., Названов В.Ф. Угловое распределение рассеянного света в капсулированных полимером жидких кристаллах // Проблемы оптической физики. Саратов: Изд-во Сарат. ун-та, 2005.
13. Жаркова М., Сонин А. Жидкокристаллические композиции. Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1994.

УДК 539.194

КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ И СТРУКТУРНО-ДИНАМИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ФОСФОРОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ (GB-,GD-, GF-AGENTS)

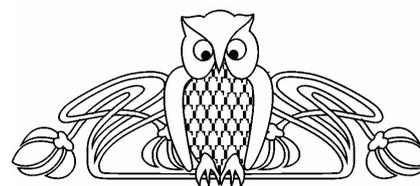
П.М. Элькин, А.С. Кладиева*, И.И. Гордеев*

Саратовский государственный технический университет

* Астраханский государственный университет

E-mail: elkinmd@mail.ru

На основании модельных неэмпирических расчетов электронной структуры на примере известных фосфорорганических соединений – зарина, зомана и циклозарина (GB-,GD-, GF-



Agents) показана возможность предсказательных расчетов ИК и КР спектров высокотоксичных фосфорорганических соединений.



Vibrational Spectra and Structural Dynamic Models of Gb-, Gd-, Gf-Agents

P.M. Elkin, A.S. Kladieva, I.I. Gordeev

An analysis of vibrational spectra of sarine, sorine, cyclosarine (GA-, GB-, GD-, GF-Agents) is carried out by the method DFT/B3LYP in the anharmonic approximation. It is possible to use the second order of anharmonic theory of vibrational spectra for the predictional calculation in phosphororganic compounds

Введение

Большое количество высокотоксичных соединений, которые могут представлять экологическую угрозу, еще не синтезированы и не изучены. Ограничение наложено Международной конвенцией о запрещении химического оружия. В научных целях разрешенный Конвенцией синтез может использовать спектральные методы для построения структурно-динамических моделей исследуемых соединений. К таким методам следует отнести и колебательную спектроскопию, в которой прослеживаются два обладающих предсказательными возможностями теоретических подхода.

Первый подход, заявленный в работе [1], опирается на известный фрагментарный метод [2] и использует библиотеку силовых постоянных изученных молекулярных фрагментов. До недавнего времени он был доминирующим теоретическим методом ИК спектроскопии при осуществлении предсказательных расчетов сложных молекулярных систем. На то были веские причины, главная из которых – недостаточная точность имеющихся квантовых методов в оценке таких параметров адиабатического потенциала, как силовые постоянные. Тонким местом подхода считалась предложенная в [2] методика сшивки фрагментов, а также база данных метода для циклических фрагментов, где возникает проблема выбора независимых координат. Нельзя списывать со счетов и определенный произвол при формировании базы данных фрагментарного подхода для силовых постоянных и электрооптических параметров изученных молекулярных фрагментов, поскольку подавляющее большинство указанных молекулярных параметров было получено путем решения обратных колебательных задач [3]. Для этого требовалось

наличие экспериментальных данных по частотам и интенсивностям изотопозамещенных соединений при условии, что интерпретация спектров проведена надежно. Возникающие на этом пути трудности хорошо известны и подробно описаны в диссертации [3]. Тем не менее для базовых соединений и фрагментов органической химии удалось получить оценку гармонических силовых постоянных и электрооптических параметров, что может служить ориентиром при построении структурно-динамических моделей тех соединений, для которых экспериментальные данные представлены ограниченно.

Второй подход использует неэмпирические квантовые методы расчета структуры и спектров многоатомных молекул. В настоящее время этот подход становится доминирующим в предсказательных расчетах колебательных спектров сложных молекулярных соединений, а получаемые результаты, представленные, к примеру, в работах [3–4], следует считать обнадеживающими. Особенно это касается квантовых методов, связанных с использованием DFT подхода [5].

Критические замечания в адрес неэмпирического подхода, высказанные в публикации [1], справедливы и, несомненно, будут учтены разработчиками соответствующей версии программного обеспечения. В программных комплексах последнего поколения появилась возможность анализа ангармонизма колебаний [5]. Это позволяет провести теоретический анализ ангармонических резонансных эффектов, поскольку фрагменты большинства фосфорорганических соединений имеют близкие по частотам фундаментальные колебания в различных диапазонах спектра.

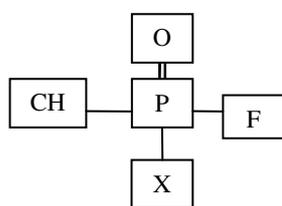
В данной работе на примере известных высокотоксичных фосфорорганических соединений – зомана, зарина и циклозарина, имеющих общий токсичный фрагмент P(F, O, CH₃), – показана возможность применения неэмпирических квантовых методов для предсказательных расчетов геометрической структуры и колебательных спектров фосфорорганических соединений с точностью, достаточной для спектральной идентификации этих соединений. Расчеты спектров осуществлены



в ангармоническом приближении теории молекулярных колебаний. Предпочтение отдано неэмпирическому квантовому методу DFT/B3LYP / 6-31(6-311)G^(**) [5].

Результаты расчета и их обсуждение

Исходные молекулярные модели исследуемых соединений приведены на рисунке. При этом следует учесть наличие различных конформаций, связанных с внутренним вращением молекулярных фрагментов. Это обусловлено взаимным расположением указанных фрагментов относительно «мостика» СРО. Заметим, что в классических расчетах в первом подходе внутреннее вращение относительно молекулярной связи считалось, как правило, свободным или почти свободным и при решении обратных задач не учитывалось. В квантовых расчетах это обременительное предположение не привлекается, а оптимизация геометрии и воспроизведение частот торсионных (крутильных) колебаний является одним из критериев достоверности предлагаемой структурно-динамической модели многоатомной молекулы.



GD-, GF-, GB -AGENTS

Поскольку мы не располагаем надежными литературными данными по структуре и спектрам исследуемых фосфорорганических соединений, то естественным является подход, связанный с моделированием адиабатического потенциала соединений, который исходит из возможных конформационных моделей и применения различных базисных наборов в методе функционала плотности [5].

Для молекулярных фрагментов, составляющих фосфорорганические соединения, мы ограничились четырьмя базисными наборами 6-31G^(**) и 6-311G^(**). Два первых

набора хорошо зарекомендовали себя при расчете парафиновых, непредельных и ароматических углеводородов [4], остальные – в пробных расчетах ряда фосфорорганических соединений [6].

Описанная процедура моделирования структуры и спектров позволяет выяснить влияние базиса на структурные (длины валентных связей, валентных и двугранных углов между фрагментами, полученными при оптимизации геометрии) и динамические (частоты фундаментальных колебаний, интенсивности в спектрах ИК и КР) параметры соединений. Кроме того, если исходить из теории характеристических колебаний указанных выше углеводородов, на этом пути появляется возможность оценить торсионные колебания отдельных фрагментов соединений, что в спектроскопии считается непросто задачей.

Для атомов углерода и фосфора имеет место гибридизация sp_3 . Атом кислорода образует мостик между фрагментами парафиновых углеводородов и фенольного кольца с фрагментом, центральный атом которого фтор. Для парафиновых углеводородов и монозамещенных бензола геометрические параметры и частоты фундаментальных колебаний известны [7]. Они хорошо воспроизводятся неэмпирическими квантовыми расчетами в рамках метода функционала плотности, если осуществлять расчеты в ангармоническом приближении теории молекулярных колебаний. Это подтверждается расчетами колебательных спектров табуна, зомана, зарина и бензофенона соответственно, представленными в работах [6, 8]. Однако указанные расчеты следует считать предварительным этапом построения структурно-динамических моделей рассматриваемых соединений. Анализ влияния базиса квантового метода, внутреннего вращения отдельных фрагментов и их взаимного расположения на результаты теоретического исследования колебательных спектров в указанных работах не проводился. Такой анализ необходим, поскольку экспериментальными данными в низкочастотной области спектра (ниже 400 см^{-1}) мы не располагаем.



Модельный гамильтониан, выбранный для решения ангармонической колебательной задачи во втором порядке теории возмущения, имеет следующий вид [7]:

$$H^{(v)} = \frac{1}{2} \{ [P_a T^{ab} P_b] + F_{ab} Q^a Q^b + [F_{abc} Q^a Q^b Q^c] + [F_{abcd} Q^a Q^b Q^c Q^d] \}, \quad (1)$$

где T^{ab} – контравариантный метрический тензор, Q^a – естественные колебательные координаты, P_a – соответствующие им операторы импульсов; P_{ab} – квадратичные, F_{abc} – кубические, F_{abcd} – квартичные силовые постоянные.

Решение уравнения (1) приводит к известному выражению для колебательных уровней энергии, которое с математических позиций можно рассматривать как разложение энергии состояния в ряд по колебательным квантовым числам (ряд по дискретным переменным):

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

где ω_s (см⁻¹) – частоты гармонических колебаний, χ_{sr} (см⁻¹), – поправки ангармонического приближения, v_s – квантовые числа колебательного состояния. Везде предполагается суммирование по индексам правой части соотношений.

Явный вид выражений для коэффициентов χ_{sr} , являющихся функциями гармонических частот колебаний, ангармонических силовых и кинематических постоянных, резонансных выражений вида $1 / (\omega_s \pm \omega_r \pm \omega_t)$, приведен в монографии [3].

Анализ параметров адиабатического потенциала осуществлялся для различных конформеров исследуемых фосфорорганических соединений, отличающихся расположением тетраэдрических фрагментов относительно соединяющего их мостика SOP. Критерием выбора пространственной конфигурации фрагментов C-CH₃ являлось воспроизведение соответствующих крутильных колебаний.

Согласно проведенным расчетам выбор базиса и модели конформера несущественно

влияют на длины связей общего фрагмента зарина, зомана и циклозарина: CO = 1.46–1.47 Å, OP = 1.6–1.62 Å, PO = 1.47–1.48 Å, PF = 1.60–1.61 Å, PC = 1.8–1.81 Å. Разброс в значении угла мостика SOP составляет 120.3–126.9° и определяется моделью конформера. Изменение остальных углов зависит от базиса и лежит в диапазонах: OPO = 114.1–118°, OPF = 101.8–102.8°, OPC = 100.9–106.7°; FPO = 11.6–114.3, SOP = 116.2–118.6°, FPC = 100.9–102.7°. Наибольший разброс имеет место для зарина. Для табуна значения длин валентных связей и валентных углов фрагмента, связанного с атомом фосфора, попадают в интервалы: PN = 1.65 Å, SOP = 120.7–120.8°, OPO = 119.3–119.6°, OPN = 100.7–102°; CPO = 109.8–110.1°, NPO = 116–116.3°, CPN = 106.8–106.9°. Отметим, что в исходных моделях все валентные углы для атомов с гибридизацией SP₃ полагались тетраэдрическими.

Расчетные значения двухгранных углов между плоскостью мостика SOP и плоскостями тетраэдрического фрагмента, содержащего атом фосфора, определяется как исходной моделью конформера, так и выбранным базисом для различных молекул. При задании исходных данных одна из связей PX (X = F, O, C) полагалась компланарной плоскости мостика SOP, а остальные связи лежали в плоскостях, полученных поворотом на 120° относительно исходной. Исходная компланарность нарушается более чем на 9°. Изменения углов между плоскостями OPX и OPY (X, Y = F, O, C) от исходного значения $d = 120^\circ$ достигает 15° лишь в зарине для одной из моделей в базисе 6–311G. В остальных молекулах остается в пределах 5°, а для метильных групп не превосходит 1.5°. Отступление от тетраэдрических значений валентных углов метильных групп лежит в пределах 1°.

Интересными представляются результаты моделирования геометрической структуры циклозарина. Исходные три модели определяются положением мостика SOP относительно плоскости фенильного кольца, а углы между плоскостями – π , $\pi/2$, $\pi/4$ соответственно. С учетом описанных выше конформа-



ций фрагмента, содержащего центральный атом фосфора относительно связи СО, имеем 32 исходные модели.

Оптимизация геометрии приводит к трем конформерам: одной – для случая, когда в исходной модели компланарны связи СО, ОР, РО(РF), две – в случае компланарности связей СО, ОР, РС. На длинах валентных связей и валентных углов обоих фрагментов это практически не сказывается ($\Delta Q \sim 0.005 \text{ \AA}$; $\Delta\beta \sim 1.2^\circ$) и является результатом накопления ошибок в численных методах оптимизации геометрии в неэмпирических расчетах методами функционала плотности. Для первой конформационной модели угол между плоскостью мостика СОР и фенильным кольцом лежит в интервале $41.3\text{--}42.6^\circ$. Для двух других конформеров: $48.1\text{--}49.1^\circ$ (модели π , базис 6–31G) и $67.5\text{--}67.9^\circ$ (модели $\pi/2$, $\pi/4$, базис 6–31G), $44.0\text{--}44.7^\circ$ (модели π , базис 6–311G) и $66.1\text{--}67.8^\circ$ (модели $\pi/2$, $\pi/4$, базис 6–311G).

Расчеты в ангармоническом приближении на значениях длин валентных связей и валентных углов практически не сказываются, изменения затрагивают третий знак мантиссы.

Расчитанные минимумы адиабатических потенциалов для конформеров зарина, зомана, циклозарина и табуна попадают соответственно в интервалы: $-750.18 - -750.33$; $-828.81 - -828.98$; $-863.29 - -863.46$; $-798.48 - -798.64$ а.е. К понижению значения минимума адиабатического потенциала приводит переход к базису 6–311G и учет поляризационных эффектов.

Частоты фундаментальных колебаний второго фрагмента, отвечающего за токсичные свойства соединений, следует считать результатами предсказательного расчета в табл. 1–3, поскольку приведенные нами экспериментальные данные [6] являются весьма ограниченными и представлены в диапазоне $600\text{--}4000 \text{ см}^{-1}$ в большинстве случаев лишь спектрограммами. Характер поведения интенсивности полос в ИК спектрах для одинаковых молекулярных фрагментов парафиновых углеводородов указывает на характерность соответствующих колебаний для

всех рассматриваемых соединений и хорошо согласуется с экспериментом. Специфичным является и характер спектра второго фрагмента. Здесь легко идентифицируются валентные колебания связей РО, РN, NC, РN. Что касается деформационных колебаний этого фрагмента, то их можно считать характеристическими по частотам и формам колебаний, однако использование этих полос для идентификации соединений проблематично ввиду слабой интенсивности в спектрах ИК и КР.

Анализ внутреннего вращения отдельных фрагментов относительно мостика РОС показывает на несущественное смещение фундаментальных состояний. Это смещение лежит в пределах $\sim 10\text{--}15 \text{ см}^{-1}$ и, согласно оценкам из работы [1], на процедуре идентификации соединений по их колебательным спектрам не сказывается. Однако интенсивность ряда полос парафиновых фрагментов изменяется существенно. Именно по ним можно судить о конформации метильных групп относительно мостика РОС. Более подробный анализ внутреннего вращения в соединениях данного класса является предметом дальнейшего исследования авторов.

Таблица 1

Интерпретация колебательного спектра фрагмента СОР-СН₃FO в молекуле зомана (C₇H₁₂FO₂P)

Форма колебаний	ν_{exp} [9]	ν_m , см^{-1}	ИК, Км/моль	КР, $\text{А}^4/\text{аеи}$
Qp=о	1276	1272–1282	168–197	4.16–4.82
Qco	1016	991–1007	244–308	3.71–4.47
Qop	–	960–971	315–365	1.41–4.54
Qpf	840	796–832	82.5–114	1.92–3.92
Qpc	–	713–724	25.3–37.9	12.3–17.5
βoro	–	447–489	17.5–29.7	2.49–4.61
βopc	–	425–447	11.6–37.2	0.56–2.44
αopf	–	386–402	9.51–14.6	1.99–2.93
αopc	–	248–275	0.15–0.74	0.09–0.6
βopf	–	228–234	0.31–1.03	0.18–0.97
βopc	–	124–140	6.5–8.79	0.30–0.57

Примечание. Обозначения форм колебаний соответствуют принятым в работе [7].



Таблица 2

Интерпретация фундаментальных колебаний фрагмента COP-CH₃FO в циклозарине (оптимизированная модель 1)

Форма колебаний	Неэмпирические квантовые методы											
	6-31G*			6-31G**			6-311G*			6-311G**		
	ν_m , см ⁻¹	ИК, КМ/моль	КР, А ⁴ /аеи	ν_m , см ⁻¹	ИК, КМ/моль	КР, А ⁴ /аеи	ν_m , см ⁻¹	ИК, КМ/моль	КР, А ⁴ /аеи	ν_m , см ⁻¹	ИК, КМ/моль	КР, А ⁴ /аеи
Qp=о	1274	142	5.54	1272	135	5.39	1270	154	6.28	1268	145	6.23
Qop	941	168	1.02	938	342	1.14	936	338		931	406	1.29
Qpf	836	90.6	2.30	834	86.7	2.33	804	128	2.05	803	127.4	1.97
Qpc	751	37.3	2.53	751	37.9	2.55	745	36.9	2.20	744	40.3	2.16
βopf	446	41.8	4.67	446	42.4	4.72	445	47.7	4.98	445	47.7	4.98
βоро	412	32.6	3.13	412	30.4	2.89	413	19.2	1.40	413	15.6	1.11
βfpo	371	7.90	1.79	370	7.70	1.76	366	8.55	2.07	366	8.50	2.03
βcco	309	3.76	1.37	309	3.85	1.38	309	3.97	1.35	309	3.96	1.34
βcro	258	3.19	2.78	259	3.29	2.79	258	3.56	2.84	258	3.66	2.85
βorc	222	0.93	0.96	222	0.93	0.99	225	1.00	1.31	225	0.99	1.31
βcop	111	5.99	0.77	112	6.10	0.73	108	6.61	0.71	108	6.66	0.70

Примечание. Обозначения см. табл. 1.

Таблица 3

Интерпретация фундаментальных колебаний фрагмента COP-CH₃FO в циклозарине (оптимизированные модели 2 и 3)

Форма колебаний	Неэмпирические квантовые методы											
	6-31G*(**)						6-311G*(**)					
	Модель π2, π/4			Модель π			Модель π2, π/4			Модель π		
	ν_m , см ⁻¹	ИК, КМ/моль	КР, А ⁴ /аеи	ν_m , см ⁻¹	ИК, КМ/моль	КР, А ⁴ /аеи	ν_m , см ⁻¹	ИК, КМ/моль	КР, А ⁴ /аеи	ν_m , см ⁻¹	ИК, КМ/моль	КР, А ⁴ /аеи
Qp=о	1292	120	4.68	1278	128	5.33	1293	281	9.73	1274	148	6.57
Qop	936	302	1.84	942	395	2.18	937	229.	1.66	938	383	1.52
Qpf	819	48,9	3.03	846	82.4	3.78	792	123	1.75	819	63.3	0.89
Qpc	746	2,63	1.82	750	12.4	1.75	742	10.4	0.89	751	37.3	2.53
βopf	455	30,1	1.52	465	53.4	3.99	457	31.9	1.54	464	60.7	4.40
βоро	411	26,4	2.04	414	29.1	2.13	409	30.6	2.27	412	34.5	2.38
βfpo	336	9,93	1.28	325	6.36	1.30	335	11.6	1.25	324	5.34	1.23
βcco	317	5,88	4.07	303	5.52	1.75	319	5.25	4.09	298	7.70	2.14
βcro	257	1,26	1.51	264	2.58	2.17	259	1.91	1.62	262	2.75	1.96
βorc	242	0,53	1.24	240	0.06	1.50	243	0.61	1.52	243	0.05	1.74
βcop	102	0,22	1.92	114	2.98	1.44	172	0.10	0.28	178	0.30	0.79

Примечание. Обозначения см. табл. 1.



Таблица 4

Предсказательный спектр фундаментальных колебаний зарина (C₄H₁₀FO₂P)

Форма колебаний [7]	ν_{exp} [9]	ν_h	ν_{anh}	ИК, КМ/МОЛЬ	КР, А ⁴ /а ^{ем}	Форма колебаний [7]	ν_{exp} [9]	ν_h	ν_{anh}	ИК, КМ/МОЛЬ	КР, А ⁴ /а ^{ем}
β_{CH_3}	1487	1538	1481	5.8	3.3	β_{PCH}	-	940	908	31	4.2
β_{CH_3}	1468	1525	1470	5.1	25	Q _{CC}	867	896	871	8.7	7.4
β_{CH_3}	1468	1516	1460	0.1	16	Q _{PF}	-	847	821	96	2.1
β_{CH_3}	1460	1511	1459	1.2	12	Q _{PC}	-	770	769	18	2.7
β_{CH_3}	1452	1492	1438	4.1	13	Q _{CO}	-	723	684	21	21
β_{CH_3}	1452	1491	1434	7.2	16	β_{oro}	-	499	475	31	5.8
β_{CH_3}	1390	1449	1399	10	3.9	β_{CC}	-	475	461	16	0.6
β_{CH_3}	1372	1437	1381	15	2.9	β_{OPF}	-	424	429	8.1	1.7
β_{CH_3}	1335	1399	1357	3.9	4.5	β_{CC}	375	404	395	15	1.7
β_{OCH}	-	1395	1336	11	11	α_{orc}	-	370	354	12	0.8
β_{PCH}	-	1382	1328	35	1.7	β_{OCC}	-	307	302	3.3	1.1
Q _{PO}	1292	1306	1312	179	4.2	xx	-	260	264	1.4	0.4
β_{CC}	1152	1215	1181	10	2.2	α_{FPC}	-	253	258	0.7	0.7
β_{OCC}	-	1172	1134	12	3.7	β_{OPC}	-	239	236	2.3	1.1
β_{SCH}	-	1145	1108	46	2.7	xx	207	222	222	0.1	0.1
Q _{OP}	-	1010	989	500	3.4	xx	-	173	146	0.1	0.1
β_{PCH}	974	963	936	78	0.9	β_{cop}	-	142	141	8.8	0.5
β_{SCH}	923	960	931	4.4	1.5	xx	-	64	56	1.4	0.1
β_{PCH}	-	950	926	1.3	2.2	xx	-	33	33	1.6	0.2

Примечание. Обозначения см. табл. 1.

Выводы

1. Неэмпирические расчеты колебательных спектров приведенных фосфорорганических соединений указывают на возможность их привлечения для предсказательных расчетов конформационной структуры и молекулярных параметров в колебательных спектрах и других молекул, принадлежащих к классу фосфорорганических соединений.

2. Наличие большого количества атомов водорода требует проведения расчетов в ангармоническом приближении.

3. Внутреннее вращение отдельных фрагментов парафинового остова незначительно сказывается на интенсивности полос в спектрах, однако частоты крутильных колебаний воспроизводятся лишь для *трансконформаций* относительно связи С – С.

4. Конформация фрагмента, содержащего атом фтора, относительно парафинового фрагмента заметно сказывается на расчетных значениях интенсивностей в низкочастотном диапазоне (ниже 600 см⁻¹).

5. Изменение длин валентных связей и значений валентных углов для парафинового фрагмента находится в границах, приведенных в монографии [7] для парафиновых углеводородов, не сказывается на положении полос валентных и деформационных колебаний алкильных групп.

Библиографический список

1. Мясоедов Б.Ф., Грибов Л.А., Павлючко А.И. Фрагментарные методы расчета ИК спектров фосфорорганических соединений // Журн. структ. химии. 2006. Т.47, №1. С.449–456.



2. Грибов Л.А., Дементьев В.А. Методы и алгоритмы вычислений в теории колебательных спектров молекул. М.: Наука, 1981. 356 с.
3. Березин К.В. Квантово-механические модели и решение на их основе прямых и обратных спектральных задач для многоатомных молекул: Автореф. дис. ... д-ра физ.-мат. наук. Саратов, 2004. 36 с.
4. Пулин В.Ф., Элькин М.Д., Березин В.И. Исследование динамики молекулярных соединений различных классов. Саратов, 2002. 546 с.
5. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. Gaussian 03. Revision B.03. Pittsburg PA: Gaussian Inc., 2003.
6. Элькин П.М., Пулин В.Ф., Кладиева А.С. Методы оптической физики в экологическом мониторинге фосфорорганических соединений // Вестн. Саратов. гос. техн. ун-та. 2007. №2(25). С.177–182.
7. Свердлов Л.М., Ковнер М.А., Крайнов Е.П. Колебательные спектры многоатомных молекул. М., 1970. 550 с.
8. Элькин П.М., Пулин В.Ф., Гордеев И.И. Электронная структура и колебательные спектры бензофенона // Вестн. Саратов. гос. техн. ун-та. 2007. №2(25). С.51–56.
9. Organisation for the prohibition of chemical weapons. Cert. № DB/007. 2001.

УДК 681.322

РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ КЛАССИФИКАЦИИ И ДИАГНОСТИКИ ОФТАЛЬМОЛОГИЧЕСКИХ ЗАБОЛЕВАНИЙ НА ОСНОВЕ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

В.В. Бакуткин, Ю.Н. Зайко*, А.С. Лепеско*, А.Н. Скиданов*

Центр коррекции зрения НУЗ ДКБ ст. Саратов-II ОАО РЖД
* Поволжская академия государственной службы
им. П.А. Столыпина
E-mail: yuriyz@mail.ru

Разработаны система и методика классификации и диагностики глазных заболеваний (или различных стадий конкретного заболевания – глаукомы) с помощью искусственных нейронных сетей (ИНС). Классификация выполняется с помощью самоорганизующихся сетей Кохонена, а диагностика – с помощью ИНС перцептронного типа

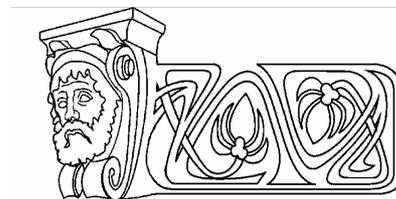
Developing the System of Classification and Diagnostics for Ophthalmology Diseases with the Help of Artificial Neural Networks

V.V. Bakutkin, Y.N. Zayko, A.S. Lepesko, A.N. Skidanov

The system and methodology of classification and diagnostics of ophthalmology diseases (or different stages of particular disease, namely, glaucoma) on the basis of artificial neural networks (ANN) are presented. Classification is made using the selforganising Kohonen maps. Diagnostics is performed with the help of ANN of perceptron type.

Введение

Понятие нейронных сетей появилось в прошлом веке. Нейронные сети моделируют работу нейронов мозга человека. С помощью нейронных сетей удалось решить много задач, которые трудно решить обычными способами, например: распознавание образов,



адаптивное управление, аппроксимация функционалов, прогнозирование, создание экспертных систем, организация ассоциативной памяти и т.д. В задачах, где традиционные технологии бессильны, нейронные сети часто выступают как единственная эффективная методика решения.

Среди задач обработки изображений известны такие как фильтрация и восстановление изображений, сегментация изображений, сжатие изображений. Проблемы распознавания изображений кроме классической задачи распознавания фигур заданной формы на изображении ставят новые задачи распознавания линий и углов на изображении, распознавания края изображения. В целом проблема распознавания образов состоит из двух частей: обучения и непосредственного распознавания. Обучение осуществляется путем показа отдельных объектов с указанием их принадлежности тому или другому образу. В результате обучения распознающая система должна приобрести способность отвечать



одинаковыми реакциями на все объекты одного образа и различными – на все объекты различных образов. Очень важно, что процесс обучения должен завершиться путем показов конечного числа объектов без каких-либо других подсказок. В качестве объектов обучения могут быть либо картинки, либо другие визуальные изображения (буквы), либо различные явления внешнего мира, например звуки, состояния организма при медицинском диагнозе, состояние технического объекта в системах управления и др. В процессе обучения указываются только сами объекты и их принадлежность образу. За обучением следует процесс распознавания новых объектов, который характеризует действия уже обученной системы. Автоматизация этих процедур и составляет проблему обучения распознаванию образов. В том случае, когда человек сам разгадывает или придумывает, а затем навязывает машине правило классификации, проблема распознавания решается частично, так как основную и главную часть проблемы (обучение) человек берет на себя.

Основной компонент нейронной сети – нейрон – выглядит как устройство, напоминающее усилитель с большим числом входов и одним выходом. Другим важным компонентом искусственных сетей (ИНС) являются связи между нейронами. Различие между подходами и методами в теории ИНС заключается в деталях представлений о работе нейрона и, конечно, в представлениях о работе связей. Устройства нейроинформатики являются связевыми системами. В отличие от цифровых микропроцессорных систем, представляющих собой сложные комбинации процессорных и запоминающих блоков, нейропроцессоры содержат память, распределенную в связях между простыми процессорами. Тем самым основная нагрузка на выполнение конкретных функций процессорами ложится на архитектуру системы, детали которой, в свою очередь, определяются межнейронными связями.

В последние десятилетия в мире бурно развивается новая прикладная область математики, специализирующаяся на ИНС [1–6].

Нейросетевые методики, используемые для решения задач распознавания изображений

Среди задач распознавания образов, имеющих непосредственное отношение к офтальмологии, можно выделить следующие:

- кластеризация (классификация) изображений;
- диагностика;

Первая задача возникает, когда перед врачом-офтальмологом стоит проблема разбиения множества первичных изображений больного глаза на некоторые устойчивые классы (кластеры) для последующей диагностики.

Вторая задача связана непосредственно с диагностикой, т.е. отнесением новых изображений к уже существующим классам.

Для решения первой задачи используют самоорганизующиеся карты Кохонена [7, 8]. Вторая задача решается с помощью ИНС типа многослойного перцептрона [1].

Самоорганизующиеся нейронные сети (карты) Кохонена (СНСК) обеспечивают топологическое упорядочивание входного пространства образов. Они позволяют топологически непрерывно отображать входное n -мерное пространство в выходное m -мерное, причем, $m \ll n$. Входной образ проецируется на некоторую позицию в сети, кодируемую как положение активированного узла. В отличие от большинства других методов классификации и кластеризации, топологическое упорядочивание классов сохраняет на выходе подобие во входных образах, что является особенно полезным при классификации данных, имеющих большое количество классов. Например, при классификации локальных участков изображений может быть очень большое число классов, в которых переход от одного класса к другому практически непрерывен, затрудняя определение границ классов. Сети такого типа состоят из одного слоя (не считая входного), который также может быть организован в n -мерную решётку в зависимости от размерности выходного пространства. Каждый нейрон промежуточного слоя связан со всеми входными нейронами. Настройка весов сети осуществляется методом конкурентного обучения, в процессе которого изменяются только веса нейрона-



победителя, имеющего максимальную активность. Существует также метод, в котором изменяются и веса нейронов, соседних с победителем. В самоорганизующихся картах Кохонена (СКК), в отличие от векторных квантователей, нейроны решётки имеют связи с соседними нейронами, сила связей зависит от расстояния между ними. Для СНСК характерна высокая скорость обучения.

Решение задачи классификации различных стадий глаукомы [9]

Традиционно термин «глаукома» объединяет большую группу заболеваний глаза, характеризующуюся постоянным или периодическим повышением внутриглазного давления из-за нарушения оттока влаги из глаза. Следствием повышения давления является развитие характерных для глаукомы нарушений зрительных функций и атрофии с экскавацией зрительного нерва (рис. 1).

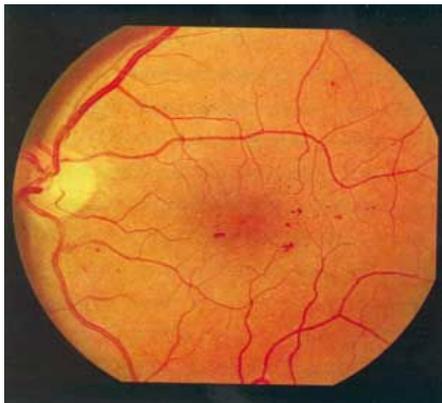


Рис. 1

Глаукома разделяется на врожденную и приобретенную. Врожденная глаукома встречается не так часто, и лечение (хирургическое) проводят в детских отделениях больниц в раннем возрасте. На практике, чаще всего, приходится сталкиваться с первичной открытоугольной глаукомой, которая вначале протекает незаметно для человека (нет ухудшения зрения, боли, «пелены»). Это, в свою очередь, приводит к прогрессированию заболевания и врачам-офтальмологам приходится сталкиваться с тяжелыми, запущенными случаями, когда встает вопрос только о сохранении остаточного зрения, а порой –

о снятии болевого синдрома, чтобы сохранить глаз.

В приобретенных формах глаукомы выделяют: возрастную (первичную открытоугольную и закрытоугольную глаукому), вторичную, которая связана с травмами глаза и другими заболеваниями глаза или организма (например, сахарный диабет), последствиями перенесенных глазных операций (например, катаракты) или воспалений (например, увеит, иридоциклит).

Вторым по встречаемости видом глаукомы является закрытоугольная. Она почти всегда проявляется острыми приступами (с выраженным болевым синдромом, ухудшением зрения). В данном случае требуется срочная помощь – госпитализация и проведение срочной антиглаукоматозной операции.

Важным моментом работы с ИНС является представление обучающих данных. ИНС оперируют числовой информацией. Для решения поставленных задач необходимо получить адекватное числовое представление изображений, соответствующих различным стадиям глаукомы.

Изначально изображения представлены в виде фотографий с расширением jpeg с шириной 300 точек и высотой 294 точки, горизонтальное и вертикальное разрешение – 96 точек на дюйм, размером 12 кб и глубиной цвета 24 бита (см. рис. 1).

Для дальнейшей работы с изображением, чтобы прочесть его по байтам, нам необходимо уменьшить размер картинки и убрать фон, так как эта информация является лишней. К тому же количество входов нейронной сети не превышает 127. Для обработки изображений нами использовался графический пакет Adobe Photoshop, который использует каналы в двух целях: для хранения цветовой информации и для хранения областей. Сначала убирается цвет изображения, так как с глубиной 24 бита оно представляет слишком большой массив данных. Для этого необходимо убрать RGB канал и установить значение «градиент серого цвета», что позволит нам убрать цвет и сделать рисунок монохромным с порогом 50% и глубиной цвета в 1 бит (рис. 2).



Рис. 2

Это позволяет нам представить графический образ большого глаза в виде массива байтов для обработки с помощью самоорганизующейся карты Кохонена и их дальнейшей классификации.

Термин «классификация» подразумевает отнесение некоторого образа к некоторому классу по совокупности признаков. Границы классов определены достаточно точно: образ относится к данному классу, если известно, что он обладает необходимым числом при-

знаков, характерных для этого класса. В результате предварительной обработки изображений был получен материал, использованный затем для работы с ИНС, частично показанный на рис. 3.

Далее данные заносятся на лист MS Excel в виде таблицы, из которой впоследствии загружаются в ИНС для определения числа кластеров, т.е. проведения классификации. Недостатком ИНС, используемых для решения этой задачи, является то, что надо заранее указать число кластеров. В нашем случае оно равно трем, что соответствует трем различным состояниям глаза, включая и норму. При работе с сетью Кохонена используется «обучение без учителя», при котором используются только входные параметры. Такие алгоритмы предназначены для нахождения кластеров во входных данных. В результате проведенного исследования видно, что самоорганизующаяся карта Кохонена выявила три разные группы и внутри групп имеется взаимосвязь данных (рис. 4).

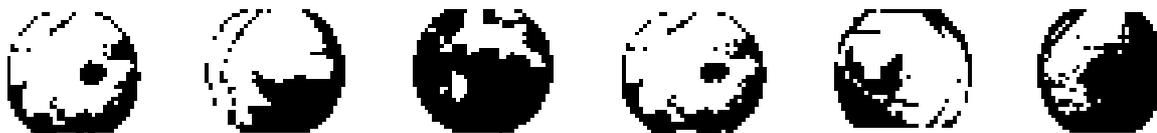


Рис. 3

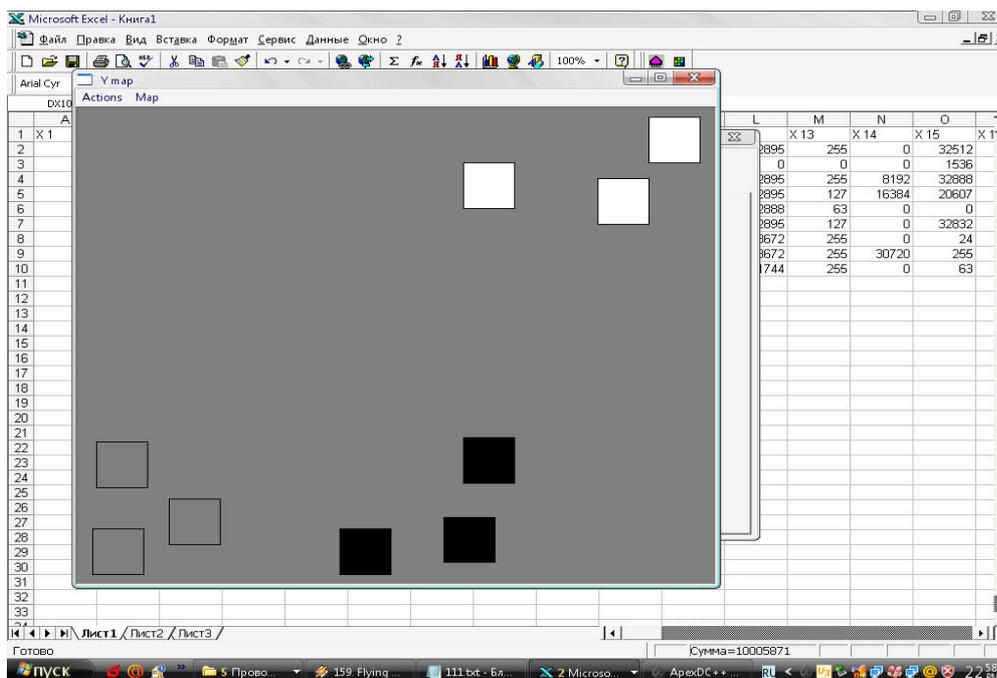


Рис. 4



Для проведения расчетов мы использовали пакет Excel Neural Package [1].

Решение задачи диагностики глаукомы [10]

Для решения задачи диагностики использовался экспериментальный материал, описанный выше. Он разбивался на две группы: обучающую выборку, состоящую из 6 изображений глаза пораженного глаукомой в разной стадии заболевания, включая норму (всего три различных состояния, по два изображения на каждое состояние), и контрольную выборку, состоящую из 3 изображений, соответствующих разным состояниям глаза.

Нейронная сеть, использовавшаяся для решения задачи, представляла собой многослойный перцептрон, характеризующийся следующими параметрами.

Число слоев нейронов в сети. В использованном нами пакете NeuroPro этот параметр может изменяться от 1 до 10. Дополнительно после последнего слоя нейронов создается слой выходных сумматоров с числом, равным числу выходных сигналов сети. Для создания нашей сети мы использовали 1 промежуточный слой нейронов (рис. 5).

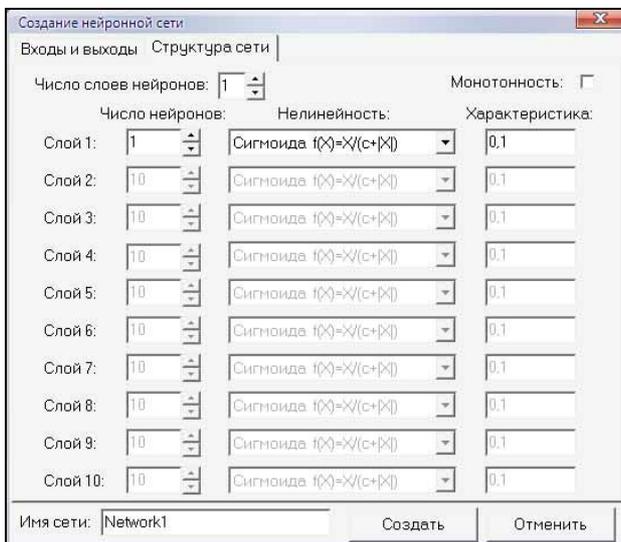


Рис. 5

Для каждого слоя нейронов возможно задание следующих характеристик.

Число нейронов в промежуточном слое. Может изменяться от 1 до 100. В нашем случае достаточно 1 нейрона (см. рис. 5).

Нелинейность – вид функции активации нейронов данного слоя. В использованной версии нейропакета (NeuroPro) реализована только сигмовидная нелинейность вида $f(A) = A/(c + |A|)$, где c – характеристика нейрона.

Характеристика – значение необучаемой константы c , используемой нелинейным преобразователем. Может изменяться в диапазоне от 0.0001 до 1. По умолчанию предлагается значение характеристики, равное 0.1. Чем больше значение характеристики, тем лучше интерполяционные и экстраполяционные способности обученной сети, но как правило это требует более длительного обучения.

Для оценки числа нейронов в скрытых слоях однородных нейронных сетей мы использовали формулу для оценки необходимого числа синаптических весов L_w в многослойной сети с сигмоидальными передаточными функциями [1]:

$$\frac{mN}{1 + \log_2 N} \leq L_w \leq m \left(\frac{N}{m} + 1 \right) (n + m + 1) + m,$$

где $n = 127$ – размерность входного сигнала, $m = 1$ – размерность выходного сигнала, $N = 6$ – число элементов обучающей выборки.

Оценив необходимое число весов, можно рассчитать число нейронов в скрытых слоях. Например, для двухслойной сети это число составит:

$$L = \frac{L_w}{n + m}.$$

Подставляя числовые данные, получим, что величина L заключена между 0 и 7. Мы выбираем значение $L = 1$.

Подготовленные данные для обучения нейросети заносятся в программу NeuroPro, после чего можно начинать обучение.

Обучение прекращается при достижении нулевого значения средней оценки на задачнике, в случае невозможности дальнейшего улучшения оценки либо при аварийных ситуациях (рис. 6).

После обучения нейронной сети выполняется тестирование ее прогностических возможностей. В качестве данных для тестирования берутся изображения, не вошедшие в обучающую выборку. Результат тестирова-

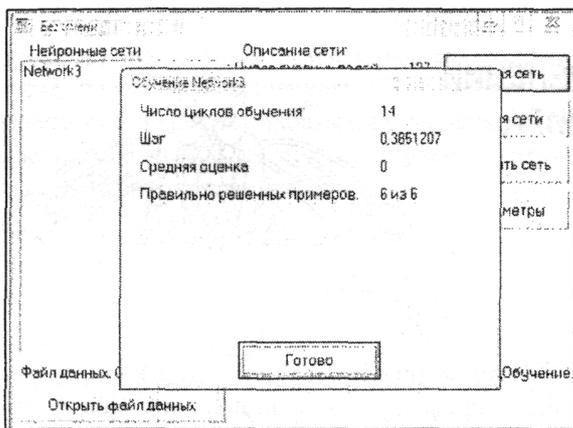


Рис. 6

ния сети представляет собой выходные данные для нейронной сети, а также значения прогноза этих полей нейронной сетью (рис. 7).

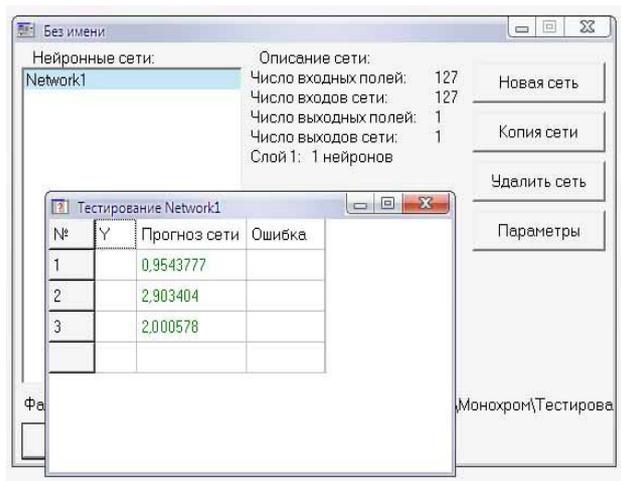


Рис. 7

Результаты тестирования показали, что программа в пределах заданной точности (0.1) распознала принадлежность контрольных примеров к нужным кластерам, которые в процессе обучения кодировались числами 1, 2 и 3.

Заключение

Изложенные результаты показывают перспективность использования ИНС как самоорганизующихся карт Кохонена, так и сетей перцептронного типа для решения задач офтальмологии.

Ближайшей целью этого направления является создание баз данных экспериментального материала, который впоследствии может использоваться для экспресс-диагностики глазных заболеваний.

Можно с уверенностью сказать, что данная методика может быть применена для решения поставленных задач и других глазных заболеваний.

Библиографический список

1. *Круглов В.В., Борисов В.В.* Искусственные нейронные сети. Теория и практика. 2-е изд., стереотип. М.: Горячая линия – Телеком, 2002.
2. *Горбань А.Н., Дунин-Барковский В.Л., Кирдин А.Н., Миркес Е.М., Новоходько А.Ю., Россиев Д.А., Терехов С.А., Сенаишова М.Ю., Царегородцев В.Г.* Нейроинформатика / Отв. ред. Е.А. Новиков. Новосибирск: Наука. Сиб. издат. фирма РАН, 2001.
3. *Бэстенс Д.Э., ван ден Берг В.М., Вуд Д.* Нейронные сети и финансовые рынки: Принятие решений в торговых операциях. М.: Изд-во ТВП, 1997.
4. *Боннер Р.Е.* Некоторые методы классификации // Автоматический анализ изображений. М.: Мир, 2002. С.205–234.
5. *Вапник В.Н., Червоненкис А.Ф.* Теория распознавания образов. М.: Наука, 1999.
6. *Миркес Е.М.* Нейрокомпьютер. Проект стандарта. Новосибирск: Наука. Сиб. издат. фирма РАН, 1998. С.264–282
7. *Кохонен Т.* Ассоциативная память. М.: Мир, 1980.
8. *Кохонен Т.* Ассоциативные запоминающие устройства. М.: Мир, 1982.
9. *Лепеско А.С.* Разработка системы распознавания образов на основе нейросетевого пакета Excel Neural Package: Дипломный проект / Поволж. акад. гос. службы им. П.А. Столыпина; Науч. рук. Ю.Н. Зайко. Саратов, 2007. 59 с.
10. *Скиданов А.Н.* Разработка системы распознавания статических изображений на основе нейросетевого пакета NeuroPro: Дипломный проект / Поволж. акад. гос. службы им. П.А. Столыпина; Науч. рук. Ю.Н. Зайко. Саратов, 2007. 57 с.



УДК 539.196,3

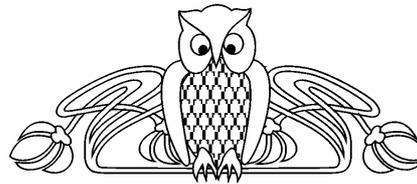
ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ ИК СПЕКТРОВ 4-БУТИЛ-4'-ЦИАНОБИФЕНИЛА

Л.М. Бабков, И.И. Гнатюк*, Г.А. Пучковская*, С.В. Трухачев

Саратовский государственный университет,
кафедра

E-mail: babkov@sgu.ru

* Институт физики НАН Украины, Киев



В области 400–4000 см⁻¹ измерены ИК спектры 4-бутил-4'-цианобифенила в твердокристаллической и жидкой фазах в интервале температур 28–70°C. Температурные изменения спектров объяснены на основании результатов расчетов ИК спектров, выполненных с использованием комплекса программ LEV-100, в предположении об изменении конформации молекулы. Выявлены полосы, чувствительные к конформационным изменениям пространственной структуры, дана интерпретация спектров.

The Investigation of the 4-Butyl-4'-Cyanobiphenyl IR Spectra Transformations at the Temperature Changes

L.M. Babkov, I.I. Gnatyuk, G.A. Puchkovska, S.V. Truckhachev

The IR spectra of the 4-butyl-4'-cyanobiphenyl in the liquid and solid crystal states in the region 400–4000 cm⁻¹ were measured at the 28–70°C temperature interval. The transformations of the spectra at the temperature changes are explained on the basis of the IR spectra calculation results performed with using of the LEV-100 software. A supposition about the conformational changes in the molecule made. The bands sensitive to the changes in its conformational structure were found and the interpretation of the IR spectra was given.

Введение

4-бутил-4'-цианобифенил способен образовывать моноклинную жидкокристаллическую фазу. Фазовый переход в нематический жидкий кристалл реализуется при охлаждении жидкого 4ЦБ до $t = 16.5^\circ\text{C}$. В твердом состоянии в 4ЦБ реализуется моноклинная пространственная группа $P2_1/c$, $a = 12.198 \text{ \AA}$, $b = 9.204 \text{ \AA}$, $c = 14.746 \text{ \AA}$, $\beta = 123.38^\circ$, с четырьмя молекулами в элементарной ячейке [1]. Температура плавления кристалла составляет 46.5°C [1].

В работах [2–5] опубликованы результаты исследований конформационной подвижности и межмолекулярного взаимодействия 4-*n*-алкил-4'-цианобифенилов (*n*ЦБ с $n = 2, 5, 8, 9$) методами ИК спектроскопии. Спектры были измерены в широком интервале температур для кристаллической, жидкокристаллической, жидкой фазы. В настоящей работе аналогичное исследование проведено для

4-бутил-4'-цианобифенила (4ЦБ), занимающего промежуточное положение между короткими и длинными молекулами гомологического ряда *n*ЦБ, в силу чего проявления конформационной подвижности в этой молекуле имеют некоторые отличия по сравнению с остальными молекулами ряда. Их изучение дополняет результаты, полученные авторами в работах [2–5].

Эксперимент и моделирование

Спектры ИК поглощения образцов 4ЦБ («Merck», Германия) измерены на спектрометре IFS-88 фирмы «Bruker» в области 400–4000 см⁻¹ в интервале температур 28–70°C для двух фаз: твердокристаллической (ТК) и жидкой (Ж).

Расчет ИК спектров конформеров 4ЦБ проводился в рамках теории колебательных спектров многоатомных молекул [6–8] с использованием созданного на её основе комплекса программ LEV-100, реализующего метод фрагментов [9, 10].

Моделирование спектров ИК поглощения конформеров 4ЦБ было произведено для моделей молекулы, различающихся четырьмя углами внутреннего вращения $\Phi_1 - \Phi_4$ (рис. 1). При этом также учитывались имеющиеся данные РСА [1] о молекулярной структуре в ТК состоянии при $t = 25^\circ\text{C}$, согласно которым $\Phi_1 = 40.5^\circ$, $\Phi_2 = -8^\circ$, $\Phi_3 = -5^\circ$, $\Phi_4 = -41^\circ$. При варьировании значения одного из углов значения других фиксировались и полагались либо нулевыми, либо равными рентгенографическим. Данные по углу Φ_5 , задающему ориентацию концевой метильной группы CH_3 , отсутствуют. При моделировании спектров его значение полагалось нулевым. Углеродный скелет алкильного радикала (АР) считался плоским, что соответствует



трансконформации, молекулы, изображенной на рис. 1, на котором приведены геометрические параметры молекулы [1]. Силовые и электрооптические параметры модели 4ЦБ были перенесены из молекул бутана, бензола, ацетонитрила. Полное описание их струк-

туры и спектров хранятся в библиотеке фрагментов комплекса LEV-100. В местах сшивки фрагментов, составляющих молекулу 4ЦБ, использованы силовые и электрооптические параметры из работ [9–12], которые корректировались в ходе моделирования.

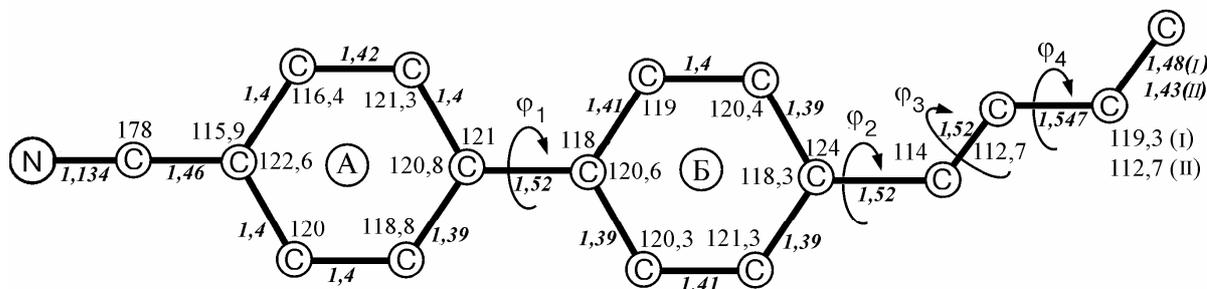


Рис. 1. Плоский конформер молекулы 4ЦБ

Обсуждение результатов

На рис. 2 представлены рассчитанный ИК спектр конформера 4ЦБ с углами $\varphi_1 = 40.5^\circ$, $\varphi_2 = -8^\circ$, $\varphi_3 = -5^\circ$, $\varphi_4 = -41^\circ$, $\varphi_5 = 0^\circ$ и измеренные при различных температурах спектры ИК поглощения в области 400–3100 см^{-1} . Согласие измеренных и рассчитанных частот удовлетворительное. Качественно согласуются и распределения интенсивностей в экспериментальных и теоретиче-

ских спектрах, за исключением отдельных полос. ИК спектры, измеренные при температурах 28°, 40°, 45°C в ТК и 48°C в жидкости вблизи точки фазового перехода, мало отличаются друг от друга. Значительные температурные изменения спектров обнаруживаются в жидком 4ЦБ в небольшом интервале 50–55°C выше критической температуры (рис. 2). При дальнейшем нагревании до 70°C ИК спектр 4ЦБ практически не меняется.

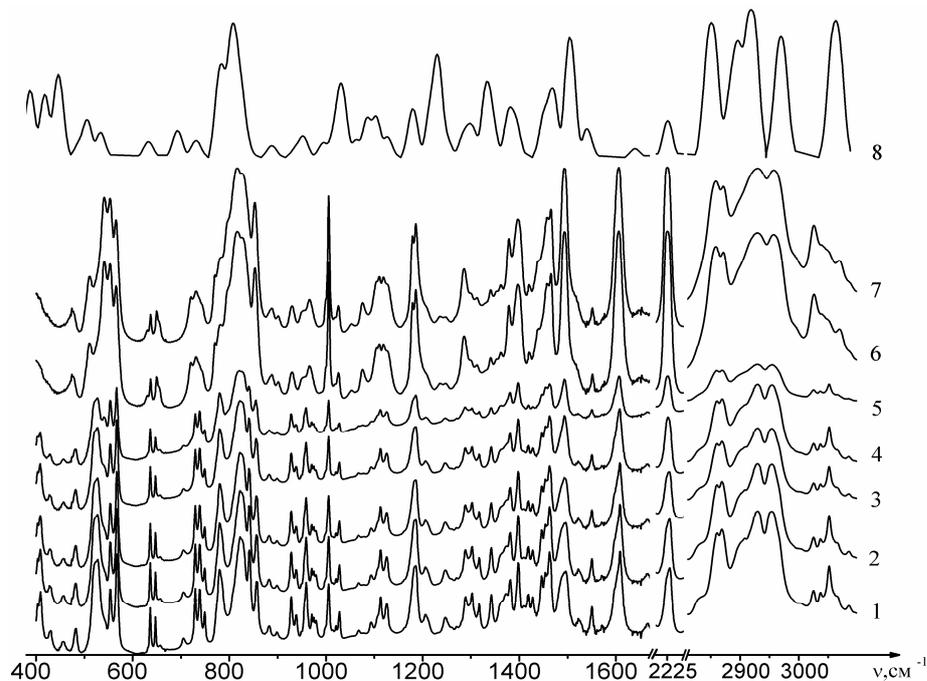


Рис. 2. ИК спектры 4ЦБ: измеренные при 28°(1), 40°(2), 45°(3) С (ТК); 48°(4), 50°(5), 55°(6), 70° (7) С (Ж) и рассчитанный (8)



В ходе анализа рассчитанных спектров различных конформеров были выявлены полосы, чувствительные к изменению конформации молекулы. Большинство указанных полос соответствует нехарактеристическим колебаниям, делокализованным по деформационным координатам структурных элементов молекулы, непосредственно затрагиваемых поворотами. В таблице приведены частотные положения максимумов таких полос с указанием их чувствительности (знак «+») к поворотам, определяющим изменение конформации. Сравнение рассчитанных спектров конформеров молекулы 4ЦБ и измеренных в разных фазах при различных температурах показал, что рассчитанные спектры ближе к спектрам жидкого образца 4ЦБ, измеренным при температурах выше 55°C (60, 70°C). Спектры ТК и жидкости, измеренные в температурном интервале 28–55°C, хуже согласуются с рассчитанными спектрами. Следует при этом заметить, что использование рентгеноструктурных данных [1] ситуации не улучшает. Причиной такого расхождения может быть существенное влияние на спектр 4ЦБ межмолекулярного взаимодействия, которое при моделировании не учитывалось. Здесь уместно сослаться на работу [1], в которой Вани, анализируя расстояния между атомами соседних молекул 4ЦБ в кристалле, обнаружил, что молекулы располагаются парами. Пара представляет собой две антипараллельно ориентированные, расположенные друг над другом на расстояниях 3.4–3.6 Å молекулы, между которыми имеет место значительное ван-дер-ваальсово взаимодействие.

На рис. 3 даны ИК спектр жидкого 4ЦБ в областях 505–570 см⁻¹ и 710–750 см⁻¹, измеренный при температуре 55°C, и спектры, рассчитанные для двух конформеров 4ЦБ.

Значения торсионных углов для конформера 1 взяты из [1], для конформера 2 $\varphi_1 = 70^\circ$, $\varphi_2 = \varphi_3 = \varphi_4 = \varphi_5 = 0^\circ$. В области 505–570 см⁻¹ экспериментального спектра (рис. 3, а) имеется широкая полоса сложной формы с четырьмя пиками средней (511 см⁻¹) и сильной (541, 553 см, 566 см⁻¹) интенсивности. Согласно расчету, в данной области проявляются два нормальных колебания ν_{15} , ν_{16} , делокализованные по естественным коор-

Частоты нормальных колебаний 4ЦБ, чувствительные к изменению конформации, определяемой торсионными углами $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4$

№	$\nu, \text{см}^{-1}$	φ_1	φ_2	φ_3	φ_4
12	428	+	+	+	+
13	446	-	+	+	+
14	490	+	-	-	-
15	505	+	+	+	-
16	533	+	+	-	-
19	632	-	-	+	
20	692	-	-	+	+
21	727	+	+	-	+
22	732	+	+	-	-
23	781	-	+	+	+
25	807	+	+	+	+
26	821	+	-	+	-
27	834	-	-	+	+
30	887	-	+	+	+
33	953	-	-	-	+
36	994	-	+	-	+
41	1062	-	+	-	+
43	1103	-	-	+	+
44	1126	-	-	+	+
47	1216	-	-	+	+
49	1230	-	+	-	-
50	1249	-	-	+	+
51	1284	+	+	+	-
52	1290	-	-	+	+
53	1293	-	-	+	-
54	1294	-	-	+	-
55	1298	+	-	-	+
56	1305	-	+	+	-
58	1332	-	+	+	+
59	1343	-	-	-	+
61	1379	+	-	+	-
62	1391	-	+	+	+
63	1451	-	-	-	+
65	1460	-	-	+	+
66	1465	+	-	-	-
67	1471	-	-	+	+
70	1544	+	-	-	-
71	1606	+	-	-	-
75	2844	-	-	+	-
77	2851	-	-	+	-
78	2882	-	-	+	+
81	2918	-	-	+	+

динатам $\rho_B(\text{CC})$, $\rho_A(\text{CC})$, α_B , α_A , $\gamma(\text{CCN})$ (γ – деформационное колебание угла CCN, ρ и α – координаты, описывающие выход атома С из плоскости кольца и излом кольца соответственно [7]). Анализ рассчитанных спектров показал, что значения частот в данной облас-

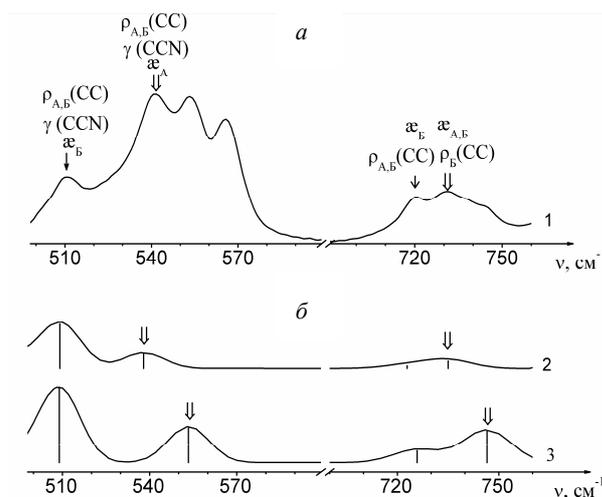


Рис. 3. ИК спектры 4ЦБ: измеренный при 55°С (1) и рассчитанные для конформера 1 с углами $\varphi_1 = 40.5^\circ$, $\varphi_2 = -8^\circ$, $\varphi_3 = -5^\circ$, $\varphi_4 = -41^\circ$, $\varphi_5 = 0^\circ$ (2) и конформера 2 с углами $\varphi_1 = 70^\circ$, $\varphi_2 = \varphi_3 = \varphi_4 = \varphi_5 = 0^\circ$ (3)

ти чувствительны к изменению углов φ_1 и φ_2 (см. таблицу). Спектры конформеров 1 и 2 хорошо согласуются с экспериментальным спектром по частотам и хуже по интенсивностям. Центральные пики 541, 553 см^{-1} полосы экспериментального спектра отнесены к конформерам 1 и 2, отличающимся главным образом углами φ_1 и φ_2 . Суперпозиция спектров конформеров 1 и 2 (рис. 3, б) объясняет наличие двух центральных пиков в полосе экспериментального спектра и указывает на конформационную неоднородность состава образца.

Коротковолновый пик 566 см^{-1} соответствует дважды вырожденному колебанию типа E в ацетонитриле, который использовался в качестве фрагмента при создании расчетной модели 4ЦБ. Согласно данным квантово-механических расчетов [13–15], этот пик относится к плоскому деформационному колебанию $\gamma(\text{CCN})$ ближайшего фенильного кольца.

Полоса в области 710–750 см^{-1} экспериментального ИК спектра обладает тремя максимумами 720, 731, 734 см^{-1} средней интенсивности (см. рис. 3, а). В рассчитанном спектре конформера 1 в данной области имеются два нормальных колебания, которые относятся к неплоским деформационным колебаниям $\rho_B(\text{CC})$, $\rho_A(\text{CC})$, α_B , α_A с частотами ν_{21} , ν_{22} , близкими к экспериментальным (720, 731 см^{-1}). Оба нормальных колебания

чувствительны к изменениям углов φ_1 и φ_2 (см. таблицу). Наличие третьего (коротковолнового) максимума (734 см^{-1}) полосы может быть объяснено присутствием в образце конформеров, различающихся углами φ_1 и φ_2 . Среди рассчитанных спектров был выбран спектр конформера 2, наиболее близкий к экспериментальному в данной области. Из сказанного вновь следует заключение о конформационной неоднородности образца.

Изменения углов φ_3 , φ_4 также трансформируют спектр. В области 600–670 см^{-1} экспериментального спектра имеется полоса с четырьмя максимумами очень слабой (630 см^{-1}) и слабой интенсивности (637, 649 и 655 см^{-1}). Центральные максимумы 637 и 649 см^{-1} отнесены к деформационным колебаниям типа $\gamma(\text{CCC})$, $\beta(\text{CCH})$ бифенильного фрагмента, они практически не чувствительны к конформационным изменениям. Длинно-волновый пик 630 см^{-1} имеет очень слабую интенсивность и, согласно расчету, не относится к фундаментальным колебаниям. Коротковолновый пик 655 см^{-1} отнесен к деформационным колебаниям $\gamma(\text{CCC})$, $\beta(\text{CCH})$ фенильного кольца, ближайшего к бутилу, и колебаниям $\gamma(\text{CCC})$ бутильного фрагмента. Из рис. 4, б видно, что составляющая теоретического спектра, соответствующая в измеренном спектре коротковолновому пику 655 см^{-1} полосы, весьма чувствительна, как это следует из результатов расчетов, к изменению угла φ_3 и нечувствительна к изменению других торсионных углов (см. таблицу). При нагревании жидкого образца от 50 до 55°С этот пик смещается в длинноволновую сторону спектра на 1,5 см^{-1} и возрастает по интенсивности (рис. 4, а), что можно объяснить изменением угла φ_3 . В частности, в кристаллическом образце при $t = 25^\circ\text{C}$ он составляет -5° . Сдвиг коротковолнового максимума полосы 630–670 см^{-1} в длинноволновую сторону спектра при нагревании образца от 50 до 55°С в расчете воспроизводится при незначительных поворотах пропилового фрагмента в любую сторону относительно нулевого (транс-) положения. Однозначно определить направление изменения угла φ_3 , которое не превышает 5–10° (рис. 4, б) с учетом погрешности метода расчета, из анализа спектра не представляется возможным.

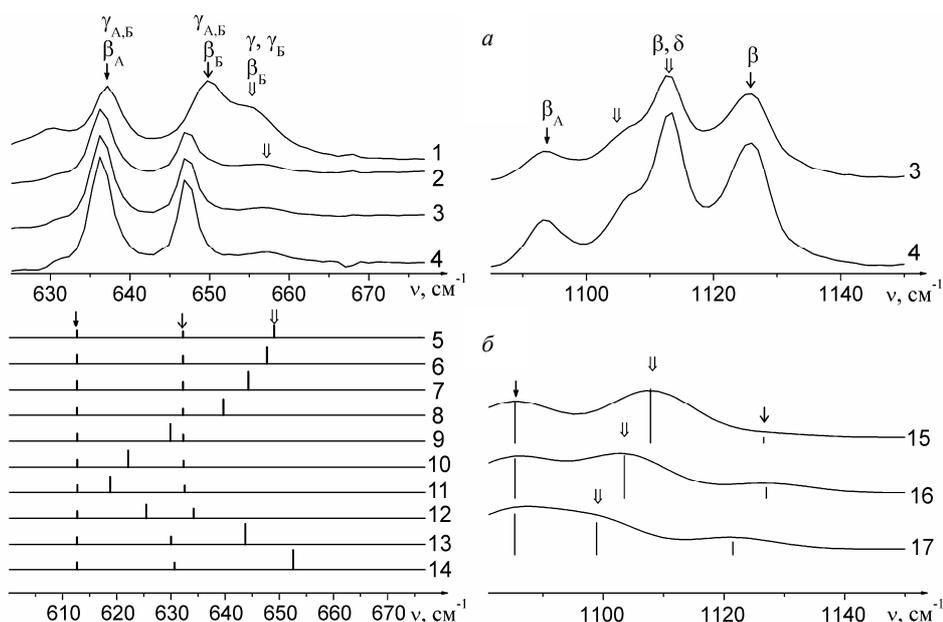


Рис. 4. ИК спектры 4ЦБ: измеренные при 55° (1), 50° (2), 48° (3) и 28° С (4) и рассчитанные для конформеров с углами φ_3 , равными 0° (5), 10° (6), 20° (7), 30° (8), 50° (9), 70° (10), 90° (11), 120° (12), 150° (13), 180° (14) и углами φ_4 , равными 0° (15), -41° (16), -98° (17)

Методом РСА [1] было установлено два положения атома углерода группы CH_3 бутильного радикала (см. рис. 1). Положение атома углерода метильной группы CH_3 определяет торсионный угол φ_4 молекулы. Согласно данным [1] он принимает значения -41°(I) и -98°(II). Однако достоверность этого результата, по мнению авторов, невысока. Мы попытались проверить этот результат методами колебательной спектроскопии, анализируя область 1090–1150 cm^{-1} спектров ТК и жидкого образцов 4ЦБ, измеренных при температурах 28 и 48°С (см. рис. 4, а) и рассчитанных для конформеров, различающихся углом φ_4 при фиксированных углах $\varphi_1 = 40,5^\circ$, $\varphi_2 = -8^\circ$, $\varphi_3 = -5^\circ$ (см. рис. 4, б). Экспериментальная полоса в указанной области имеет сложную форму, в которой можно выделить четыре составляющие средней и слабой интенсивности: три максимума 1093, 1112, 1125 cm^{-1} и плечо 1106 cm^{-1} . Согласно расчету в этой области проявляются три нормальных колебания – ν_{42} , ν_{43} , ν_{44} . ν_{42} . Максимум 1093 cm^{-1} соответствует деформационному колебанию $\beta(\text{CCH})$ фенильного кольца А (см. рис. 4, б), слабо чувствительному к изменению конформаций. ν_{43} , ν_{44} – деформационные колебания $\beta(\text{CCH})$ бутильного фрагмента чувствительны к конформационным

изменениям, определяемым углами φ_3 и φ_4 (см. таблицу). Поскольку конформеров, различающихся значениями угла φ_3 , согласно [1], нет, то два пика (1112, 1125 cm^{-1}) и плечо (1106 cm^{-1}) экспериментальной полосы вероятнее всего образованы колебаниями ν_{43} , ν_{44} , принадлежащими конформерам с различными значениями угла φ_4 (см. рис. 4). Это положение не противоречит результатам РСА [1], согласно которым в образце присутствуют конформеры с различными значениями угла φ_4 . Из результатов расчета (см. рис. 4, б) следует, что лучшее согласие с измеренным спектром дает суперпозиция спектров конформеров с углами $\varphi_4 = 0^\circ$ и -41°, а не с $\varphi_4 = -41^\circ$ и -98°, установленными в [1] с невысокой достоверностью.

При нагревании кристаллического образца от 28 до 50°С он переходит в изотропную жидкость. При этом трансформация ИК спектров определяется только незначительными изменениями интенсивности и малым уширением полос (см. рис. 2–4). Их частотные положения чувствительные, согласно расчету, к конформационным изменениям стабильны и при переходе в жидкое состояние (при 46.5°С) и при дальнейшем нагревании до 50°С. Известно, что энергетический барьер вращения вокруг одиночных связей С-



С бутана ниже энергии теплового движения молекул при комнатной температуре ($t = 25^\circ\text{C}$). Поэтому в жидком 4ЦБ при изменении температур в интервале $46.5\text{--}50^\circ\text{C}$ конформационная подвижность бутильного фрагмента молекулы может проявляться. Однако стабильность частотного положения максимумов конформационно чувствительных полос спектра при нагревании кристаллического и жидкого 4ЦБ не подтверждает этого (см. рис. 2–4). Следовательно, при нагревании ТК от 28 до 50°C и жидкости от 46.5 до 50°C конформационный состав образца 4ЦБ не изменяется. Конформационная мобильность жидкости остается ограниченной, как и в кристалле. Однако незначительные изменения интенсивностей отдельных полос ИК спектра 4ЦБ при переходе ТК-жидкость не исключают возможности конформационных переходов между ранее существовавшими в образце конформациями.

Выводы

В исследованном интервале температур $28\text{--}70^\circ\text{C}$ в кристаллической и жидкой фазе конформационный состав 4ЦБ не однородный.

При нагревании от 28 до 50°C (кристалл) и от 46.5 до 50°C (жидкость) конформационный состав образца остается одинаковым. Конформационная мобильность, связанная с внутренним вращением вокруг одинарных С-С-связей АР, в жидком 4ЦБ при изменении температуры от 46.5 до 50°C остается ограниченной, как и для кристалла.

В жидком состоянии при температурах $55\text{--}70^\circ\text{C}$ возможны конформеры 1 с углами $\varphi_1 = 40.5^\circ$, $\varphi_2 = -8^\circ$, $\varphi_3 = -5^\circ$, $\varphi_4 = -41^\circ$, $\varphi_5 = 0^\circ$ и конформер 2 с углами $\varphi_1 = 70^\circ$, $\varphi_2 = \varphi_3 = \varphi_4 = \varphi_5 = 0^\circ$.

При нагревании от 50 до 55°C жидкого 4ЦБ установлено изменение конформации, определяемое поворотом пропильного фрагмента на $5\text{--}10^\circ$ относительно нулевого (транс-) положения.

В кристаллическом 4ЦБ присутствуют конформеры, различающиеся углом ориентации (φ_4) концевой этильной группы. Наиболее вероятно существование конформеров с углами φ_4 , равными 0° и -41° .

Библиографический список

1. Vani G. V. Crystal and Molecular Structure of Nematogenic 4'-n-butyl-4-cyanobiphenyl (4CB) // *Molec. Crystals Liq. Crystals*. 1983. Vol.99. P.21–27.
2. Бабков Л.М., Гнатюк И.И., Пучковская Г.А., Трухачёв С.В. Структура и конформационная подвижность 4'-пентил-4-цианобифенила по данным ИК спектроскопии // *Журн. структ. химии*. 2002. Т.43, №6. С.1098–1105.
3. Бабков Л.М., Гнатюк И.И., Пучковская Г.А., Трухачёв С.В. Исследование конформационной подвижности 4'-этил-4-цианобифенила методами ИК спектроскопии // *Журн. структ. химии*. 2004. Т.45, №3. С.398–405.
4. Бабков Л.М., Гнатюк И.И., Пучковская Г.А., Трухачёв С.В. Особенности строения и межмолекулярного взаимодействия в 4-н-алкил-4'-цианобифенилах по данным ИК спектроскопии // *Журн. структ. химии*. 2006. Т.47, №1. С.130–138.
5. Babkov L.M., Gnatyuk I.I., Trukhachev S.V. Investigation of 4'-alkyl-4-cyanobiphenyls structure features by IR spectroscopy methods // *J. Mol. Struct.* 2005. Vol.744–747. P.425–432.
6. Волькенштейн М.А., Грибов Л.А., Еляшевич М.А., Степанов Б.И. Колебания молекул. М.: Наука, 1972. 700 с.
7. Свердлов Л.М., Ковнер М.А., Крайнов Е.П. Колебательные спектры многоатомных молекул. М.: Наука, 1970. 560 с.
8. Грибов Л.А. Введение в молекулярную спектроскопию. М.: Наука, 1976. 400 с.
9. Грибов Л.А., Дементьев В.А. Моделирование колебательных спектров сложных соединений на ЭВМ. М.: Наука, 1989. 160 с.
10. Грибов Л.А., Дементьев В.А. Таблицы для расчета колебательных спектров многоатомных молекул. М.: Наука, 1979. 196 с.
11. Тодоровский А.Т., Плоткин С.Я. Расчет спектрального распределения коэффициента поглощения фенилацетонитрилов // *Журн. структ. химии*. 1991. Т.32, №1. С.68–72.
12. Попов Е.М., Роцункин В.П. Силовые и электрооптические параметры ацетонитрила // *Оптика и спектроскопия*. 1963. Вып.2. С.166–173.
13. Бабков Л.М., Элькин П.М., Гнатюк И.И., Кукиельский Ж.И., Пучковская Г.А., Успенский К.Е. Квантовомеханическое исследование молекулы этилцианобифенила // *Проблемы оптической физики: Материалы 7-й Междунар. молодеж. науч. школы по оптике, лазерной физике и биофизике*. Саратов, 2003. Кн.1. С.112–116.
14. Зотов С.Н., Березин К.В., Нечаев В.В. Инфракрасный спектр и структура молекулы 4-пропилокси-4'-цианобифенила // *Журн. физ. химии*. 2004. Т.78, №11. С.2027–2034.
15. Зотов С.Н., Березин К.В., Нечаев В.В. Экспериментальное и теоретическое исследование ИК спектра 4-амилилокси-4'-цианобифенила // *Оптика и спектроскопия*. 2004. Т.96, №3. С.380–287.

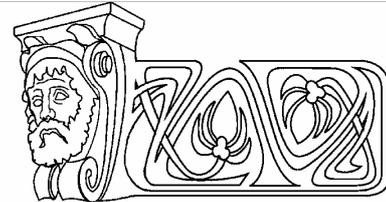


УДК 621.382

РЕЗОНАНСНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ С МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ, ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИМИ И ПОЛУПРОВОДНИКОВЫМИ ВКЛЮЧЕНИЯМИ

С.С. Горбатов

Саратовский государственный университет?
кафедра физики твёрдого тела
E-mail: usanovda@info.sgu.ru



Установлены новые типы резонансов в электродинамических низкоразмерных системах с полупроводниками, полупроводниковыми структурами, металлическими и диэлектрическими включениями и показана возможность их использования при разработке и создании новых типов полупроводниковых СВЧ-устройств.

The Resonance Phenomena in Electrodynamical Systems with Metal, Dielectric and Semiconducting Inclusions

S.S. Gorbатов

The new types of resonances in electrodynamic reduced dimensionality systems with semiconductors, semiconducting structures are installed, the metal and dielectric inclusions and show a possibility of their use for want of to development and creation of new types of a semiconducting microwave of systems.

Применение полупроводниковых элементов в устройствах СВЧ, в том числе предназначенных для работы на высоких уровнях мощности, связано с необходимостью решения достаточно сложной проблемы согласования малогабаритного полупроводникового элемента с электродинамической системой, размеры которой велики, с целью концентрации СВЧ-поля, распределенного по системе, в малом объеме полупроводника. От того насколько успешно решена эта задача, во многом зависят основные характеристики устройства в целом. Следует отметить, что у большинства полупроводниковых волноводных СВЧ-устройств при их различном функциональном назначении связь полупроводникового диода с полем в волноводе осуществляется с помощью металлического стержня. Это обусловлено необходимостью концентрации поля СВЧ-волны в полупроводниковом элементе, размеры которого малы по сравнению с размерами линии передачи.

Таким образом, возможности совершенствования параметров полупроводниковых СВЧ-устройств могут быть связаны с изуче-

нием физических особенностей специфики их работы в условиях воздействия высоких уровней мощности, взаимодействия СВЧ-колебаний и волн в электродинамических системах с полупроводником. Отметим, что для теоретического моделирования ситуаций, характерных для указанных выше задач, необходимо решать сложную систему нелинейных дифференциальных уравнений, которые описывают физические процессы, протекающие в полупроводниковых элементах при воздействии на них СВЧ-излучения, совместно с не менее сложной задачей по нахождению распределения поля в электродинамической системе, включающей в себя эти элементы. Решение этой задачи связано с достаточно высокими трудностями. Поэтому в большинстве случаев пользуются теми или иными упрощающими предположениями, к которым можно отнести использование при описании эквивалентной схемы полупроводникового элемента так называемого мало-сигнального, а при описании электродинамических систем – одномодового приближения.

Однако, как показано в работах [1, 2], вопреки предсказываемому в результате использования одномодовых представлений увеличению затухания с ростом проводимости или толщины полупроводникового образца, помещенного в волновод, может наблюдаться немонотонный характер этой зависимости, включающей участки с уменьшением затухания.

Возбуждение волн высших типов в электродинамических системах, содержащих полупроводник, приводит к новым явлениям, описание которых с точки зрения «одномодовой» теории невозможно. В частности, в работах [2, 3] показано, что возбуждением



волн высших типов обусловлены эффект смещения поля при воздействии внешнего постоянного магнитного поля на полупроводниковую пластину, расположенную в волноводе, и эффект невзаимного распространения волны в таком волноводе. Помимо этого, в работах [4, 5] отмечено, что взаимодействие по высшим типам волн в ряде случаев является причиной инверсного режима работы $p-i-n$ -диодных коммутирующих устройств, изменения частотной полосы и потерь запираения в коммутирующих устройствах, содержащих близко расположенные держатели с $p-i-n$ -диодами.

Немонотонный характер зависимости затухания в волноводе от положения, размеров и проводимости размещенного в нем полупроводникового образца, не характерный для одномодового режима распространения волны, объясняется в работе [6] тем, что при определенных условиях один из возбужденных высших типов волн распространяется с меньшим затуханием, чем волна основного типа.

Несмотря на то что в известной литературе обсуждалась возможность возникновения резонансного затухания волны в других, кроме упомянутых выше, системах, например в системе диафрагма – короткозамыкающий поршень, но такие вопросы, как, например, возможность управления характеристиками таких систем электрическим или магнитным полем, не рассматривались.

В связи с вышесказанным представляет интерес дальнейшее исследование особенностей распространения волн в электродинамических системах с полупроводником, обусловленных возбуждением высших типов волн. Цель работы состоит в установлении новых физических закономерностей в результате проведения экспериментальных и теоретических исследований особенностей резонансных явлений в электродинамических, в том числе низкоразмерных, системах с полупроводниками и полупроводниковыми структурами, обусловленных многомодовыми или многочастотными режимами работы, нелинейными свойствами материалов и структур и изменением проводимости полупроводника под влиянием внешних воздействий, разработке и создании на их основе

новых типов полупроводниковых СВЧ-устройств.

Ранее не рассматривалось влияние на частотную характеристику системы *металлический штырь с зазором – близкорасположенный поршень* размеров штыря и его расположения относительно узкой стенки волновода. В работе [7] были обнаружены резонансы при малых расстояниях l между ёмкостной диафрагмой и короткозамыкающим поршнем.

Наблюдавшаяся аналогия позволила предположить возможность обнаружить увеличение частоты резонанса с увеличением l и в системе *штырь с зазором – близкорасположенный короткозамыкатель*. Схематическое изображение исследуемого устройства приведено на рис. 1, а, где 1 – прямоугольный волновод, 2 – штырь с зазором, 3 – поршень.

При расчёте определялась частотная зависимость затухания мощности (L), коэффициента стоячей волны ($K_{ст}U$) и фазы коэффициента отражения (Φ) в исследуемой конструкции. Значения коэффициента L определялись из соотношения $L = 10 \lg |1/\Gamma|^2$, где $\Gamma = (Z - Z_{c10}) / (Z + Z_{c10})$, Z – импеданс, определённый в плоскости штыря и включающий параллельно соединённые импеданс штыря с зазором и входной импеданс отрезка волновода с поршнем, $Z = \frac{1}{(Y_L^R) + (Y_C)}$,

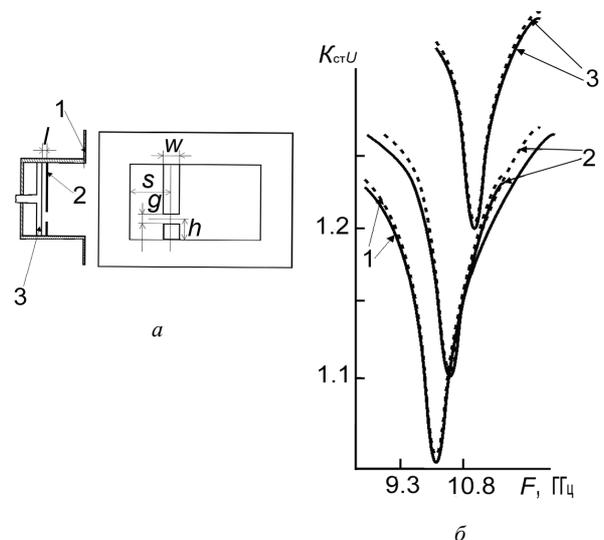


Рис. 1



$Y_L^R = \frac{1}{R + jX_L}$, где $R + jX_L$ – сумма активной

и индуктивной составляющей импеданса штыря, j – мнимая единица. Ёмкостная составляющая полной проводимости штыря с зазором имеет вид [8]:

$$Y_C = \kappa_{p1}^2 \sum_{n=1}^N \left[\frac{1}{\sum_{m=1}^M Z_{mn} (\kappa_{pm} / \kappa_{qn})^2 \tau_{mn}^2} \right]. \quad (1)$$

Здесь

$$Z_{mn} = \frac{j\xi b (k^2 - k_y^2)}{ak (2 - \delta_0) \Gamma_{mn}},$$

$$\kappa_{pm} = \text{Sin } k_x S (\text{Sin } \theta_m / \theta_m),$$

$$\kappa_{qn} = \text{Cos } k_y h (\text{Sin } \varphi_n / \varphi_n),$$

$$\Gamma_{mn} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 - k^2}, \quad \delta_0 = \begin{cases} 1, & n=0; \\ 0, & n \neq 0, \end{cases}$$

$$\theta_m = \frac{m\pi w}{2a}, \quad \varphi_n = \frac{n\pi g}{2b},$$

$$k_x = \frac{m\pi}{a}, \quad k_y = \frac{n\pi}{b},$$

g – высота зазора.

Значение Z_{c10} определялось из записанного в соответствии с [2] выражения

$$Z_{c10} = 2j \left(\frac{b}{a} \right) \left(\frac{k}{((\pi/a)^2 - k^2)^{1/2}} \right) \times \text{Sin} \left(\frac{\pi}{a} S \right) \frac{\text{Sin} (\pi w / 2a)}{(\pi w / 2a)},$$

где a, b – размеры широкой и узкой стенок волновода соответственно; $k = \frac{\omega}{c}$, S – расстояние от середины штыря до боковой стенки волновода, w – ширина штыря.

Выражение для суммы активной и индуктивной составляющей импеданса штыря с зазором записывается следующим образом:

$$R + jX_L = \sum_{m=1}^{\infty} Z_{m0} \left(1 - j \frac{z_s \Gamma_{m0}}{\omega \mu_0} \right) \times (\kappa_{pm}^2 / \kappa_{p1}^2) (1 - w/a) \tau_{mn}^2. \quad (2)$$

Здесь z_s – поверхностный импеданс штыря, рассчитываемый из соотношения:

$$z_s = (1 + j) \sqrt{\omega \mu_0 / 2\sigma}, \quad (3)$$

где ω – круговая частота, μ_0 и σ – соответственно магнитная проницаемость вакуума и проводимость материала штыря.

Коэффициент τ_{mn} , входящий в выражения (1) и (2), характеризует наличие короткозамыкающей плоскости поршня и рассчитывается из соотношений:

$$\tau_{mn} = 2\tau_{1mn} / (1 + \tau_{1mn}),$$

$$\tau_{1mn} = \frac{[1 + \rho_{mn} \exp(-2\Gamma_{mn}l)]}{[1 - \rho_{mn} \exp(-2\Gamma_{mn}l)]},$$

$$\rho_{mn} = (Z_{s1} - 2Z_{mn}) / (Z_{s1} + 2Z_{mn}),$$

где ρ_{mn} – комплексный коэффициент отражения от плоскости поршня; Z_{s1} – импеданс поршня, определяемый из соотношения (3). Для бесконечного волновода множитель $\tau_{mn} = 1$.

Расчёты потерь затухания СВЧ мощности, коэффициента стоячей волны, а также фазы коэффициента отражения были проведены в рабочей полосе частот прямоугольного волновода с размерами поперечного сечения 10×23 мм.

На рис. 1, б приведены результаты расчётов (сплошные кривые) и экспериментальных исследований (пунктирные кривые) частотной зависимости $K_{ст}U$ для различных значений ширины штыря w при неизменных расстояниях от штыря до боковой стенки волновода $S = 5$ мм и до поршня $l = 900$ мкм при высоте зазора $g = 0.2$ мм. Значение величины h , определяющей положение зазора для данного случая и во всех последующих экспериментах и расчётах, принималось равным 0.2 мм. При расчётах предполагалось, что в качестве материала, из которого изготавливался штырь, использовалась медь ($\sigma = 1.653 \times 10^{-6}$ Ом·см).



Результаты расчётов, приведённые на рис. 1, б, свидетельствуют о том, что при увеличении ширины штыря от 2 мм (кривые 1) до 4 мм (кривые 3) резонанс коэффициента отражения возникает на более высоких частотах, при этом значение $K_{ct}U$ на частоте резонанса с увеличением w увеличивается. Кривые 2 соответствуют ширине штыря $w = 3$ мм. Из сопоставления результатов расчётов и измерений, проведённых для системы с параметрами и в диапазоне частот, заданными при расчёте (пунктирные кривые), следует их хорошее соответствие. Результаты измерений (пунктирные кривые) и расчётов (сплошные кривые), приведённые на рис. 2, а, свидетельствуют о том, что уменьшение высоты зазора от величины $g = 0.2$ мм (кривые 1) до $g = 0.1$ мм (кривые 2) для ширины штыря $w = 2$ мм при $l = 800$ мкм приводит к уменьшению частоты резонанса и увеличению $K_{ct}U$ на резонансной частоте. Это может быть объяснено тем, что уменьшение высоты зазора приводит к увеличению ёмкостной составляющей импеданса системы. При исследовании системы ёмкостная диафрагма – короткозамыкающий поршень было обнаружено, что существует интервал расстояний от диафрагмы до поршня, в котором увеличение расстояния приводит к увеличению резонансной частоты системы [7]. На рис. 2, б приведены данные результатов измерений (пунктирные кривые) и расчётов (сплошные кривые), которые свидетельствуют о том, что с увеличением расстояния от поршня до медного штыря от 700 мкм (кривые 1) до 900 мкм (кривые 3), резонансная частота увеличива-

ется от 10 ГГц до 11.1 ГГц. Кривые 2 соответствуют 800 мкм. Ширина штыря составляла при этом 2 мм, высота зазора $g = 0.2$ мм, расстояние от штыря до боковой стенки волновода $s = 5$ мм. То есть для системы штырь – близкорасположенный поршень наблюдается закономерность, аналогичная системе с ёмкостной диафрагмой, описанной в [7]. Уменьшение индуктивной составляющей импеданса штыря подтверждается численными расчётами. Вследствие уменьшения индуктивности с ростом w уменьшается добротность резонанса, что также подтверждает результаты расчётов. Отметим, что результаты измерений (пунктирные кривые) подтверждают эти выводы и хорошо соответствуют расчёту. В экспериментах использовался штырь из меди.

Были проведены также расчёты (сплошные кривые на рис.3) фазы коэффициента отражения Φ в полосе частот для различных значений активной составляющей поверхностного импеданса штыря. При расчёте задавались значения $l = 900$ мкм, $w = 3$ мм, $g = 0.2$ мм, $s = 5$ мм.

Из результатов расчётов следует, что фазочастотная характеристика имеет вид, характерный для последовательного резонансного контура. Результаты расчётов хорошо согласуются с результатами измерений, приведёнными на этом же рисунке (пунктирные кривые). Кривые 1, приведённые на рис. 3, а, соответствуют случаю, когда штырь изготовлен из меди 2 мм, кривые 2 – из свинца. Видно, что кривые 2 являются более пологими, что объясняется бóльшим удель-

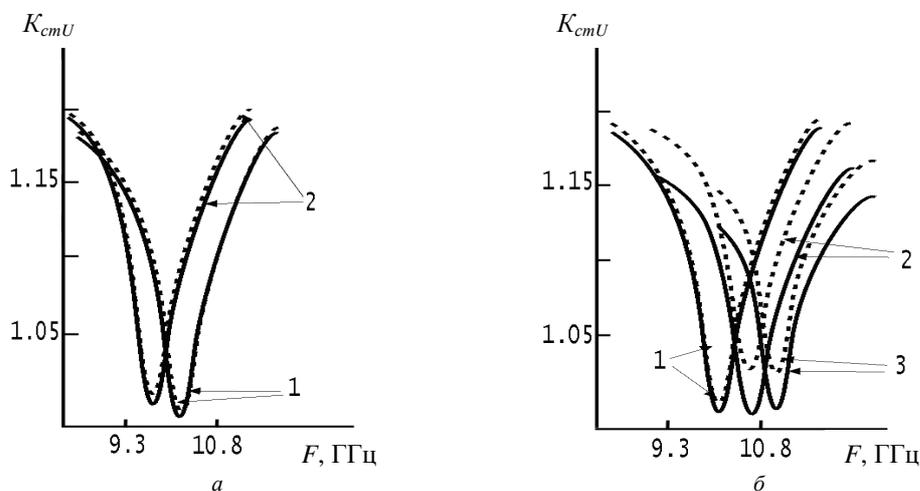


Рис. 2

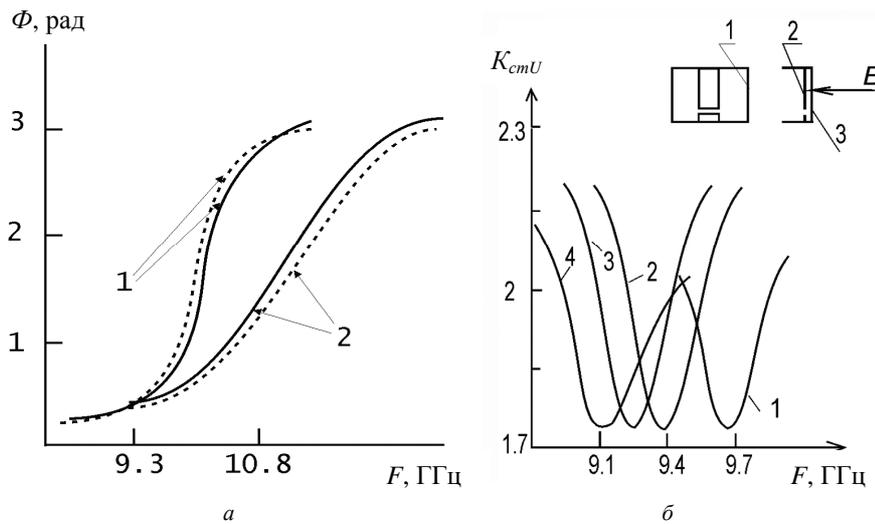


Рис. 3

ным сопротивлением свинца по сравнению с медью. Проведённые исследования системы *штырь с зазором – близкорасположенный поршень* свидетельствуют, в частности, о высокой чувствительности резонанса системы к изменению поверхностного импеданса штыря. Это позволяет сделать предположение о том, что искажение линий СВЧ-тока, протекающего по поверхности штыря, вследствие возникновения токов Холла при приложении постоянного магнитного поля в направлении, перпендикулярном поверхности штыря, и связанного с этим эффекта магнетосопротивления, может приводить к существенному изменению электродинамических характеристик системы.

В связи с этим были проведены измерения K_{ctU} исследуемой системы в полосе частот в зависимости от величины индукции магнитного поля B , приложенного в направлении, перпендикулярном поверхности штыря. Результаты этих измерений, приведённые на рис. 3, б, свидетельствуют о том, что при увеличении индукции магнитного поля B от 0 до 4000 Гс резонансная частота изменяется от 9.1 до 9.67 ГГц при практически неизменном значении K_{ctU} (кривая 1 соответствует отсутствию магнитного поля, кривая 2 соответствует индукции магнитного поля 1000, кривая 3 – 2000, кривая 4 – 4000 Гс, $w = 3$ мм, $g = 0.2$ мм, $s = 5$ мм, $l = 550$ мкм).

Было сделано предположение о том, что при использовании диафрагмы более сложной формы, чем это обычно принято, спектр

возникающих в её окрестности высших типов волн должен быть существенно богаче. Соответственно частотные интервалы между высшими типами волн, существующими в системе, могут быть малы. В результате при приближении такой диафрагмы к короткозамкателью можно ожидать формирования частотных характеристик, подобных характеристикам полосно пропускающих фильтров. Сделанное предположение было проверено нами экспериментально [7].

Была также исследована система из трёх ёмкостных диафрагм [9], последовательно расположенных вдоль прямоугольного волновода на расстояниях друг от друга, значительно меньших длины волны основного типа. Отверстия в диафрагмах располагались таким образом, чтобы центральная диафрагма как бы имитировала короткозамкатель для волны основного типа. То есть если в передней диафрагме ёмкостное отверстие располагалось внизу, то в центральной – вверху, а в выходной – вновь внизу. Как следует из результатов работы [9], частотная зависимость потерь пропускания в предложенной системе имеет вид резонансной зависимости с потерями в окрестности резонанса на уровне 1 дБ.

В экспериментах использовалась диафрагма, толщину которой (~130 мкм) по отношению к длине волны основного типа можно считать малой, т.е. по отношению к длине волны основного типа такую диафрагму можно считать тонкой. Длины волн выс-



ших типов, играющих определяющую роль в возникновении резонансов при расстояниях $0.1-0.01 \lambda_B$, намного меньше λ_B . Поэтому тонкая по отношению к длине волны основного типа диафрагма может быть довольно толстой по отношению к волнам высших типов. В этой связи можно ожидать существенного изменения характеристик, наблю-

даемых в рассматриваемой системе резонансов, при использовании сверхтонких по отношению к λ_B диафрагм. Были проведены измерения частотных зависимостей затухания исследуемой системы с ёмкостной диафрагмой и диафрагмой с отверстием сложной формы (диафрагма с отверстием сложной формы изображена на вставке к рис.4) [10].

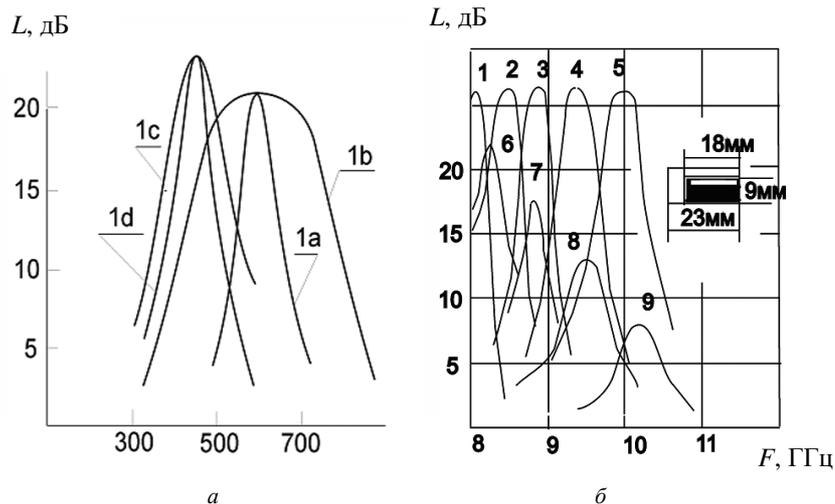


Рис. 4.

Из приведённых на рис. 4 результатов следует, что при использовании сверхтонкой диафрагмы для разных расстояний между поршнем и диафрагмой получаются однотипные зависимости L от f , чего не наблюдается при использовании диафрагм с толщиной, соизмеримой с длинами волн высших типов. Таким образом, резонансные или полосовые свойства в системе *диафрагма – короткозамыкающий поршень* могут быть достигнуты не только изменением формы отверстия диафрагмы, но и изменением её толщины.

Теоретически обосновано и экспериментально подтверждено, что создание условий для преимущественного возбуждения одного из возможных в системе *ёмкостная диафрагма – короткозамыкающий поршень* высших типов колебаний путём создания выступов и впадин в щели в количестве, соответствующем индексам этого типа, приводит к существенному уменьшению ширины резонансной кривой.

Показано, что использование исследованного [11] резонатора позволяет обеспе-

чить при различных расположениях отверстия малого диаметра в короткозамкательной повышенной чувствительность либо к изменению проводимости, либо к изменению диэлектрической проницаемости накладываемого на отверстие материала. Данный резонатор может быть использован для измерений параметров материалов с высокой степенью локальности.

При необходимости проведения с помощью такого резонатора измерений на разных частотах представляет интерес поиск способов его перестройки при неизменном положении короткозамкателя относительно диафрагмы. В этой связи нами была исследована возможность управления характеристиками такого резонатора внешним магнитным полем [12]. Такая возможность основывается на предположении, что в исследуемом резонаторе, вследствие малости его геометрических размеров, даже небольшое искажение СВЧ-тока в размещённых в нём полупроводниковых вставках или в его стенках, связанное с воздействием магнитного поля и возникновением холловской составляющей СВЧ



тока, может сильно повлиять на характеристики резонанса. С целью теоретического обоснования возможности управления магнитным полем характеристиками исследуемых резонаторов был проведён расчёт резонатора, в котором в качестве материала для ёмкостной диафрагмы использовался *n-InSb*.

Для такой системы постоянные распространения γ можно определить, используя процедуру нахождения собственных значений произведения матриц $\tilde{\mathcal{E}}\tilde{M}$ для области волновода, содержащей полупроводниковый образец [13]. Матрицы $\tilde{\mathcal{E}}$ и \tilde{M} имеют следующий вид:

$$\tilde{M} = k_0 \times \begin{vmatrix} M_{\perp\perp} & M_{\perp\perp} - \frac{1}{k_0^2} X^E \mathcal{E}_{zz} X^E \\ M_{\perp\perp} & M_{\perp\perp} \end{vmatrix};$$

$$\tilde{\mathcal{E}} = k_0 \times \begin{vmatrix} \mathcal{E}_{\perp\perp} & \mathcal{E}_{\perp\perp} - \frac{1}{k_0^2} X^H M_{zz} X^H \\ \mathcal{E}_{\perp\perp} & \mathcal{E}_{\perp\perp} \end{vmatrix}.$$

Здесь $\mathcal{E}_{\perp\perp}, \mathcal{E}_{\perp\perp}, \mathcal{E}_{\perp\perp}, \mathcal{E}_{\perp\perp}, \mathcal{E}_{zz}, M_{\perp\perp}, M_{\perp\perp}, M_{\perp\perp}, M_{\perp\perp}, M_{zz}$ – матрицы, элементами которых являются, в свою очередь, матрицы с элементами

$$\mathcal{E}_{zi\,zj} = \varepsilon_0^2 (\varepsilon^{-1} \vec{E}_{zj}, \vec{E}_{zi}),$$

$$M_{zl\,zs} = \mu_0^2 (\mu^{-1} \vec{H}_{zs}, \vec{H}_{zl}),$$

$$\mathcal{E}_{\perp i\perp j} = (\varepsilon \vec{E}_{\perp j}, \vec{E}_{\perp i}),$$

$$\mathcal{E}_{\perp k\perp n} = (\varepsilon \vec{E}_{\perp n}, \vec{E}_{\perp k}),$$

$$\mathcal{E}_{\perp n\perp k} = (\varepsilon \vec{E}_{\perp k}, \vec{E}_{\perp n}),$$

$$\mathcal{E}_{\perp l\perp s} = (\varepsilon \vec{E}_{\perp s}, \vec{E}_{\perp l}),$$

$$M_{\perp k\perp n} = (\mu \vec{H}_{\perp n}, \vec{H}_{\perp k}),$$

$$M_{\perp n\perp k} = (\mu \vec{H}_{\perp k}, \vec{H}_{\perp n}),$$

$$M_{\perp i\perp j} = (\mu \vec{H}_{\perp j}, \vec{H}_{\perp i}),$$

$$M_{\perp l\perp s} = (\mu \vec{H}_{\perp s}, \vec{H}_{\perp l}),$$

где $i, j = 1, 2, \dots, M$; $l, s = 1, 2, \dots, N$; M – число базисных волн E -типа, N – число базисных волн H -типа; индексы k относятся к волнам H -типа, n – к волнам E -типа.

Выражения в круглых скобках представляют собой интегралы по поперечному сечению волновода для области с полупроводником от произведения матриц диэлектрической проницаемости ε (обратной матрицы ε^{-1}) соответственно магнитной проницаемости μ (обратной матрицы μ^{-1} , которую для полупроводника полагаем единичной матрицей) на соответствующие компоненты базисных функций [13].

В качестве базисных типов волн, кроме волны основного типа $H_{1,0}$, были выбраны следующие высшие типы: $H_{1,1}, H_{12,24}, H_{18,36}, H_{20,40}$. Выбор такого базиса обоснован численной оценкой величин матричных элементов, входящих в матрицы $\tilde{\mathcal{E}}, \tilde{M}$. С целью учёта вклада высших типов волн в коэффициент отражения матрица рассеяния S , соответствующая каждой из найденных постоянных распространения γ_i ,

$$S = -j \frac{1}{(\omega \mu_0 \mu / \gamma_i)^2} \times$$

$$\times \text{Sin}(\gamma_i L) \begin{vmatrix} j \frac{1}{(\omega \mu_0 \mu / \gamma_i)^2} \text{Sin}(\gamma_i L) & 0 \\ 0 & j \frac{1}{(\omega \mu_0 \mu / \gamma_i)^2} \text{Sin}(\gamma_i L) \end{vmatrix}$$

для каждого типа волн преобразуется в матрицу проводимости $Y = I - 2S(I + S)^{-1}$, соответствующую данной γ_i , нормированную на проводимость

$$Y_0 = \left(\frac{j\omega\mu_0\mu}{\sqrt{\left(\frac{m\pi}{a}\right)^2 + \left(\frac{n\pi}{b}\right)^2 - \left(\frac{\omega}{c}\right)^2}} \right)^{-1},$$

где L – расстояние от короткозамыкателя до диафрагмы, I – единичная матрица, в нашем случае она пятого порядка. Затем эти матрицы суммируются. Результирующая матрица проводимости преобразуется в матрицу рассеяния, элемент S_{11} которой и определяет искомый коэффициент отражения. При наличии продольного по отношению к направлению распространения электромагнитной волны магнитного поля диэлектрическая проницаемость полупроводника будет характеризоваться тензором [13]:



$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & 0 \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{zz} \end{pmatrix}.$$

Компоненты тензора находятся из соотношений:

$$\begin{aligned} \epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = & \epsilon_L - \frac{[1 + (\omega_c^2 + \omega^2)\tau^2] \omega_p^2 \tau}{\omega \left\{ [1 + (\omega_c^2 - \omega^2)\tau^2]^2 + 4\omega^2\tau^2 \right\}} + \\ & + j \frac{[1 - (\omega_c^2 - \omega^2)\tau^2] \omega_p^2 \tau^2}{[1 + (\omega_c^2 - \omega^2)\tau^2]^2 + 4\omega^2\tau^2}, \\ \epsilon_{xy} = -\epsilon_{yx} = & - \frac{[1 + (\omega_c^2 - \omega^2)\tau^2] \omega_p^2 \omega_c \tau^2}{\omega \left\{ [1 + (\omega_c^2 - \omega^2)\tau^2]^2 + 4\omega^2\tau^2 \right\}} + \\ & + j \frac{2\omega_p^2 \omega_c \tau^3}{[1 + (\omega_c^2 - \omega^2)\tau^2]^2 + 4\omega^2\tau^2}, \\ \epsilon_{zz} = \epsilon_L - & \frac{\omega_p \tau}{\omega(1 + \omega^2\tau^2)} + j \frac{\omega_p^2 \tau^2}{(1 + \omega^2\tau^2)}, \end{aligned}$$

где

$$\omega_c = \frac{eB_0}{m^*}, \quad \omega_p = \frac{ne^2}{m^* \epsilon_0},$$

m^* — эффективная масса носителей, n — концентрация носителей в полупроводнике, B_0 — магнитная индукция, τ — время релаксации.

При расчёте использовалось значение концентрации электронов $n = 2,8 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Выбирались следующие размеры резонатора: сечение $7.2 \times 3.4 \text{ мм}$, расстояние от диафрагмы до короткозамыкающего поршня $\approx 150 \text{ мкм}$, толщина диафрагмы — 1 мм , высота ёмкостного зазора — 0.4 мм , длина — 7.2 мм .

На рис. 5, а, где 1 — полупроводниковая диафрагма, 2 — поршень, 3 — прямоугольный волновод, приведены результаты расчёта зависимости коэффициента стоячей волны по напряжению ($K_{ст}U$) в отсутствие магнитного поля (пунктирная кривая А) и при воздействии магнитного поля, направленного перпендикулярно к плоскости диафрагмы с величиной индукции $B = 8000 \text{ Гс}$ (пунктирная кривая В). Из приведённых на этом рисунке результатов расчёта следует, что приложение магнитного поля должно приводить к существенной перестройке резонансной частоты. Были проведены исследования частотных характеристик резонатора в отсутствие магнитного поля (кривая 1) и при приложении магнитного поля с индукцией $B = 8000 \text{ Гс}$, направленного перпендикулярно к плоскости диафрагмы (кривая 2, а), с параметрами, полностью соответствующими заданным при расчёте.

Из вида кривых 1 и 2, а следует, что для выбранного направления магнитного поля при изменении его индукции $K_{ст}U$ в точке резонанса практически не изменяется, тогда как значение резонансной частоты изменяется в довольно широком интервале значений.

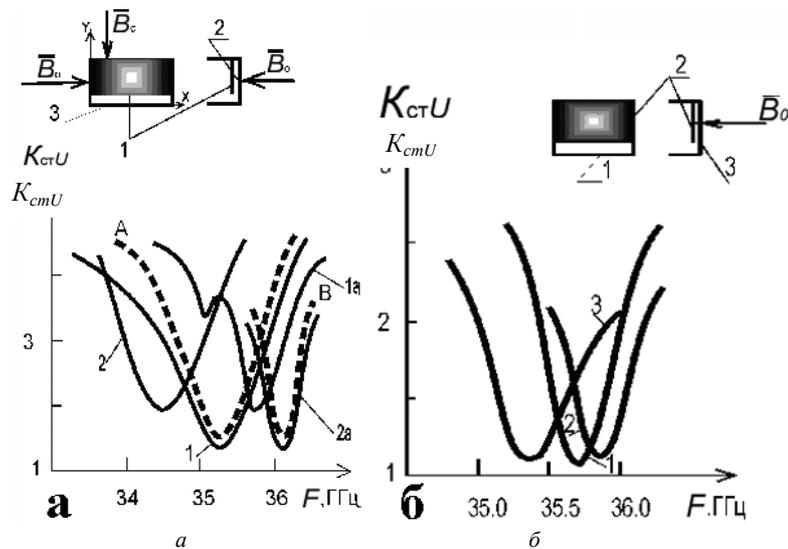


Рис. 5



Таким образом, можно заключить, что данная система выполняет функции резонатора, перестраиваемого магнитным полем. Были проведены дополнительные экспериментальные исследования для выяснения влияния направления магнитного поля на характеристики резонатора. Кривая Ia соответствует случаю, когда магнитное поле с индукцией 8000 Гс приложено перпендикулярно широкой стенке волновода, кривая 2 – узкой. Из приведённых на этом рисунке результатов следует, что по сравнению со случаем, когда магнитное поле приложено перпендикулярно плоскости диафрагмы, для других направлений магнитного поля с увеличением его индукции изменяется $K_{ст}U$ в точке резонанса.

Полупроводниковый материал, использованный в наших экспериментах, является сравнительно узкозонным полупроводником с высокоподвижными носителями заряда, который уже при комнатной температуре имеет высокую собственную проводимость. Холловская компонента СВЧ-тока в таком полупроводнике при приложении магнитного поля довольно велика, и поэтому изменения электродинамических характеристик рассматриваемых систем при приложении магнитного поля значительны. Естественно предположить, что в резонаторе, образованном короткозамкнутым металлическим отрезком волновода и близкорасположенной металлической диафрагмой, в достаточно сильном магнитном поле, вследствие возникновения холловских компонент СВЧ тока в металлических стенках возможно определённое изменение $K_{ст}U$ и частоты резонанса при приложении магнитного поля и без полупроводника.

В частности, можно предположить, что должно наблюдаться изменение резонансной частоты при неизменном $K_{ст}U$ рассматриваемой резонансной системы без полупроводниковой вставки, если магнитное поле направлено перпендикулярно торцу волновода.

Экспериментальная проверка сделанных предположений была проведена на той же резонансной системе, что и в предыдущем случае. Результаты измерений зависимости характеристик исследуемой резонансной системы от величины индукции магнитного поля, направленного перпендикулярно торцу

волновода, приведены на рис. 5, б (1 – прямоугольный волновод, 2 – диафрагма, 3 – поршень). Из них следует, что при изменении величины индукции магнитного поля от нуля (кривая 1) до 4000 Гс (кривая 2), резонанс сдвигается в сторону высоких частот, тогда как значение $K_{ст}U$ в резонансе изменяется незначительно. Дальнейшее увеличение магнитной индукции приводит к уменьшению частоты резонанса (кривая 3 – 8000 Гс).

По аналогии с квантоворазмерными полупроводниковыми структурами такие резонаторы можно назвать резонаторами с пониженной размерностью, в данном конкретном случае двумерными или $2D$ -резонаторами. В связи с малым продольным размером резонатора типа *диафрагма – близко расположенный поршень* за счёт изменения этого размера его плавная механическая перестройка затруднительна, так как предполагает наличие механизма, плавно и с высокой степенью точности реализующего микроперемещение. В связи с этим для таких систем представляет интерес осуществление плавной перестройки резонансных характеристик электрическим путём.

В качестве элемента с электрически перестраиваемой ёмкостью был выбран серийный диод 2A709В. Исследовалась возможность электрической перестройки резонансных систем *диафрагма – близко расположенный поршень* и *металлический штырь с ёмкостным зазором – близко расположенный поршень* [14].

Нами исследована также система, в которой колебания возбуждаются через индуктивную диафрагму, а зондирующая часть представляет собой ёмкостную диафрагму. В такой системе наблюдалось проявление резонансных свойств, а следовательно, высокая чувствительность к изменению характеристик вносимого в её контур объекта. Результаты измерений приведены на рис. 6. В качестве объекта с изменяющимися свойствами использовалась ячейка (3) из восьми соединённых параллельно $p-i-n$ -диодов типа 2K543A (4), размещённых на поликоровом основании, с размерами 8×4 мм, установленная в отверстие ёмкостной диафрагмы на расстоянии от боковой стенки волновода 11.5 мм.

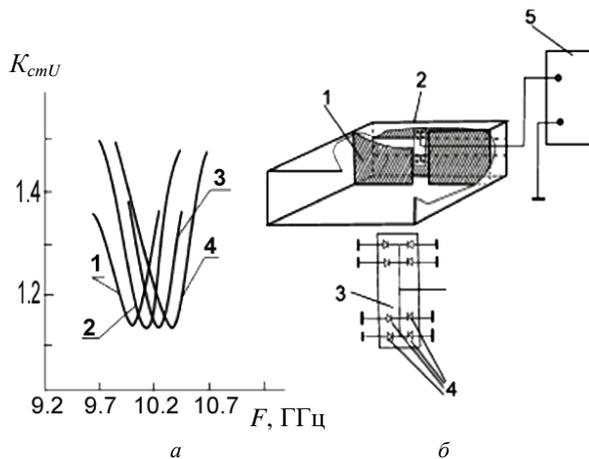


Рис. 6

Кривые 1–4 на рис. 6 соответствуют величине расстояния между диафрагмами 1.5 мм. На диоды подавалось прямое напряжение смещения. Кривая 1 соответствует напряжению смещения 0.8 В, кривая 2 – 0.9 В; кривая 3 – 1 В; кривая 4 – 1.1 В.

Из результатов измерений, приведённых на рис. 6, следует, что при увеличении прямого смещения на диодах резонансная частота исследуемой системы увеличивается, причём перестройка частоты не сопровождается изменением коэффициента стоячей волны $K_{ст}U$.

Таким образом показано, что при расстояниях $l \sim 0.01 \lambda_b$, где λ_b – длина волны в волноводе, с увеличением l частота резонанса увеличивается. Обнаружена возможность управления характеристиками резонанса магнитным полем или подачей электрического смещения на полупроводниковую структуру, помещённую в ёмкостной зазор диафрагмы [15].

Выше была показана возможность возникновения низкоразмерных резонансов в волноводных системах. В [16] приведены результаты исследований возможности возникновения такого рода резонансных характеристик отражения в микрополосковой системе.

Для выявления общности установленных закономерностей были предприняты исследования низкоразмерных систем из металлических диафрагм с отверстиями, предназначенных для использования в ИК- и видимом диапазонах длин волн.

Использовалась система из двух слоёв алюминиевой фольги с толщиной ≈ 0.5 мкм, в одном из которых пробивалось отверстие прямоугольной формы с размерами $\approx 1 \times 5000$ мкм. Слои алюминиевой фольги разделялись между собой слоем диэлектрика, функцию которого выполняли расположенные на обращённых друг к другу поверхностях алюминия естественным образом образующиеся плёнки окисла алюминия, суммарная толщина которых составляла ~ 200 ангстрем, что для коротковолновой области инфракрасного диапазона составляет $\approx 1/100$ длины волны. Максимальное поглощение наблюдалось для излучения с длиной волны ≈ 8 мкм. Наблюдались также пики поглощения при длинах волн 4.5 мкм и 12 мкм.

Специфической особенностью резонансов, описанных нами в [17], является сдвиг их характерных частот при увеличении расстояния до короткозамыкателя в сторону меньших длин волн. Отмечаются возможности использования предложенной системы для создания перестраиваемых фильтров ИК излучения.

Представленная на рис. 7 система из диафрагм 3, разделённых диэлектриком, устанавливалась в зазоре магнита [18]. В качестве источника излучения использовался светодиод АЛ307 БМ (1) (длина волны излучения 0.66 мкм). Величина магнитного поля регулировалась изменением зазора между его полюсами и контролировалась с помощью полупроводникового датчика Холла 4. Амплитуда прошедшего света фиксировалась фотоприёмником 5 на основе кремниевой $n-i-p-i-n$ -структуры, установленной вплотную к системе с диафрагмами.

Из результатов измерений, приведённых на рис. 8, следует, что при изменении величины индукции магнитного поля B от нуля до 8000 Гс регистрируемый сигнал на фото-

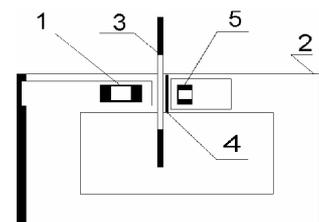


Рис. 7

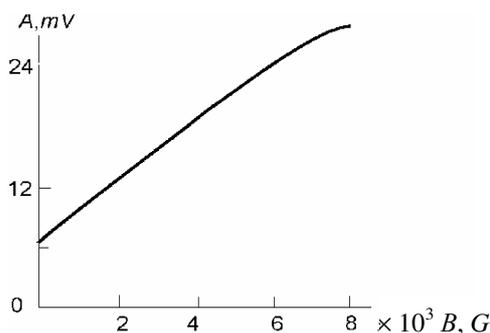


Рис. 8

приёмнике изменялся от 6.6 до 27.6 мВ, что свидетельствует об увеличении пропускания излучения с ростом B .

Таким образом, установлены новые типы резонансов в электродинамических низкоразмерных системах с полупроводниками и полупроводниковыми структурами, металлическими и диэлектрическими включениями, обусловленные многомодовыми режимами работы, разработаны и созданы на их основе новые типы полупроводниковых СВЧ-устройств.

Библиографический список

1. Усанов Д.А., Вагарин А.Ю. Немонотонная зависимость затухания волны в волноводе от проводимости и толщины помещенного в него полупроводника // Радиотехника и электроника. 1978. Т.23, №3. С.470–474.
2. Усанов Д.А., Феклистов В.Б., Вагарин А.Ю. Влияние высших типов волн на затухание волны в волноводе, содержащем полупроводник // Радиотехника и электроника. 1979. Т.24, №8. С.1681–1683.
3. Hirota R., Suzuki K. Field distribution in a magnetoplasma-loaded waveguide at room temperature // IEEE Trans. on Microwave Theory and Tech. 1970. V.18, №4. P.188–195.
4. Усанов Д.А., Орлов В.Е. Немонотонная зависимость затухания электромагнитной волны от уровня инжекции в $p-i-n$ -диодных структурах, помещенных в волновод // Радиотехника и электроника. 1987. Т.32, №5. С.1129–1131.
5. Виненко В.Г., Лицов А.А., Усанов Д.А. Влияние высших типов колебаний на характеристики волноводных управляющих устройств на $p-i-n$ -диодах // Радиотехника и электроника. 1983. Т.28, №1. С.201–203.

6. Усанов Д.А., Занин В.И., Феклистов В.Б. Зависимость затухания волны в волноводе, содержащем двухслойную структуру полупроводник–диэлектрик, от проводимости и толщины полупроводника // Изв. вузов. Сер. Радиоэлектроника. 1992. Т.35, №8. С.715–723.

7. Усанов Д.А., Горбатов С.С., Вениг С.Б., Орлов В.Е. Резонансы в полубесконечном волноводе с диафрагмой, связанные с возбуждением волн высших типов // Письма в ЖТФ. 2000. Т.26, №18. С.47–49.

8. Эйзенхарт Р., Кан Р. Теоретическое и экспериментальное исследование держателя СВЧ-элемента в волноводе // Зарубежная радиоэлектроника. 1970. №8. С.102–125.

9. Усанов Д.А., Горбатов С.С. Резонансное пропускание волны в прямоугольном волноводе, содержащем близкорасположенные диафрагмы с неперекрывающимися отверстиями // Радиотехника и электроника. 2004. Т.49, №4. С.458–459.

10. Горбатов С.С., Усанов Д.А. Резонансы в системе сверхтонкая диафрагма короткозамыкающий поршень // Актуальные проблемы электронного приборостроения: Тез. науч.-техн. конф. Саратов, 2004. С.289–291.

11. Усанов Д.А., Горбатов С.С. Волноводный измерительный резонатор // Изв. вузов. Сер. Радиоэлектроника. 2002. Т.45, №9. С.26–28.

12. Усанов Д.А., Горбатов С.С. Управляемые магнитным полем резонансы в СВЧ системах с полупроводниковыми диодами // Моделирование в прикладной электродинамике и электронике: Сб. науч. тр. Саратов: Изд-во Сарат. ун-та, 2005. Вып.6. С.50–54.

13. Усанов Д.А., Кабанов Л.Н., Горбатов С.С. О применении вариационного метода к расчету волновода, частично заполненного полупроводником // Физика полупроводников и полупроводниковая электроника. 1976. Вып.7. С.112–117.

14. Усанов Д.А., Горбатов С.С. Управляемый магнитным полем СВЧ-выключатель на $p-i-n$ -диодах // Приборы и техника эксперимента. 2003. №1. С.72–73.

15. Усанов Д.А., Горбатов С.С. Электрически управляемый низкоразмерный СВЧ-резонатор // Приборы и техника эксперимента. 2006. №3. С.100–102.

16. Усанов Д.А., Горбатов С.С. Резонансы в микрополосковой системе диафрагма-короткозамыкающий поршень // Изв. вузов. Радиоэлектроника 2005. Т.48, №5. С.402–405.

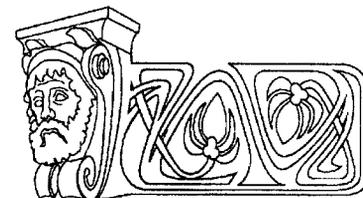
17. Усанов Д.А., Горбатов С.С. Резонансное поглощение инфракрасного излучения системой металл – тонкий слой диэлектрика – диафрагма с отверстием // Письма в ЖТФ. 2001. Т.27, №21. С.81–83.

18. Усанов Д.А., Горбатов С.С. Управляемое магнитным полем пропускание света системой из металлических диафрагм с отверстиями, разделённых тонким слоем диэлектрика // Письма в ЖТФ. 2004. Т.30, №14. С.25–29.



УДК 535.345.1

РЕЗОНАНСНОЕ САМОВОЗДЕЙСТВИЕ И НЕСТАЦИОНАРНЫЕ КОГЕРЕНТНЫЕ ЭФФЕКТЫ В ЛАЗЕРНЫХ ПУЧКАХ, МОДУЛИРОВАННЫХ ПО ЧАСТОТЕ



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

Саратовский государственный технический университет

* Саратовский государственный университет,
кафедра теоретической и ядерной физики

E-mail: inna_pls@mail.ru

На основе численного моделирования исследуется распространение частотно-модулированного лазерного пучка в двухуровневой нелинейно-оптической среде с насыщением поглощения и дисперсии. Исследуются зависимости выходной интенсивности пучка от времени и частоты при условиях, когда период модуляции сравним с атомными временами релаксации. В этом случае проявляется задержка отклика среды на распространяющееся излучение, в том числе эффекты наведённой линзы и диафрагмы, которые зависят от времени и являются весьма важными для спектроскопии. В настоящей работе анализируется совместное проявление и взаимодействие двух типов эффектов: резонансного самовоздействия пучка и нестационарных когерентных эффектов типа затухания свободной поляризации.

Resonant Self-Action and Non-Stationary Coherent Transients in Frequency-Modulated CW Laser Beams

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

Periodical modulation of frequency, typical for spectroscopic purposes, is numerically modelled in transversely limited, propagating through a saturable two-level absorber cw laser beams. 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, including time-dependent lens and aperture effects that may be of importance in spectroscopy. Simultaneous manifestation and interaction of resonant self-action and non-stationary transients are analyzed in present work.

Распространение лазерного излучения, модулированного по частоте, в нелинейно-оптических средах в условиях точного резонанса представляет интерес для задач спектроскопии, стабилизации частоты лазеров, передачи сигналов через элементы оптоволоконных систем, содержащих резонансно поглощающие или усиливающие примеси. При распространении в среде поперечно ограниченных пучков с высокой интенсивностью начинают проявляться эффекты насыщения поглощения и дисперсии, характеризующиеся тем, что с ростом интенсивности поля при отрицательных отстройках от резонанса абсолютное значение показателя преломления уменьшается, при положительных отстрой-

ках – растёт, а коэффициент поглощения в условиях точного резонанса с ростом интенсивности поля уменьшается. В таких условиях начинают проявляться эффекты резонансного самовоздействия (самофокусировка и самодиафрагмирование пучка), обнаруженные как теоретически [1], так и экспериментально [2] и подробно исследованные в стационарном случае [3, 4]. Особенностью нестационарного случая, когда частота модуляции сравнима с характерными временами затухания разности заселенностей и поляризации среды, является невозможность непосредственно использовать восприимчивость среды в уравнениях для поля. В этом случае требуется одновременное решение уравнений, описывающих отклик среды, и волнового уравнения, описывающего распространение лазерного пучка. В скалярном приближении для медленных огибающих поля и поляризации и при использовании простейшей двухуровневой модели среды соответствующие уравнения представляют собой хорошо известную систему уравнений Максвелла–Блоха.

Моделирование распространения частотно-модулированного пучка через двухуровневую среду с насыщением поглощения и дисперсии, проведенное нами ранее на указанной основе [5], продемонстрировало ряд особенностей нестационарного самовоздействия пучка, зависящих от частоты модуляции и, в частности, приводящих к заметной асимметрии спектра насыщенного поглощения. С другой стороны, известно, что при быстром прохождении частоты лазера через резонанс с атомным переходом даже в линейном случае возникают переходные оптические процессы, подобные оптической ну-



тации [6]. В настоящей работе с помощью численного моделирования анализируется одновременное проявление и взаимное влияние резонансного самовоздействия лазерного пучка и нестационарных когерентных эффектов при периодическом сканировании частоты пучка вблизи атомного резонанса. Была исследована зависимость выходной интенсивности пучка от частоты лазера, модулируемой по гармоническому закону. Обнаружено, что эта зависимость является очень чувствительной к нестационарным свойствам среды, которые начинают проявляться при относительно низких частотах модуляции: порядка 10% от ширины линии перехода. Показано, что с увеличением амплитуды частотной модуляции при каждом прохождении резонанса лазерной частотой возникает переходный процесс, напоминающий оптическую нутацию, проявляющийся даже в случае слабых полей и оптически тонкого слоя. В сильных полях и протяжённых средах на развитие этого процесса влияют эффекты резонансного самовоздействия лазерного пучка, в частности эффекты наведённой линзы и наведённой диафрагмы.

Исходные уравнения модели в безразмерных единицах имеют вид:

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

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

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

где ∇_{\perp}^2 – поперечный лапласиан, g – линейное поглощение на единичной длине, γ , Γ – скорости релаксации заселённости и затухания поляризации соответственно, $D(z, \rho, t)$ – разность заселённостей, нормированная на её величину в отсутствие насыщения, $E(z, \rho, t)$, $P(z, \rho, t)$ – медленно меняющиеся амплитуды электрического поля и поляризации соответственно, Δ – отстройка несущей частоты от частоты атомного перехода. Единица амплитуды поля соответствует уровню насыщения $D = 0.5$. Продольная координата z

измеряется в единицах дифракционной длины, поперечная координата ρ нормирована на характерный радиус пучка.

Для решения уравнений использовалась схема второго порядка по продольной координате и времени [5] и разложение поперечной структуры поля по модам Гаусса–Лагерра свободного пространства с параметром исходного пучка [7]. Частота пучка на входе в среду гармонически модулировалась по времени, $\omega = \omega_0 + \omega_1 \sin \Omega t$, где ω_0 – несущая лазерная частота, ω_1 – амплитуда частоты модуляции, Ω – частота модуляции.

Профиль пучка на входе в среду брался гауссовым, таким образом, комплексная амплитуда входного поля имела вид

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

Начальный радиус пучка a во всех рассматриваемых случаях был взят равным 1. Мы предполагаем, что центральная несущая частота ω_0 равна частоте атомного перехода, таким образом, $\Delta = 0$ в формуле (3). В этом случае частота модулированного поля осциллирует симметрично по отношению к точной величине резонанса. Время и частота нормированы на времена релаксации. Для упрощения были взяты равные значения $\gamma = \Gamma = 1$.

Рассмотрим сначала случай слабого поля, когда изменения заселённости пренебрежимо малы. На рис. 1, a демонстрируется зависимость выходной интенсивности от частоты лазера при $E_0 = 0.1$, $\Omega = 0.5$, $\omega_1 = 2$ с коррекцией времени распространения от входа до выхода из среды. Был рассмотрен один период стационарных осцилляций, возникающих после исходного переходного процесса, таким образом, частота лазера сканировалась вдоль атомного резонанса вперёд и назад. Было замечено, что провал интенсивности симметрично сдвигается в зависимости от направления сканирования частоты таким образом, что кривая зависимости за полный период напоминает петлю гистерезиса. Этот эффект представляет собой проявление нестационарного отклика среды, который постепенно исчезает по мере приближения частоты модуляции Ω к нулю.

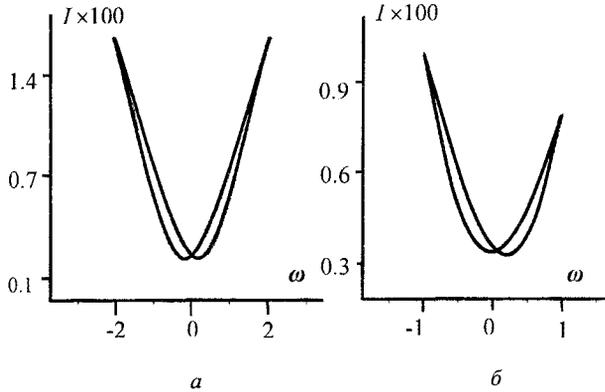


Рис. 1. Зависимость интенсивности на выходе из среды I от частоты лазера ω : a – при отсутствии насыщения, $E_0 = 0.1$, $\Omega = 0.5$, $\omega_1 = 2$ (слабое поле); b – при умеренном насыщении, $E_0 = 3$, $\Omega = 0.5$, $\omega_1 = 2$ (среднее поле)

Влияние насыщения проиллюстрировано на рис. 1, b , где $E_0 = 3$, $\Omega = 0.5$. Причиной асимметрии является резонансная самофокусировка, вызванная наведенной линзой, меняющей свой знак в момент прохождения резонанса. Асимметрия усиливается с увеличением частоты лазера, кроме того, присутствует эффект гистерезиса. Проявления запаздывающего отклика среды достаточно хорошо можно отследить также по зависимости выходной интенсивности от времени (рис. 3), но частотные зависимости дают более ясное представление об эффекте.

Очевидно, что данный эффект должен возникать даже в случае оптически тонкого слоя, когда отсутствуют эффекты, связанные с распространением, такие как дифракция и самофокусировка пучка. В этом случае решается только система уравнений Блоха (2), (3) для среды, а интенсивность ищется как аппроксимация первого порядка решения волнового уравнения (1):

$$I(\Delta z) = |E|^2 + \frac{i}{2} \Delta z (EP^* - E^*P) + \frac{1}{4} (\Delta z)^2 |P|^2, \quad (5)$$

где Δz – толщина слоя.

Видно (рис. 2, a), что величина расщепления сравнима со случаем протяжённой среды (рис. 1, a), а в сильных полях (рис. 2, b) отсутствует асимметрия, вызванная самофокусировкой.

Проведенные численные исследования продемонстрировали также связь нестационарных когерентных процессов и эффектов резонансного самовоздействия.

Рассмотрим случай, когда частота модуляции сравнима со скоростями затухания $\Omega = 0.5\pi$, а амплитуда модуляции меньше ширины спектральной линии среды. В условиях заметного насыщения $E_0 = 5$ хорошо видны проявления резонансной самофокусировки (рис. 3, a): при уходе частоты от резонанса вверх, когда наведенная линза имеет положительный знак, интенсивность на оси пучка из-за фокусировки заметно больше, чем при уходе вниз, когда знак линзы отрицательный и имеет место самодефокусировка. Это подтверждается расчетом временной зависимости размера пятна (рис. 3, b) $w(t)$, определяемого как второй момент поперечного распределения нормированной интенсивности:

$$w^2(t) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty \rho^3 d\rho |E(Z, \rho, \varphi, t)|^2 \times \left\{ \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\infty \rho d\rho |E(Z, \rho, \varphi, t)|^2 \right\}^{-1} \quad (6)$$

Длина распространения в дифракционных длинах составляла $Z = z_{\max} = 6$, линейное поглощение g принималось равным 1.

При той же частоте модуляции и увеличении амплитуды частотной модуляции характер взаимодействия пучка со средой меняется: большую часть времени частота света далека от резонанса, и лишь на короткое время при прохождении резонанса взаимодействие велико. В некотором смысле такой эффект похож на действие серии коротких

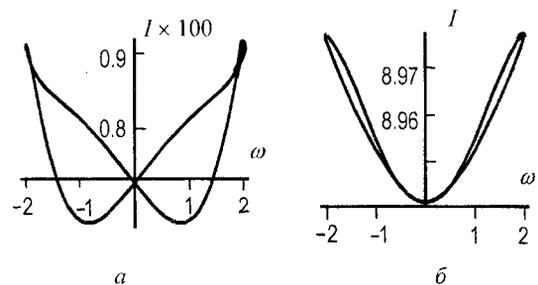


Рис. 2. Зависимость интенсивности пучка I от частоты лазера ω при $\Omega = 0.5$, $\omega_1 = 2$: a – в случае слабого поля, $E_0 = 0.1$; b – в случае сильного поля, $E_0 = 3$

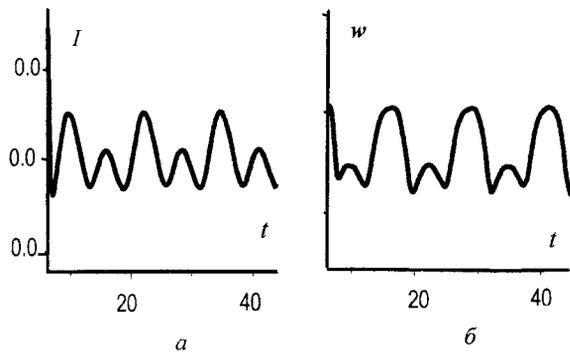


Рис.3. Интенсивность на оси пучка I (а) и размер пятна w (б) в условиях значительного насыщения, $E_0=3$, частота модуляции $\Omega = 0.5$, амплитуда модуляции $\omega_1 = 1$

импульсов, каждый из которых вызывает оптический переходный процесс, аналогичный оптической нутации (рис. 4, 5). Воздействие поля на среду в этом случае подобно серии коротких ударов, каждый из которых вызывает осцилляции поляризации и, таким образом, осцилляции выходной интенсивности, что хорошо видно как на графике зависимости интенсивности от частоты лазера (рис. 4), так и на временных зависимостях интенсивности на оси пучка и размера пятна (рис. 5).

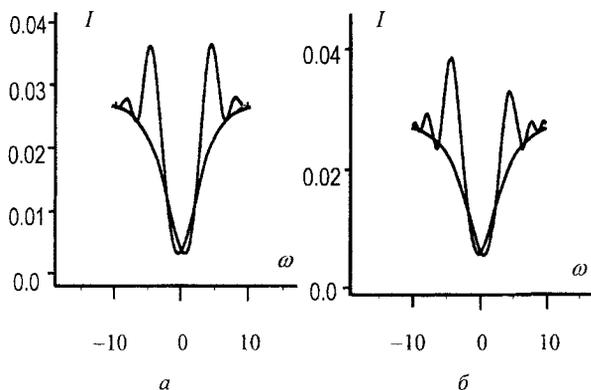


Рис. 4. Проявление нестационарных когерентных эффектов при $\Omega = 0.5$, $\omega_1 = 10$: а – в случае слабого поля, $E_0 = 0.1$; б – в случае сильного поля, $E_0 = 3$

Необходимо отметить, что данный эффект одинаково сильно проявляется как в случае протяжённой среды, так и в случае оптически тонкого слоя, что закономерно объясняется природой этого явления, в основе которого лежит нестационарный отклик среды на воздействующее поле.

Влияние самофокусирующих свойств среды заключается в различном кратковременном воздействии при прохождении резонанса сверху вниз и снизу вверх, что прояв-

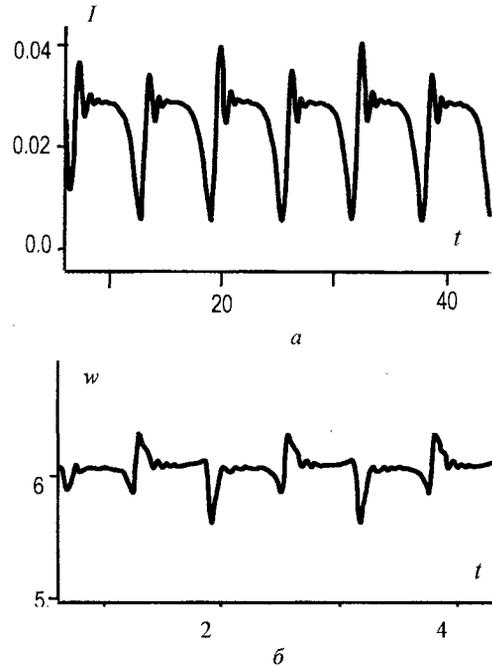


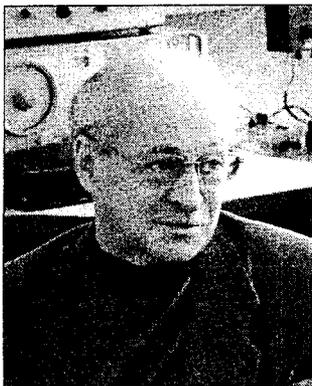
Рис. 5. Интенсивность на оси пучка I (а) и размер пятна w (б) в условиях появления нестационарных когерентных эффектов: $E_0 = 3$, $\Omega = 0.5$, амплитуда модуляции $\omega_1 = 10$

ляется в асимметрии зависимости интенсивности от частоты лазера (см. рис. 4, б), а также в различной форме и амплитуде переходных осцилляций интенсивности и соответствующих изменений размера пятна (см. рис. 5). Описанный эффект можно использовать для получения дополнительной спектроскопической информации о свойствах среды.

Библиографический список

1. Javan A., Kelley P. Possibility of self-focusing due to intensity dependent anomalous dispersion // IEEE J. Quant. Electron. 1966. Vol.2, №9. P.470–473.
2. Bjorkholm J.C., Ashkin A. CW self-focusing and self-trapping of light in sodium vapor // Phys. Rev. Lett. 1974. Vol.32. P.129–132.
3. Dowell M.L., Hart R.C., Gallagher A., Cooper J. Self-focused light propagation in fully saturable medium: experiment // Phys. Rev. A. 1996. Vol.53, №3. P.1775–1781.
4. Базаров Е.Н., Герасимов Г.А., Губин В.П., Старостин Н.И., Фомин В.В. Динамическая самофокусировка гауссова светового пучка при насыщении неоднородно-уширенной линии поглощения // Квантовая электроника. 1990. Т.17, №2. С.207–210.
5. Derbov V.L., Plastun I.L., Serov V.V., Trofimov A.V. Influence of the resonant self-action and nonstationary coherent effects on the characteristics of a frequency-modulated laser beam // Proc. SPIE. 2007. Vol.6537. P.125–132.
6. Шен И.П. Принципы нелинейной оптики. М.: Наука, 1989.
7. Melnikov L.A., Derbov V.L., Veshneva I.V., Komukhov A.I. Numerical studies of beam and pulse propagation in lasers and nonlinear media: transverse pattern dynamics and nonparaxial effects // Computers Math. Applic. 1997. Vol.34, №7/8. P.881–909.

ХРОНИКА

**ДМИТРИЙ ИВАНОВИЧ ТРУБЕЦКОВ:
к 70-летию со дня рождения**

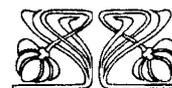
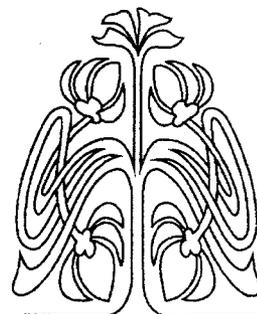
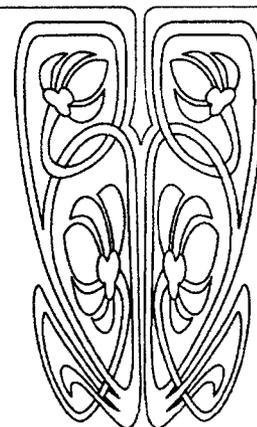
Член-корреспондент РАН, заслуженный деятель науки РФ, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой электроники, колебаний и волн Саратовского государственного университета Дмитрий Иванович Трубецков – крупный ученый в области сверхвысокочастотной электроники, радиофизики, нелинейной динамики, создатель научной школы в Саратовском государственном университете

по теоретическому и экспериментальному исследованию нелинейных и нестационарных явлений и закономерностей сложной динамики, включая динамический хаос и образование структур, в различных автоколебательных распределенных и сосредоточенных системах, в том числе радиофизической природы (устройства вакуумной электроники СВЧ и вакуумной микроэлектроники, радиотехнические цепочки, решетки и сети из различных динамических элементов), а также в моделях экологии, биологии, медицины и социальных наук.

Д.И. Трубецков – автор свыше 500 научных публикаций, в том числе 23 монографий и учебных пособий. Среди его учеников – 10 докторов и 34 кандидата наук. Начиная с 1995 года, научная школа Д.И. Трубецкова пять раз признавалась победителем конкурсов на звание ведущей научной школы России.

Дмитрий Иванович Трубецков родился 14 июня 1938 г. в Саратове. Воспитывался в семье деда и бабушки по линии матери. Те, хотя и не имели полного школьного образования, были людьми мудрыми и очень хотели видеть внука «ученым человеком». В 1955 г. Дмитрий Иванович окончил с золотой медалью мужскую школу № 19 (это был последний «мужской» выпуск в истории советской школы) и поступил на физический факультет Саратовского государственного университета. Выбор будущей профессии был вполне осознанным – физика увлекала его со школьных лет, в чем свою роль сыграл и школьный преподаватель физики В.С. Романов. В те годы среди школьных учителей было много мужчин-фронтовиков, которые могли учить не только школьным предметам, но и реалиям жизни.

С Саратовским государственным университетом оказалась связанной вся последующая жизнь Д.И. Трубецкова. А началась она с удивительных событий, вызванных участием тогдашнего студенчества в масштабной общегосударственной кампании по

**ПРИЛОЖЕНИЯ**



освоению целинных и залежных земель. За активную работу на уборке урожая на саратовской целине студент Дмитрий Трубецков был награжден орденом «Знак Почета» и медалью «За освоение целинных и залежных земель».

Окончив университет с отличием в 1960 г., Д.И. Трубецков был рекомендован к обучению в аспирантуре, где его научным руководителем стал профессор Владимир Николаевич Шевчик, общепризнанный научный авторитет в области электроники СВЧ, будущий ректор Саратовского госуниверситета. Собственно, научной работой Дмитрий Иванович стал заниматься, будучи студентом третьего курса, и первая его (совместная с В.Н. Шевчиком) публикация появилась еще в студенческую пору. Чуть позднее была опубликована и его дипломная работа. В очной аспирантуре Дмитрий Иванович проучился год, а затем стал работать ассистентом кафедры электроники, перейдя в заочную аспирантуру.

Созданная в 1952 г. на волне расцвета электронной промышленности в стране и, в частности, в Саратове, кафедра электроники была удивительным коллективом, который ее заведующий В.Н. Шевчик¹ называл «ансамблем солистов». Здесь было у кого учиться. В те годы особую роль в развитии как кафедры, так и всей саратовской «электронной» науки, играл научный семинар, регулярно проходивший на кафедре электроники. Он имел высокий научный статус; на нем стремились выступить многие саратовские электронщики, а также и специалисты из других городов СССР. Удачное выступление на этом семинаре имело огромное значение для докладчика. Для Дмитрия Ивановича первым выступлением на этом семинаре стал доклад по дипломной работе. Он прошел столь убедительно, что его освободили от формальной процедуры по защите диплома. Спустя некоторое время Дмитрий Иванович был назначен ученым секретарем этого семинара; это способствовало развитию широ-

ты его научных взглядов и установлению личных научных контактов. Забегая вперед, можно отметить, что сегодня летопись этих семинаров содержит сведения о 1200 (!) докладах и сообщениях.

Научная деятельность аспиранта Д. Трубецкова протекала более чем успешно, и в 1965 г. он защитил в СГУ диссертацию «Некоторые специальные вопросы линейной теории лучевых приборов магнетронного типа» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. Официальными оппонентами были профессор Петр Васильевич Голубков и будущий профессор Всеволод Семенович Стальмахов. Как почетное признание научных успехов Д.И. Трубецкова тех лет стало избрание его в 1966 г. делегатом XV съезда ВЛКСМ.

По признанию Дмитрия Ивановича, с 1967–1968 гг. на его становление как теоретика в области сверхвысокочастотной электроники, а также на стиль научных исследований огромное влияние оказывал член-корреспондент АН СССР Лев Альбертович Вайнштейн. Впоследствии Л.А. Вайнштейн, московский профессор В.Т. Овчаров и профессор В.С. Стальмахов стали официальными оппонентами по докторской диссертации Д.И. Трубецкова «Нелинейные переходные процессы при взаимодействии электронного потока в скрещенных полях с электромагнитной волной», защита которой состоялась в 1978 г. в диссертационном совете при СГУ. В качестве ведущей (оппонирующей) организации, проведшей анализ научной и прикладной значимости диссертационной работы, выступил научно-исследовательский институт «Исток» (г. Фрязино Московской обл.), являвшийся (и остающийся по настоящее время) главным исследовательским центром России в области отечественной электроники. Одним из «kozyрей» Дмитрия Ивановича при защите докторской диссертации стала получившая широчайшую известность его монография (в соавторстве с В.Н. Шевчиком) «Аналитические методы расчета в электронике СВЧ», изданная в Москве в 1970 г. (журнал «Электронная техника» включил эту книгу в «золотой фонд советской электроники»). Кроме того, по теме диссертации

¹ В момент организации кафедры ее заведующим был назначен П.В. Голубков, спустя некоторое время функции заведующего перешли к Б.М. Заморозкову.



Дмитрия Ивановича было опубликовано несколько десятков статей в ведущих научных журналах страны.

В 1980 г. Д.И. Трубецкову было присвоено ученое звание профессора по кафедре электроники, а в 1981 г. он возглавил ее (современное название кафедры – кафедра электроники, колебаний и волн). В числе самых первых учеников Дмитрия Ивановича, защитивших кандидатские диссертации под его руководством, были профессор Ю.П. Шаравский, В.П. Шахин (ныне представитель России в ЕС в Брюсселе), профессор Ю.И. Лёвин, бывший директор НИИ механики и физики СГУ Р.Ш. Амиров и др. Кроме того, Дмитрий Иванович всегда оказывал и оказывает свою поддержку многим соискателям или авторам книг и статей в качестве официального оппонента или доброго советчика.

Для стиля научной деятельности Дмитрия Ивановича присущи две взаимосвязанные характерные черты: во-первых, это постоянное стремление быть на передовых рубежах науки (что сопряжено, в частности, с постоянным расширением научного кругозора и направлений исследований) и, во-вторых, установление тесных научных контактов с ведущими отечественными и зарубежными учеными (это, в частности, достигается им посредством организации ставших традиционными для Саратова научных школ различных направлений с приглашением специалистов из других городов).

Особенно тесные и плодотворные научные контакты сложились с учеными из Нижнего Новгорода во главе с академиком А.В. Гапоновым-Греховым, которые представляют имеющую мировую известность радиофизическую, колебательно-волновую научную школу. Укреплению дружеских и научных связей ученых двух городов способствовало, в частности, регулярное проведение взаимно посещаемых научных мероприятий в Саратове и Нижнем Новгороде (Горьком). В Саратове это, прежде всего, зимние школы-семинары по электронике СВЧ, а в Нижнем Новгороде – научные школы «Нелинейные волны». Обе школы проходят на базе пансионатов, что делает наиболее комфортным

общение их участников. Первая зимняя школа-семинар в Саратове была организована в 1970 г. в пансионате «Волжские Дали». В ней приняли участие практически все ведущие теоретики-электронщики Союза. С течением времени тематика этих школ расширялась; они приобрели международный статус. Работу по их организации ведут Дмитрий Иванович и его ученики. В 2009 г. в Волжских Далих будет проведена уже четырнадцатая по счету школа. Интересная особенность мероприятия заключается в том, что до начала школы издаются книги с лекциями, входящими в ее программу, и сейчас собралась своеобразная «электронная энциклопедия» из нескольких десятков книг.

А вот нижегородские «Нелинейные волны» во многом способствовали формированию у Д.И. Трубецкова интереса к нелинейной динамике, рассматриваемой сегодня в качестве некоей парадигмы современной науки. Его научная группа стала активнее заниматься проблемами нелинейной динамики применительно к задачам электроники СВЧ. Успех саратовских исследователей в этом направлении был обусловлен созданием соответствующей теории (здесь Дмитрий Иванович выделяет работы профессора С.П. Кузнецова) и реализацию экспериментов (работы профессора Б.П. Безручко) по обнаружению сложной динамики, включая динамический хаос, в распределенной системе *электронный поток – электромагнитная волна*. Дальнейшие работы в этом направлении, как полагают, изменили облик современной электроники СВЧ. Д.И. Трубецкову и его научной школе принадлежат работы по обнаружению и объяснению сложной динамики физических процессов во многих СВЧ устройствах – в лампе обратной волны, приборах магнетронного типа, в шумотронах, виркаторах, а также явления хаотических автоколебаний, присущих объектам иной природы.

7 декабря 1991 г. на сессии АН СССР Д.И. Трубецков был избран членом-корреспондентом Академии наук по отделению физики и астрономии (теперь – отделение физических наук). В 1993 г. по его инициативе в СГУ стал издаваться общероссийский жур-



нал «Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика» (главный редактор – академик Ю.В. Гуляев, заместители главного редактора – Д.И. Трубецков и Д.А. Усанов).

Расширение поля научной деятельности Д.И. Трубецкова сопровождалось организацией и проведением им (с 1994 г.) новых научных школ-конференций – «Хаотические автоколебания и образование структур (ХАОС)». Проведено уже 8 таких школ, собирающих широкую географию участников со всей страны и из-за рубежа. К ним по тематике примыкают международные рабочие группы «Нелинейная динамика в гуманитарных и общественных науках». Специально для «нефизиков» Дмитрий Иванович написал объемистую книгу «Колебания и волны для гуманитариев», отмеченную в 2000 г. премией Президента РФ в области образования.

Третья «серия» научных школ-конференций, проводимых под эгидой Д.И. Трубецкова, – это «Нелинейные дни в Саратове для молодых», взявшие старт в 1997 г. Данное мероприятие, ориентированное в первую очередь на студентов, аспирантов и молодых исследователей, органично вписывается в концепцию непрерывного образования, неуклонно проводимую Дмитрием Ивановичем на протяжении последних 15 лет.

Функционирующая ныне система непрерывного образования включает следующие компоненты: «Школа (лицей прикладных наук, 150 обучающихся) – вуз (созданный в 1994 г. факультет нелинейных процессов СГУ, 250 студентов) – аспирантура – докторантура» и служит базой для подготовки научно-педагогических кадров в области волновой электроники и нелинейной динамики. В рамках данной модели непрерывного образования реализована содержательная система взаимодополняющих друг друга учебных дисциплин, охватывающая 9 лет обучения (с аспирантурой – 12). В систему подготовки входит трехгодичный школьный курс «Колебания, волны, синергетика», вузовские курсы «Физика колебаний», «Физика волн», «Нелинейные колебания», «Нелинейные волны», «Теория катастроф», «Динамические системы и бифуркации», «Динамический хаос», «От порядка к хаосу», «Колеба-

ния и волны в нелинейных активных средах», «Самоорганизация в открытых системах», «Современные проблемы электроники и науки о колебаниях и волнах» и др. Цикл названных дисциплин поддерживается единой системой лабораторий и практикумов на факультете нелинейных процессов.

Данный образовательный комплекс является составной частью более общей структуры, созданной Д.И. Трубецковым, – Научно-образовательного института (НОИ) «Открытые системы», куда входят также редакция всероссийского научно-технического журнала «Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика» и научный сектор в виде отделения «Физика открытых нелинейных систем» НИИ естественных наук СГУ. На базе НОИ был разработан стандарт новой специальности «Физика открытых нелинейных систем» с квалификацией «физик-системный аналитик», которая введена Министерством образования и науки РФ в СГУ в качестве экспериментальной. Создание НОИ оказалось решающим моментом для победы в конкурсе по созданию научно-образовательных центров (НОЦ) программы «Фундаментальные исследования и высшая школа», объявленной Фондом гражданских исследований (CRDF, США) и Минобрнауки РФ. В НОЦ «Нелинейная динамика и биофизика» научная группа Д.И. Трубецкова занимает одно из лидирующих положений. В целом же научные и образовательные гранты, выигранные представителями научной школы Дмитрия Ивановича за последние годы, не поддаются перечислению.

Особые страницы в биографии Д.И. Трубецкова занимают годы (1994–2003), когда он возглавлял Саратовский государственный университет. На пост ректора Дмитрий Иванович, имея стаж 40-летней педагогической и научной деятельности, был выбран на альтернативной основе в 1994 г.

На это время пришлись сложные перестроечные моменты, связанные с укрупнением университета – с включением в его состав Саратовского и Балашовского педагогических институтов, некоторых техникумов, с образованием новых факультетов (компьютерных наук и информационных технологий,



философского, социологического, нелинейных процессов), с развитием новых связей с зарубежными университетами (Дмитрий Иванович, кстати, награжден медалью Университета американского штата Вайоминг за вклад в дело междууниверситетского сотрудничества) и институтами РАН, с проведением международных научных конференций (в частности, крупной Всемирной конференции по вакуумным источникам электронов в июле 2002 г., собравшей 200 участников из 15 стран мира). В тот период, впервые за несколько десятилетий, в университете развернулось строительство новых учебных корпусов. Был открыт X корпус, изображение которого сразу же стало одной из «визитных карточек» Саратова. Началось строительство XI корпуса, и право перерезать памятную ленточку при его открытии было предоставлено именно Дмитрию Ивановичу. В годы ректорства Д.И. Трубецков входил в состав Президиума Союза ректоров России, был заместителем председателя Совета ректоров Приволжского федерального округа, председателем Совета ректоров Саратовской области.

И несколько слов о Д.И. Трубецкове как о педагоге. Он придерживается принципа «нет науки без образования, нет образования без науки». Его учебники и лекции основываются во многом на собственных научных результатах. Они отражают эрудицию автора не только как собственно физика и математика, но и как знатока гуманитарных наук. Оригинальное изложение и глубокая аргументация материала, высокая культура речи и прекрасная дикция – все это делает лекции Дмитрия Ивановича маленькими шедеврами.

В заключение перечислим (в дополнение к названным в преамбуле и тексте статьи) некоторые другие отличия, полученные Д.И. Трубецковым: академик Академии естественных наук РФ, академик Международной академии высшей школы РФ, член научного совета РАН «Релятивистская сильноточная электроника и пучки заряженных частиц», член редколлегии журнала «Известия вузов. Радиофизика», почетный гражданин города Саратова.

Послесловие (празднование юбилея Д.И. Трубецкова)

16 июня 2008 г. состоялось торжественное заседание ученого совета факультета нелинейных процессов и отделения нелинейных открытых систем НИИ естественных наук Саратовского государственного университета, посвященное 70-летию юбилею Дмитрия Ивановича Трубецкова. Актный зал СГУ в этот день заполнили многочисленные коллеги и ученики Дмитрия Ивановича, в том числе из других городов, представители саратовских вузов, городских органов законодательной и исполнительной власти, студенты и аспиранты.

Заседание началось с оглашения приветствия ректора СГУ профессора Л.Ю. Косовича, отметившего, в частности, что вся творческая жизнь Д.И. Трубецкова связана с Саратовским государственным университетом; здесь он стал «большим ученым-педагогом, создателем собственной научной школы, инициатором многих новаторских проектов в масштабах средней и высшей школы России»; его имя «навсегда вошло в историю Саратовского университета как ректора, на долю которого пришлось трудная и ответственная работа в 90-х годах прошлого столетия и в начале нынешнего века». Затем состоялся своеобразный «парад проректоров», когда юбиляра лично тепло поздравили проректоры университета Д.А. Усанов, Е.Г. Елина, И.Г. Малинский, Т.Г. Захарова.

Были зачитаны правительственные поздравительные телеграммы, поступившие от заместителя председателя Государственной думы Федерального собрания РФ Л.К. Слиска, от заместителя председателя комитета Совета Федерации по экономической политике, предпринимательству и собственности, доктора технических наук, профессора, почетного гражданина Саратовской области В.К. Гусева, от вице-президента РАН академика В.В. Козлова, от председателя совета Российского фонда фундаментальных исследований проф. В.Ю. Хомича. В этих телеграммах интегрально оценивается деятельность Д.И. Трубецкова как «выдающегося ученого и крупного организатора науки, видного специалиста в области теоретической радиофизики».



и сверхвысокочастотной электроники», внесшего на посту ректора СГУ «заметный вклад в становление университета как одного из крупных образовательных комплексов страны с широкой программой научно-исследовательских работ, в рост его международного признания», как человека, которого «всегда отличает высокое чувство ответственности за порученное дело и умение найти эффективные пути решения непростых задач».

Слово юбиляра лишней раз продемонстрировало оригинальность подхода Дмитрия Ивановича к разрешению «нестандартной ситуации» – он выступил с 40-минутным докладом, названным в предварительной программе «Какие даты круглыми назвать». На самом деле к его собственной «круглой дате» это сообщение не имело никакого отношения. Это был содержательный историко-научный доклад о памятных датах 2008 г., относящихся к истории развития нелинейной динамики.

После выступления Дмитрия Ивановича «эстафета» поздравлений продолжилась в течение последующих трех часов, причем различные «категории» поздравителей находили всё новые и новые слова для характеристики многогранной деятельности и личностных качеств юбиляра, являющихся основой его авторитета и широкого признания.

Представители местных органов власти отмечали созидательную деятельность Д.И. Трубецкова по повышению уровня и престижности образования в школах и вузах г. Саратова, его профессионализм и высокую трудоспособность, «способность реализовывать смелые и перспективные научные идеи», его «вклад тепла, любви и доброты в воспитание молодого поколения России» как инвестицию в наше общее будущее. Звучали приветствия от председателя Саратовской областной думы В.В. Радаева, заместителей Председателя Правительства области В.Л. Жданова, С.Н. Горбунова и Н.Н. Старшовой, руководителя пресс-службы губернатора области М. Заседателевой, главы администрации г. Саратова В.Л. Сомова, руководителей администраций Кировского и Волжского районов г. Саратова А.А. Сундеева, А.Г. Халова и В.С. Креты, глав Энгельского, Духовнико-

го, Новоузенского и Пугачевского муниципальных районов М.А. Лысенко, В.В. Чамышева, А.А. Митрофанова и В.П. Зубова.

Были оглашены поздравления от депутатов Саратовской областной думы Г.Н. Комковой, В.К. Маркова, Л.А. Писного, З.М. Самсоновой, Н.М. Чукалина, депутатов Саратовской городской думы А.А. Березовского, В.А. Ковреги́на, А.С. Ландо, и.о. министра образования области М.В. Горемыко и его заместителей И.В. Ткаченко, Л.В. Сафонова и О.А. Афонина, министра культуры М.А. Брызгалова, министра социального развития В.В. Чернышова и председателя комитета социальной защиты населения Д.А. Бунина, министра финансов А.С. Ларионова, президента Торгово-промышленной палаты Саратовской области, члена правления ТПП РФ М.А. Фатеева, начальника ГУ МЧС России по Саратовской области генерал-майора С.Н. Рабаданова, руководителя Саратовстата Н.Б. Телятникова, начальника Управления по делам архивов О.П. Трегубова, руководителей Управления федеральной почтовой связи – филиала ФГУП «Почта России» А.А. Серебрякова и С.А. Сидорова, руководителя Управления Росприроднадзора по Саратовской области А.П. Трегуба, первого заместителя министра по развитию спорта, физической культуры и туризма области А.А. Чефранова. Прислали поздравления вице-президент компании «Ренова Менеджмент АГ» Р.Ш. Халиков, А.В. Картунов и коллектив ИНО-центра (г. Москва), президент ООО «Нарат-К» М.Ф. Фаизов, директор гостиницы «Словакия» Э.А. Арзуманян.

Высокая оценка юбиляра как «крупного ученого, талантливого педагога и воспитателя, человека творческого, не изменяющего своим гуманистическим и демократическим убеждениям», как человека редкой природы, которая называется русской интеллигентностью, содержалась в приветствиях, поступивших из различных вузов страны, Академии наук и из-за рубежа. Свои поздравления адресовали юбиляру член Президиума РАН, руководитель Саратовского научного центра РАН, академик Ю.В. Гуляев, академики В.И. Пустовойт, В.И. Минкин, член-корреспондент РАН А.В. Кулаков, директор госу-



дарственного Экспертно-аналитического центра Федерального агентства по науке и инновациям адмирал проф. Э.Н. Яковлев. Кроме того, около 100 коллег по научному и образовательному «цеху», его друзей и знакомых поздравили Дмитрия Ивановича в юбилейные дни по телефону. Среди них – профессор В.А. Солнцев (Москва), Г.Г. Соминский (С.-Петербург), Э.К. Алгазинов (Воронеж), Г.П. Синявский (Ростов-на-Дону), Л.М. Минкин, Ш.Е. Цимринг, Б.А. Рубнич (США), Г.Т. Гурия (Испания), С.В. Буров (Мюнхен, Германия) и многие другие.

На торжественном заседании приветствия вузов и академических учреждений г. Саратова начались с выступления уполномоченного Президиума РАН по Саратовскому научному центру РАН, члена-корреспондента РАН, профессора, директор Института проблем точной механики и управления РАН А.Ф. Резчикова, передавшего юбиляру благодарственное письмо Саратовского научного центра РАН, в котором отмечался крупный вклад Д.И. Трубецкого в развитие фундаментальных и прикладных исследований, активную научно-образовательную деятельность. С приветствием от Саратовского филиала Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН выступили руководители филиала Ю.А. Филимонов, Н.И. Сеницын, Г.Т. Казаков, Ю.А. Григорьев. Институт биохимии и физиологии растений и микроорганизмов РАН представляли профессора С.Ю. Щеголев и Н.Г. Хлебцов.

Поздравления в адрес Дмитрия Ивановича поступили от ректора Саратовского государственного технического университета проф. И.Р. Плеве, ректора Саратовского государственного социально-экономического университета проф. В.В. Динеса, ректора Саратовской государственной академии права проф. С.Б. Суорова и президента СГАУ проф. Ф.А. Григорьева, ректора Поволжской академии государственной службы им. П.А. Столыпина проф. С.Ю. Наумова, ректора Саратовского государственного медицинского университета члена-корреспондента РАМН проф. П.В. Глыбочко, ректора Саратовского института Российского государственного экономического университета проф. А.Н. Маликова, председателя президиума совета дирек-

торов средних специальных учебных заведений Саратовской области В.А. Зайцева. «Слаженное» остроумное трио продемонстрировали при своем выступлении заведующие кафедрами Саратовского государственного технического университета, бывшие выпускники кафедры электроники профессора В.Б. Байбурин, Ю.А. Зюрюкин и А.М. Кац.

Среди факультетов СГУ Дмитрия Ивановича первыми поздравили представители его родного (и, собственно, выпестованного им) факультета нелинейных процессов. Затем на сцену поднялись представители других структурных подразделений СГУ – декан физического факультета проф. Д.А. Зимняков и профессора факультета В.С. Анищенко, В.Л. Дербов, Б.Е. Железковский, Л.А. Мельников и И.Н. Салий, доц. С.В. Овчинников, декан факультета нано- и биомедицинских технологий проф. С.Б. Вениг и профессора факультета Б.Н. Климов и А.Г. Роках, декан механико-математического факультета доц. А.М. Захаров, декан факультета компьютерных наук и информационных технологий доц. А.Г. Федорова, декан геологического факультета доц. Е.Н. Волкова, проф. Г.А. Московский и проф. Е.М. Первушов, декан химического факультета проф. О.В. Федотова и профессора С.П. Муштакова, И.А. Казаринов, декан социологического факультета проф. Г.В. Дыльнов, декан географического факультета проф. А.Н. Чумаченко, представители философского факультета профессора В.Н. Белов, С.П. Позднева и В.В. Афанасьева. Были оглашены приветствия от коллективов Института истории и международных отношений, Научной библиотеки СГУ и кафедры физической культуры, от выпускников факультета нелинейных процессов 2008 года.

В приветствиях коллег по университету отмечалась общепризнаваемая уникальность и авторитетность личности юбиляра – эрудированного (в области как естественных, так и гуманитарных наук), интеллигентного «университетского человека», *Notus novus* и *Notus faber* (по терминологии древних) – человека, выдвинувшегося благодаря своим личным качествам, обладателя новых взглядов, создателя, доступного и доброжелательного в общении, оказавшего позитивное влияние на творческие судьбы сотен людей, и юбилей



которого, благодаря результатам и достижениям его упорного труда, далеко выходит за рамки личной биографии. Профессор А.И. Аврус, признанный исследователь университетской истории, выразил надежду, что Дмитрий Иванович найдет время для написания мемуаров.

Высокий авторитет Д.И. Трубецкого в научном и образовательном сообществах подчеркивается в приветствиях ректора Московского физико-технического института (государственного университета), председателя Совета учебно-методического объединения высших учебных заведений РФ по образованию в области прикладных математики и физики проф. Н.Н. Кудрявцева, ректора Московского инженерно-физического института (государственного университета) проф. М.Н. Стриханова, группы профессоров физического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова (академик О.В. Руденко, Ю.М. Романовский, П.С. Ланда, коллектив кафедры акустики), коллектива департамента физики Южного Федерального университета, коллектива радиофизического факультета Томского государственного университета, сотрудников Института физических проблем им. П.Л. Капицы РАН (доктор наук А.И. Клеев из ИФП присутствовал на юбилее), Института общей физики РАН, Института гематологии РАН и др. В этих приветствиях подчеркивается, что Д.И. Трубецков своей деятельностью «внес крупный вклад в развитие современной науки, в первую очередь – в области радиофизики и электроники», «создал одну из ведущих отечественных школ по электронике СВЧ (в том числе нестационарной электронике), по теории волновых процессов и нелинейной динамике», «предложил много инноваций, которые оказали большое влияние на процесс подготовки студентов» в общероссийском масштабе: на учебниках Д.И. Трубецкого по электронике СВЧ и нелинейной динамике выросло не одно поколение студентов во многих университетах России. Книга «Введение в теорию колебаний и волн» (в соавторстве с М.И. Рабиновичем) является одним из самых популярных современных учебников; она переведена на английский язык. Созданный же Д.И. Трубецковым общерос-

сийский журнал «Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика» долгие годы был единственным изданием подобного рода в России.

Плодотворность научно-педагогических связей, сложившихся между научным коллективом Д.И. Трубецкого и нижегородскими учеными, отмечается в приветствиях, поступивших от ректора Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского проф. Р.Г. Стронгина, директора НИИ прикладной математики и кибернетики Нижегородского университета проф. Ю.Г. Васина, коллектива Института прикладной физики РАН – академиков РАН А.В. Гапонова-Грехова и А.Г. Литвака, члена-корреспондента РАН А.М. Сергеева и др. Приветствия от нижегородских коллег огласили специально прибывшие из Нижнего Новгорода на юбилейное торжество доктора физико-математических наук профессора В.Д. Шалфеев, В.П. Пономаренко и В.И. Некоркин.

Вклад в подготовку высококвалифицированных специалистов, непосредственная прикладная значимость научных работ Д.И. Трубецкого отмечаются в приветствиях из ведущих электронных научно-производственных предприятий России – ФГУП «НПП «Исток»» от генерального директора А.Н. Королева, ФГУП «НПП «Алмаз»» от генерального директора Н.А. Бушуева и заместителя генерального директора по СВЧ технике М.П. Алина, НПЦ «Алмаз-Фазотрон» от генерального директора, лауреата Государственной премии СССР проф. Э.А. Семенова и его первого заместителя, лауреата Государственной премии СССР проф. В.Н. Посадского; Центрального НИИ измерительной аппаратуры от генерального директора А.П. Креницкого, его заместителей В.Т. Васильева, В.П. Мещанова и др. Приветствия же научно-производственных предприятий города на торжественном заседании открыли руководители ОАО «Контакт» В.В. Муллин, А.С. Семенов, С.С. Терентьев и В.К. Семенов. Это выступление сопровождалось интересным и содержательным стихотворным экспромтом А.С. Семенова.

«Международная часть» поздравлений Дмитрию Ивановичу состояла из памятных адресов, присланных Президентом Нацио-



нальной академии наук Республики Армения Р.А. Мартиросяном, сотрудниками Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники во главе с проф. А.А. Кураевым, сотрудниками Института радиоэлектроники НАН Украины во главе с проф. К.А. Лукиным, от проф. Ю.П. Блюха (Израиль), от проф. Г.С. Нусиновича (Мэрилендский университет, США), от Президента университета Вайоминг (США) доктора Томаса Буханана и проректора по науке доктора Майрона Алена, от Кэти Кэмпбел – президента и исполнительного директора Фонда развития гражданских исследований (США). К.Кэмпбел отмечала, в частности, долгосрочную и удивительно плодотворную работу Д.И. Трубецкова в рамках программы «Фундаментальные исследования и высшее образование», способствующую развитию научных связей между Россией и США.

Запоминающимся было приветствие и от руководителей органов образования и школ Волжского района г. Саратова (Лицея прикладных наук, гимназии № 4, Восточно-Европейского лицея) и г. Красноармейска, школьников и студентов факультета нелинейных процессов СГУ. Именно Дмитрий Иванович Трубецков является организатором, бессменным куратором и преподавателем-лектором Лицея прикладных наук, где по специальным программам ведется подготовка талантливых школьников в области физико-математических наук, а также создателем первого в истории мирового высшего образования факультета нелинейных процессов.

Во всех поздравлениях, обращенных к юбиляру, содержатся искренние пожелания доброго здоровья, оптимизма, счастья и гармонии в жизни, надежной поддержки коллег, новых успехов во всех начинаниях на благо Саратовского университета, российского высшего образования и отечественной науки. Теплые слова были обращены и к родным Дмитрия Ивановича – его супруге Софье Васильевне, физику по образованию и автору интересных пособий по физике, сыну Алексею Дмитриевичу, доктору медицинских наук, профессору, заместителю директора НИИ сельской гигиены по научной работе, члену Союза художников России, Елене Геннадьевне Трубецковой, доценту Саратовского государственного университета, внучкам Ирине и Анне.

Выступая с заключительным словом, Дмитрий Иванович поблагодарил всех за добрые пожелания в свой адрес и не без юмора отметил: «Понимаю, что юбилейная дата – “пора дозволенных преувеличений”, но не скрою, что они приятны».

В.М. Аникин

Основные публикации Д.И. Трубецкова

Шевчик В.Н., Трубецков Д.И. Аналитические методы расчета в электронике СВЧ. М., 1970.

Электроника ламп с обратной волной / Под ред. В.Н. Шевчика, Д.И. Трубецкова. Саратов, 1975.

Рабинович М.И., Трубецков Д.И. Введение в теорию колебаний и волн. М., 1984, 1992 (2-е изд.); 2000 (3-е изд.). Допущено Министерством образования в качестве учебного пособия для студентов физических специальностей вузов.

Rabinovich M.I., Trubetskov D.I. Oscillation and Waves in Linear and Nonlinear System. Netherlands, 1989.

Трубецков Д.И. Колебания и волны для гуманитариев. Саратов, 1997.

Трубецков Д.И., Короновский А.А. Нелинейная динамика в действии. Как идеи нелинейной динамики проникают в экологию, экономику и социальные науки. Саратов, 2002 (2-е изд.).

Трубецков Д.И. «След вдохновений и трудов упорных...»: Лекции на школах «Нелинейные дни в Саратове для молодых». Саратов, 2001.

Рыскин Н.М., Трубецков Д.И. Нелинейные волны. М., 2000.

Трубецков Д.И., Рожнев А.Г. Линейные колебания и волны. М., 2001.

Кузнецов А.П., Рожнев А.Г., Трубецков Д.И. Линейные колебания и волны: Сборник задач. М., 2001.

Трубецков Д.И., Мчедлова Е.С., Красичков Л.В. Введение в теорию самоорганизации открытых систем. М., 2002.

Трубецков Д.И. Введение в синергетику. Колебания и волны. М., 2003.

Трубецков Д.И., Храмов А.Е. Лекции по электронике для физиков: В 2 т. М., 2003. Т.1; 2004. Т.2.

Трубецков Д.И. Введение в синергетику. Хаос и структуры. М., 2004.

Трубецков Д.И. Синхронизация: ученый и время: Лекции на школах «Нелинейные дни в Саратове для молодых». Саратов, 2006.

Трубецков Д.И. Даниил Семенович Данин и его кептавростика. Саратов, 2007.

Литература о Д.И. Трубецкове

Семенов В.Н. Ректоры Саратовского университета. Факты жизни и деятельности. Саратов, 1999.

Энциклопедия Саратовского края (в очерках, фактах, событиях, лицах). Саратов, 2002.

Аврус А.И., Сауши И.В., Соломонов В.А. Саратовцы – академики и члены-корреспонденты Российской академии наук. Саратов, 2005.