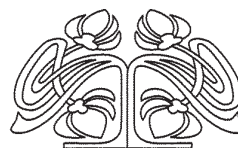




Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования  
«Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского»

# ИЗВЕСТИЯ

САРАТОВСКОГО  
УНИВЕРСИТЕТА  
Новая серия



Научный журнал  
2016 Том 16  
ISSN 1814-733X  
ISSN 1817-3020  
Издается с 2001 года

Серия Физика, выпуск 2

Продолжение «Известий Императорского Николаевского Университета» 1910–1918 и «Ученых записок СГУ» 1923–1962

## СОДЕРЖАНИЕ

### Научный отдел

#### Оптика и спектроскопия. Лазерная физика

**Савонин С. А., Рябухо П. В., Лякин Д. В.,**

**Рябухо В. П.** Метод цифровой голографии в интерференционной микроскопии отражающих объектов в частично когерентном свете

67

**Пластун А. С., Конюхов А. И., Мельников Л. А.,**

**Зарьков С. А.** Неупругие взаимодействия оптических солитонов в рамках модели нелинейного уравнения Шредингера с переменными коэффициентами

81

#### Радиофизика, электроника, акустика

**Усанов Д. А., Скрипаль А. В., Пономарев Д. В.,**

**Латышева Е. В., Феклистов В. Б.**

Волноводно-диэлектрический резонанс в системе с нанометровым металлическим слоем на диэлектрической подложке

86

#### Биофизика и медицинская физика

**Генина Э. А., Башкатов А. Н., Тучин В. В.**

Исследование влияния этанола на трансэпидермальный транспорт индоцианинового зелёного с помощью спектроскопии обратного рассеяния

91

#### Теоретическая и математическая физика

**Бабков Л. М., Бойков В. А., Давыдова Н. А.,**

**Успенский К. Е.** Молекулярное моделирование и колебательные спектры 4,4'-хлорбензофенона

97

#### Физика атомного ядра и элементарных частиц

**Белоусов А. В., Крусанов Г. А., Калачев А. А.,**

**Черняев А. П.** Влияние вторичных частиц с высоким значением линейной передачи энергии на фактор качества фотонов

103

### Приложения

#### Из истории физики.

**К 120-летию со дня рождения академика Н. Н. Семёнова**

**Аникин В. М., Усанов Д. А.**

Николай Николаевич Семёнов: волжские сюжеты жизни

109

### Сведения об авторах

122

Журнал включен в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук

Зарегистрировано в Министерстве Российской Федерации по делам печати, телерадиовещания и средств массовых коммуникаций.

Свидетельство о регистрации СМИ ПИ № 77-7185 от 30 января 2001 года.

Зарегистрировано в Федеральной службе по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.

Свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС77-56150 от 15 ноября 2013 года

Индекс издания по каталогу ОАО Агентства «Роспечать» 36015, раздел 39 «Физико-математические науки. Химические науки». Журнал выходит 4 раза в год

#### Заведующий редакцией

Бучко Ирина Юрьевна

#### Художник

Соколов Дмитрий Валерьевич

#### Редактор-стилист

Степанова Наталия Ивановна

#### Верстка

Ковалева Наталья Владимировна

#### Технический редактор

Ковалева Наталья Владимировна

#### Корректор

Юдина Инна Геннадиевна

#### Адрес учредителя и редакции:

410012, Саратов, ул. Астраханская, 83

Тел.: (845-2) 51-45-49, 52-26-89

E-mail: izvestiya@sgu.ru

Подписано в печать 20.06.2016.

Формат 60×84 1/8.

Усл. печ. л. 7,44 (8,0).

Тираж 500 экз. Заказ 89-Т.

Отпечатано в типографии Саратовского университета.

#### Адрес типографии:

410012, Саратов, Б. Казачья, 112А

© Саратовский университет, 2016



## ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

Журнал публикует на русском и английском языках научные статьи по физике, содержащие новые результаты исследований, статьи учебно-методического характера, содержащие инновационную компоненту, статьи по методологии разделов физической науки, статьи, отражающие хронику научных мероприятий и важных событий в жизни физического сообщества. Материалы, ранее опубликованные или представленные для публикации в другие журналы, к рассмотрению не принимаются.

Рекомендуемый объем статьи – до 16 страниц текста, 5 рисунков и 4 таблицы, объемом краткого сообщения – до 6 страниц текста, 2 рисунка и 2 таблицы. Таблицы не должны превышать 20% общего объема статьи.

На русском языке статья содержит: УДК, заглавие, инициалы и фамилии авторов, название их места работы, электронный адрес автора, с которым ведётся переписка, аннотацию (около 12 строк), ключевые слова (не более 15), текст, благодарности и ссылки на гранты, список литературы.

На английском языке необходимо продублировать: заглавие, инициалы и фамилии авторов, аннотацию, ключевые слова.

Редакция рекомендует авторам структурировать текст, используя подзаголовки. Текст должен быть набран и напечатан через 1,5 интервала на бумаге формата А4 с полями 2,5 см, шрифт Times New Roman, размер шрифта основного текста – 14, второстепенного (аннотация, ключевые слова, сноски, таблицы, подписи к рисункам, приложения, список литературы, примечания) – 12; все страницы рукописи, таблицы, рисунки, следует пронумеровать. Таблицы и рисунки представляются отдельно от текста, таблица должна иметь заголовков, на обратной стороне рисунка следует указать его номер, фамилию первого автора. Нумерация источников в списке литературы должна соответствовать очередности ссылок на них в тексте, ссылки на неопубликованные работы не допускаются.

Для публикации статьи необходимо представить в редакцию:

– подписанный авторами текст статьи, включая резюме и ключевые слова, таблицы, рисунки и подписи к ним (2 экз.);

– сведения об авторах на русском и английском языках: фамилия, имя, отчество, место работы, должность, ученые степень и звание, служебные адреса и телефоны, адреса электронной почты, указать автора, ответственного за переписку с редакцией (1 экз.);

– файлы всех вышеперечисленных материалов в форме документа Microsoft Word doc или Word docx;

– направление от организации (1 экз.);

– внешнюю рецензию, заверенную в установленном порядке.

Почтовый адрес редакции: 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83, физический факультет, журнал «Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия Физика», главному редактору.

Электронный адрес: fizika.sgu@bk.ru

Сайт журнала: fizika.sgu.ru

## CONTENTS

### Scientific Part

#### Optics and Spectroscopy. Laser Physics

- Savonin S. A., Ryabukho P. V., Lyakin D. V., Ryabukho V. P.** Methods of Digital Holography in Interference Microscopy of Reflective Object in Partially Coherent Light 67

- Plastun A. S., Konyukhov A. I., Melnikov L. A., Zarkov S. A.** Optical Soliton Inelastic Interactions in Nonlinear Schrödinger Equation with Variable Coefficients Model 81

#### Radio Physics, Electronics, Acoustics

- Usanov D. A., Skripal A. V., Ponomarev D. V., Latysheva E. V., Feklistov V. B.** Waveguide-dielectric Resonance in Systems with Nanometer Metal Layer on Dielectric Substrate 86

#### Biophysics and Medical Physics

- Genina E. A., Bashkatov A. N., Tuchin V. V.** Study of Ethanol Impact on the Transepidermal Transport of Indocyanine Green with Backscattering Spectroscopy 91

#### Theoretical and Mathematical Physics

- Babkov L. M., Boykov V. A., Davydova N. A., Uspenskiy K. E.** Molecular Modeling and Vibrational Spectra of 4,4'-chlorobenzophenone 97

#### Nuclear and Elementary Particles Physics

- Belousov A. V., Krusanov G. A., Kalachev A. A., Chernyaev A. P.** Effect of Secondary Particles with High Linear Energy Transfer on Photon Beam Quality Factor 103

### Appendices

#### From the History of Physics.

#### On the 120th Anniversary of the Birthday of Academician N. N. Semenov

- Anikin V. M., Usanov D. A.**  
Nikolai N. Semenov: Volga-Region Themes of the Life 109

### Information about the Authors

122



**РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА  
«ИЗВЕСТИЯ САРАТОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. НОВАЯ СЕРИЯ»**

**Главный редактор**

Чумаченко Алексей Николаевич, доктор геогр. наук, профессор (Саратов, Россия)

**Заместитель главного редактора**

Короновский Алексей Александрович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

**Ответственный секретарь**

Халова Виктория Анатольевна, кандидат физ.-мат. наук, доцент (Саратов, Россия)

**Члены редакционной коллегии:**

Балаш Ольга Сергеевна, кандидат экон. наук, доцент (Саратов, Россия)

Бучко Ирина Юрьевна, директор Издательства Саратовского университета (Саратов, Россия)

Данилов Виктор Николаевич, доктор ист. наук, профессор (Саратов, Россия)

Ивченков Сергей Григорьевич, доктор соц. наук, профессор (Саратов, Россия)

Коссович Леонид Юрьевич, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Макаров Владимир Зиновьевич, доктор геогр. наук, профессор (Саратов, Россия)

Прозоров Валерий Владимирович, доктор филол. наук, профессор (Саратов, Россия)

Усанов Дмитрий Александрович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Устьянцев Владимир Борисович, доктор филос. наук, профессор (Саратов, Россия)

Шамионов Раиль Мунирович, доктор психол. наук, профессор (Саратов, Россия)

Шляхтин Геннадий Викторович, доктор биол. наук, профессор (Саратов, Россия)

**EDITORIAL BOARD OF THE JOURNAL  
«IZVESTIYA OF SARATOV UNIVERSITY. NEW SERIES»**

**Editor-in-Chief** – Chumachenko A. N. (Saratov, Russia)

**Deputy Editor-in-Chief** – Koronovskii A. A. (Saratov, Russia)

**Executive Secretary** – Khalova V. A. (Saratov, Russia)

**Members of the Editorial Board:**

Balash O. S. (Saratov, Russia)

Buchko I. Yu. (Saratov, Russia)

Danilov V. N. (Saratov, Russia)

Ivchenkov S. G. (Saratov, Russia)

Kossovich L. Yu. (Saratov, Russia)

Makarov V. Z. (Saratov, Russia)

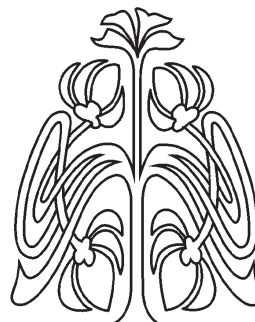
Prozorov V. V. (Saratov, Russia)

Usanov D. A. (Saratov, Russia)

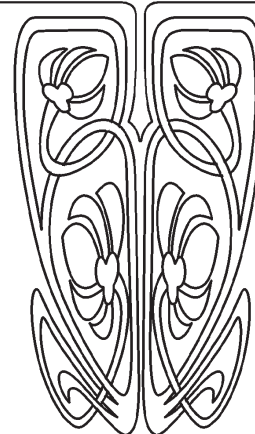
Ustiantsev V. B. (Saratov, Russia)

Shamionov R. M. (Saratov, Russia)

Shlyakhtin G. V. (Saratov, Russia)



**РЕДАКЦИОННАЯ  
КОЛЛЕГИЯ**





**РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА  
«ИЗВЕСТИЯ САРАТОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. НОВАЯ СЕРИЯ.  
СЕРИЯ: ФИЗИКА»**

**Главный редактор**

Усанов Дмитрий Александрович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

**Заместители главного редактора**

Анищенко Вадим Семенович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Тучин Валерий Викторович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

**Ответственный секретарь**

Скрипаль Анатолий Владимирович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

**Члены редакционной коллегии:**

Аникин Валерий Михайлович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Бабков Лев Михайлович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Вадивасова Татьяна Евгеньевна, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Вениг Сергей Борисович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Виницкий Сергей Ильич, доктор физ.-мат. наук, профессор (Дубна, Россия)

Горохов Александр Викторович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Самара, Россия)

Грибов Лев Александрович, доктор физ.-мат. наук, профессор, чл.-корр. РАН (Москва, Россия)

Давидович Михаил Владимирович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Кудряшов Валерий Павлович, доктор техн. наук (Саратов, Россия)

Кузнецов Сергей Петрович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Лёвин Юрий Иванович, кандидат физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Мельников Леонид Аркадьевич, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Нефёдов Игорь Сергеевич, доктор физ.-мат. наук, ст. науч. сотрудник университета Аалто (Хельсинки, Финляндия)

Никитов Сергей Аполлонович, доктор физ.-мат. наук, профессор, чл.-корр. РАН (Москва, Россия)

Резчиков Александр Фёдорович, доктор техн. наук, профессор, чл.-корр. РАН (Саратов, Россия)

Скрипаль Александр Владимирович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Сухоруков Глеб Борисович, профессор Университета Королевы Марии (Лондон, Великобритания)

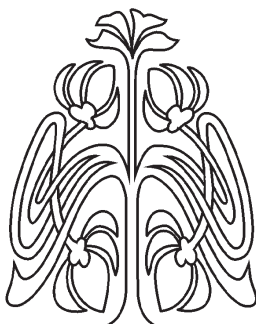
Трубецков Дмитрий Иванович, доктор физ.-мат. наук, профессор, чл.-корр. РАН (Саратов, Россия)

Филимонов Юрий Александрович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

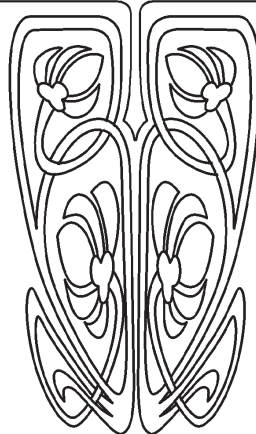
Хлебцов Николай Григорьевич, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Шараевский Юрий Павлович, доктор физ.-мат. наук, профессор (Саратов, Россия)

Шиманский-Гайер Лутц, Ph.D, профессор Гумбольдтского университета (Берлин, Германия)



**РЕДАКЦИОННАЯ  
КОЛЛЕГИЯ**



**EDITORIAL BOARD OF THE JOURNAL  
«IZVESTIYA OF SARATOV UNIVERSITY. NEW SERIES.  
SERIES: PHYSICS»**

**Editor-in-Chief** – Usanov D. A. (Saratov, Russia)

**Deputy Editor-in-Chief** – Anishchenko V. S. (Saratov, Russia)

Tuchin V. V. (Saratov, Russia)

**Executive Secretary** – Skripal An. V. (Saratov, Russia)

**Members of the Editorial Board:**

Anikin V. M. (Saratov, Russia)

Babkov L. M. (Saratov, Russia)

Gorokhov A. V. (Samara, Russia)

Gribov L. A. (Moscow, Russia)

Davidovich M. V. (Saratov, Russia)

Filimonov Yu. A. (Saratov, Russia)

Khlebtsov N. G. (Saratov, Russia)

Kudryashov V. P. (Saratov, Russia)

Kuznetsov S. P. (Saratov, Russia)

Levin Yu. I. (Saratov, Russia)

Nefedov I. S. (Helsinki, Finland)

Nikitov S. A. (Moscow, Russia)

Melnikov L. A. (Saratov, Russia)

Rezchikov A. F. ((Saratov, Russia)

Schimanski-Geier L. (Berlin, Germany)

Sharaevsky Yu. P. (Saratov, Russia)

Skripal A. V. (Saratov, Russia)

Sukhorukov G. B. (London, UK)

Trubetskov D. I. ((Saratov, Russia)

Vadivasova T. E. (Saratov, Russia)

Vinitsky S. I. (Dubna, Russia)

Wenig S. B. (Saratov, Russia)





# ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ. ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА

УДК 535.41

## МЕТОД ЦИФРОВОЙ ГОЛОГРАФИИ В ИНТЕРФЕРЕНЦИОННОЙ МИКРОСКОПИИ ОТРАЖАЮЩИХ ОБЪЕКТОВ В ЧАСТИЧНО КОГЕРЕНТНОМ СВЕТЕ

С. А. Савонин<sup>1</sup>, П. В. Рябухо<sup>1</sup>, Д. В. Лякин<sup>2</sup>, В. П. Рябухо<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского

<sup>2</sup>Институт проблем точной механики и управления РАН, Саратов  
E-mail: savonin.sa@mail.ru

Представлено теоретическое обоснование возможности использования интерференционных микроскопов с протяженным и частотно широкополосным источником света для записи цифровых голограмм микрообъектов, восстановления и визуализации их фазовых изображений. Рассматривается процедура численной обработки пространственно локализованных цифровых голограмм сфокусированного изображения в частично когерентном свете. Приведены результаты экспериментов по цифровой голографической микроскопии биологических объектов в частично когерентном свете с использованием интерференционного микроскопа Линника.

**Ключевые слова:** цифровая голография, фазовая микроскопия, интерференционная микроскопия, частичная когерентность, интерференционное изображение.

### Methods of Digital Holography in Interference Microscopy of Reflective Object in Partially Coherent Light

S. A. Savonin, P. V. Ryabukho, D. V. Lyakin, V. P. Ryabukho

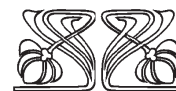
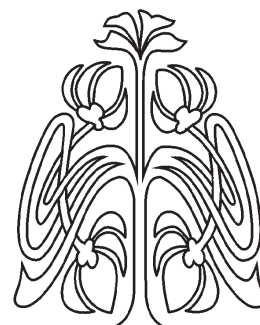
The theoretical foundation of the possibility of using the interference microscopes with extended and frequency broadband light source for recording digital holograms of microscopic objects, reconstruction and visualization of phase images is presented. Numerical procedure for processing of spatially localized digital holograms of the focused image in a partially coherent light are considered. Results of experiments on digital holographic microscopy of biological objects in a partially coherent light with Linnik interference microscope are shown.

**Key words:** digital holography, phase microscopy, interference microscopy, partial coherence, interference image.

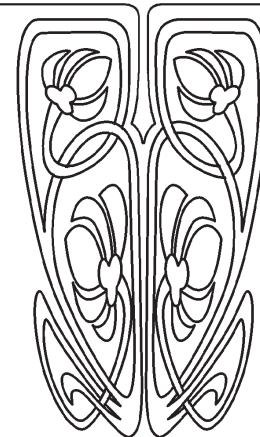
DOI: 10.18500/1817-3020-2016-16-2-67-80

### Введение

Оптическая цифровая голографическая микроскопия [1–5] существенно расширяет возможности интерференционной (фазовой) микроскопии [6–11] и тем более обычной световой микроскопии. Это обеспечивается применением эффективных компьютерных средств обработки цифровых голограмм для визуализации и численного представления поверхностной и объемной микроструктуры исследуемых объектов технологического или биологического происхождения. Для записи цифровых голограмм в микроскопии



НАУЧНЫЙ  
ОТДЕЛ





используется пространственно когерентное лазерное излучение с достаточно большой длиной временной когерентности, что необходимо в голографии для создания взаимной когерентности оптического поля изображения объекта и опорной волны [12, 13]. Использование лазерного излучения существенно упрощает возможность конструирования интерференционной и голографической системы. Однако использование лазеров приводит к формированию когерентных шумов – паразитной пространственной модуляции в объектном и опорном волновых полях, обусловленной интерференцией волн, рассеянных или дифрагированных на микронеоднородностях поверхностей оптических элементов – на пылинках, микроцарапинах и т.п., появляющихся неизбежным образом в процессе эксплуатации микроскопа. Модуляция носит, как правило, случайный пространственный характер – часто наблюдается спекл-модуляция [14–16], которая переносится на восстанавливаемое с голограммы поле изображения объекта, в том числе и в цифровой голографии. Это приводит к заметным искажениям восстанавливаемых амплитудных и фазовых распределений в объектном поле и, как следствие, к искажению получаемой в микроскопии информации о пространственной микроструктуре исследуемого объекта.

Для подавления когерентных шумов в той или иной оптической системе необходимы процедуры усреднения картин интерференции рассеянных волн. Усреднение может быть реализовано путем существенного уменьшения радиуса пространственной когерентности используемого излучения, что может быть выполнено с использованием лазерного пучка света, рассеянного на движущемся с достаточно большой скоростью рассеивателе. В этом случае подавляются как когерентные шумы, вызванные рассеянием на неоднородностях оптических деталей, так и исходная спекл-модуляция в освещающем излучении, рассеянном на движущемся рассеивателе. В [17–26] такой способ записи цифровых голограмм с подавленными когерентными шумами рассматривается в системе микроскопии с использованием освещения прозрачных объектов на пропускание. В этом случае удаётся получить взаимно когерентными объектное поле и внеосевую (наклонно падающую) опорную волну с динамически изменяющейся спекл-модуляцией в лазерном излучении с достаточно большой длиной продольной когерентности [22, 23].

Для существенного снижения контраста спеклов в дифрагированном на движущемся рассеивателе световом поле необходимо достаточно большое число реализаций спекл-поля  $N_S$  за время записи кадров цифровых голограмм. Для снижения контраста спеклов  $C \approx 1/\sqrt{N_S}$  [15] до значения 0.05, что можно оценивать как порог зрительного восприятия пятнистой картины, требуется более 500 реализаций. Следовательно, необходима достаточно высокая скорость движения рассеивателя и длительная экспозиция записываемых кадров голограмм, что ограничивает возможности исследования динамически изменяющихся объектов средствами цифровой голографической микроскопии.

Это ограничение преодолевается при использовании нелазерных источников света с протяженным телом светимости (тепловые источники, светодиоды и т.п.). Такие источники формируют волновые поля, в которых реализации спекл-полей сменяются за время когерентности  $\tau_c \approx 2\pi/\Delta\omega$  с частотой, равной ширине спектрального контура излучения  $\Delta\omega$ . Для цветного светодиода  $\Delta\omega \approx 2\pi \cdot 10^{12}$  Гц и при частоте записи кадров 25 Гц сменяется более  $10^{11}$  реализаций спекл-модулированного поля, что обеспечивает подавление пятнистости изображения до пренебрежимо малого контраста  $C \approx 10^{-5}$ .

Однако использование в голографических системах частотно широкополосного света с малой длиной продольной когерентности (для светодиода  $l_c \approx 20$  мкм) и малым радиусом поперечной когерентности сопряжено с технической сложной проблемой выравнивания разности хода волн в объектном и опорном каналах и пространственным совмещением фронтов этих волн с точностью до долей радиуса когерентности для взаимной когерентности этих волн.

В настоящей работе рассматриваются системы интерференционной микроскопии в частотно-широкополосном излучении протяженных источников для реализации режима цифровой голографической микроскопии отражающих объектов. Представлено теоретическое обоснование возможности использования интерференционных микроскопов с протяженным и широкополосным источником света для записи цифровых голограмм микрообъектов и восстановления (визуализации) их фазовых изображений. Приведены результаты экспериментов по цифровой голографической микроскопии биологических объектов в частично когерентном свете с использованием интерференционного микроскопа Линника.



### Интерференционное изображение в частично когерентном свете

В интерферометрах с делением по амплитуде при использовании протяженных пространственно некогерентных источников света с широким частотным спектром картина интерференции пространственно локализована [27]. Это обусловлено ограниченной областью пространственной когерентности оптического поля с конечной шириной углового спектра. Полосы интерференции на выходе интерферометра формируются только в той области пространства, где интерферирующие поля накладываются с взаимным пространственным сдвигом, не превышающим радиуса когерентности поля в направлении взаимного сдвига полей [28, 29]. Однако, в первую очередь, интерферирующие поля должны быть в достаточной степени идентичными – взаимно когерентными – тогда в области нулевого взаимного сдвига этих полей наблюдаются интерференционные полосы максимального контраста. Оба этих условия определяют необходимость использования идентичных оптических элементов и одинаковую конфигурацию оптических систем в плечах интерферометра. В противном случае разделенные в интерферометре поля перестают быть идентичными и соответственно взаимно когерентными.

Этим требованиям в полной мере удовлетворяют системы интерференционной микроскопии – микроскопы Майкельсона, Линника [7–11, 30–32] и Миро [7, 33, 34]. В данных системах при использовании протяженных источников света локализованная картина интерференции формируется в области действительного изображения исследуемого объекта.

Для реализации метода цифровой внеосевой голографической микроскопии необходимо тем или иным способом создать систему несущих интерференционных полос в плоскости записи голограммы. В интерференционных микроскопах, построенных по схеме Линника и Миро, система опорных интерференционных полос создается или наклоном к оптической оси опорного зеркала или предметной поверхности на некоторый угол  $\alpha$ . В интерферометре Линника при использовании в нем микрообъективов, скорректированных на бесконечность, и тубусной линзы опорные полосы могут быть созданы также путем поперечного сдвига микрообъектива опорного плеча. Однако оба этих способа не позволяют получить опорные полосы достаточно высокой пространственной частоты из-за

апертурных ограничений волнового поля, проходящего через микрообъектив, и возникающих из-за этого эффектов декогерентности опорного поля по отношению к объектному.

На рис. 1, а, б представлена оптическая схема интерференционного микроскопа Линника (без осветительной части). Предполагается, что на вход микроскопа-интерферометра направляется пространственно частично когерентное волновое поле с широким угловым спектром и, следовательно, с малым радиусом поперечной пространственной когерентности. В плечах интерферометра на одинаковых расстояниях от делителя пучка света BS установлены идентичные микрообъективы  $MO_1$  и  $MO_2$ , опорное зеркало  $M_R$  и поверхность объекта  $S$  в передних фокальных плоскостях микрообъективов. Действительные изображения поверхности объекта  $S$  и опорного зеркала  $M_R$  формируются в задней фокальной плоскости тубусной линзы TL. Таким симметричным расположением оптических элементов в плечах интерферометра обеспечивается идентичность и соответственно взаимная когерентность объектного и опорного волновых полей в плоскости записи изображения.

Для создания системы опорных интерференционных полос в плоскости действительного изображения поверхности объекта в интерферометре Линника возможны два варианта линейной фазовой модуляции опорного поля по отношению к полю изображения объекта. В первом варианте (см. рис. 1, а) используют наклон опорного зеркала  $M_R$  на некоторый угол  $\alpha$ , так что падающее и отраженное от опорного зеркала волновое поле  $U_0(t, x, y, z)$  приобретает дополнительный фазовый сдвиг  $\Delta\varphi_R(x) = (2\pi/\lambda_0)2x\sin(\alpha)$ , переменный в пространстве вдоль направления  $x$ , перпендикулярного оси наклона  $y$ , где  $\lambda_0$  – средняя длина волны поля (при использовании микрообъективов с достаточно большой числовой апертурой  $NA$  вместо  $\lambda_0$  необходимо использовать эффективную длину волны  $\lambda_{eff} \approx \lambda_0 2(1 + \cos(\arcsin(NA)))^{-1}$  [35]; в [36–42] получены иные выражения для  $\lambda_{eff}$ ).

Во втором варианте создания опорных полос используют нарушение соосности оптической системы в опорном плече микроскопа путем поперечного сдвига микрообъектива  $MO_2$  на некоторую величину  $\Delta x$  (см. рис. 1, б). В этом случае освещающее оптическое поле  $U_0(t, x, y, z)$  падает на опорное зеркало  $M_R$  и отражается от зеркала под углом  $\alpha = \arctg(\Delta x/f_{MO})$ .

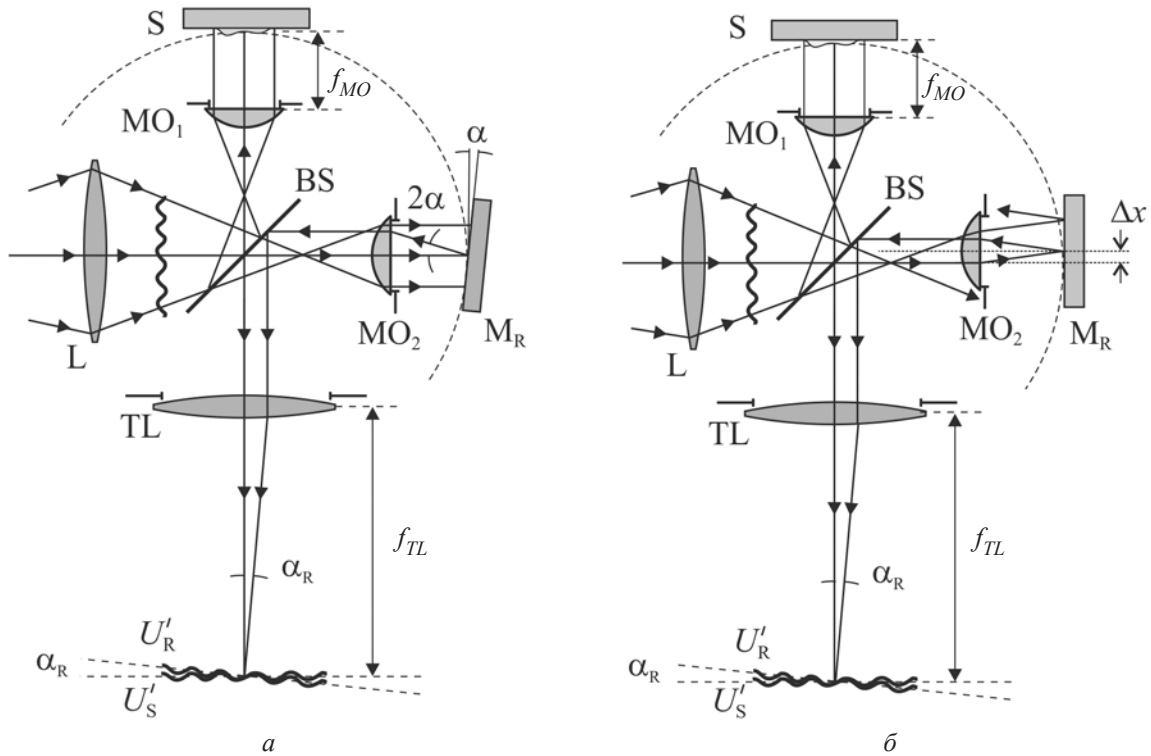


Рис. 1. Схема интерференционного микроскопа Линника (без осветительной части) с использованием наклона опорного зеркала  $M_R$  (а) и поперечным смещением  $\Delta x$  микрообъектива  $MO_2$  в опорном плече (б) для создания опорных интерференционных полос: L – линза осветительной части; BS – делитель пучка света;  $MO_1$  и  $MO_2$  – микрообъективы; S – объект;  $M_R$  – опорное зеркало; TL – тубусная линза

В результате опорное волновое поле приобретает переменный пространственный фазовый сдвиг  $\Delta\varphi_R(x) = (2\pi/\lambda_0)2x \sin(\alpha)$ , определяемый величиной смещения  $\Delta x$  микрообъектива  $MO_2$ .

Возможна комбинация этих способов создания опорных полос в интерференционном изображении микрообъекта. Например, в случае нарушения соосности в опорном плече поверхность объекта может располагаться не перпендикулярно оптической оси, так что фазовая модуляция, определяющая образование опорных полос, возникает одновременно в обоих плечах интерференционного микроскопа. Как правило, это имеет место на практике из-за неточности установки объекта в предметной плоскости микроскопа.

В общем случае опорное зеркало может иметь некоторое продольное (осевое) смещение  $\Delta z_R$ , регулируемое в эксперименте, вызывающее некоторую дефокусировку  $2\Delta z_R$ , дополнительную разность хода  $2\Delta z_R$  и фазовый сдвиг  $2\Delta z_R \cdot 2\pi/\lambda_0$  опорного поля.

Таким образом, для комплексной амплитуды опорного поля можно записать выражение:

$$U_R(t, x, y, z) = U_0(t, x, y, z - 2x \sin \alpha - 2\Delta z_R) \times r_R(x, y) \cdot \exp(ik_0(2x \sin \alpha + 2\Delta z_R)), \quad (1)$$

где для освещающего поля  $U_0(t, x, y, z)$  учтена разность хода  $\Delta_R(x)$  и равный ей продольный сдвиг – дефокусировка поля вдоль оптической оси  $\Delta z(x) = 2x \sin \alpha + 2\Delta z_R$ ,  $r_R(x, y)$  – амплитудный коэффициент отражения опорного зеркала, который в общем случае, например, «плохого» зеркала, может быть переменным в плоскости зеркала  $(x, y)$ .

Аналогичным образом можно записать выражение для комплексной амплитуды объектного поля:

$$U_S(t, x, y, z) = U_0(t, x, y, z - 2h(x, y)) \cdot r_S(x, y) \cdot \exp(ik_0 2h(x, y)), \quad (2)$$

где также учтены и дефокусировка освещающего поля  $U_0(t, x, y, z)$  и его фазовый сдвиг  $\varphi_S(x, y) = k_0 2h(x, y)$ , обусловленные микрорельефом  $h(x, y)$  поверхности объекта,  $r_S(x, y)$  – амплитудный коэффициент отражения объекта и поверхности объектного зеркала (см. рис. 1).





Опорное и объектное волновые поля  $U_R(t, x, y, z)$  и  $U_S(t, x, y, z)$  переотображаются микрообъективами  $MO_1, MO_2$  и тубусной линзой ТЛ в её заднюю фокальную плоскость, где располагается матричный фотодетектор для записи интерференционного изображения. Опорная волна после прохождения тубусной линзы ТЛ падает на заднюю фокальную плоскость линзы под некоторым углом  $\alpha_R$  (см. рис. 1), определяемым или углом наклона опорного зеркала  $\alpha$  или поперечным сдвигом  $\Delta x$  микрообъектива в опорном плече. Объектная волна в целом также может падать под некоторым углом  $\pm \alpha_S$  на заднюю фокальную плоскость тубусной линзы из-за возможного наклонного положения предметного стола по отношению к оптической оси микрообъектива. В результате этих различных направлений распространения опорной и объектной волн и их интерференции формируется картина опорных (несущих) интерференционных полос с периодом  $\Lambda \approx \lambda_0 / (\alpha_R \pm \alpha_S)$ , где учтена малость углов падения в силу относительно большого фокусного расстояния  $f_{TL}$  тубусной линзы.

Отображение опорного и объектного оптических полей осуществляется с некоторым

поперечным увеличением  $M$ , определяемым отношением фокусных расстояний тубусной линзы и микрообъективов  $M = f_{TL} / f_{MO}$ . На фотодетектор падают масштабно измененные опорное и объектное волновые поля с комплексными амплитудами, определяемыми выражениями (1) и (2). При этом в определенном приближении можно пренебречь некоторыми декорреляционными изменениями этих полей, вызванными их поперечными сдвигами во входных зрачках микрообъективов и вносимыми вследствие этого апертурными ограничениями («обрезаниями») полей. Особенно это относится к опорному плечу микроскопа (рис. 2), в котором при наклоне опорного зеркала  $M_R$  или при поперечном сдвиге микрообъектива  $MO_2$  (рис. 2, б) выводится из оптической системы часть падающего на апертуру микрообъектива освещающего поля  $U_0(t, x, y, z)$  в прямом и обратном ходе этого поля через микрообъектив, что вызывает определенную декорреляцию опорного волнового поля. Эта декорреляция приводит к взаимной декогерентности опорного и объектного полей даже при равенстве оптических путей волн в плечах интерферометра в области интерференционной полосы нулевого порядка.

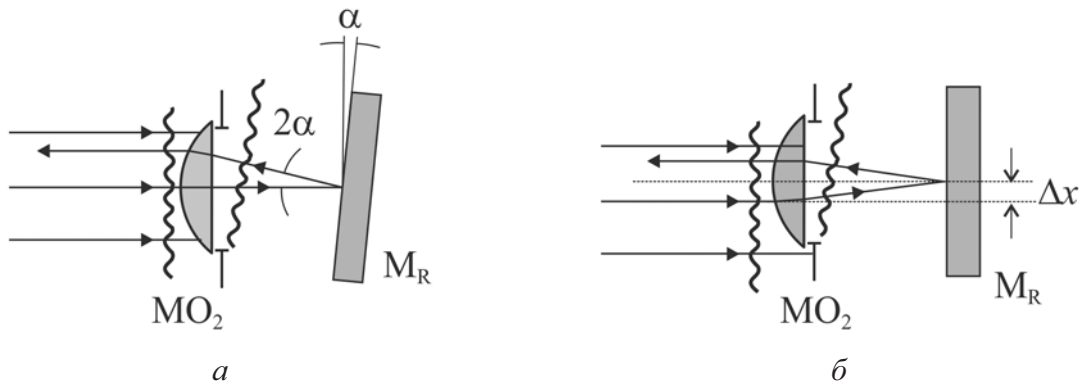


Рис. 2. Возникновение декорреляции вследствие апертурных «обрезаний» оптического поля, проходящего через микрообъектив  $MO_2$  при наклоне опорного зеркала  $M_R$  на угол  $\alpha$  (а) и при поперечном смещении  $\Delta x$  микрообъектива (б)

Реально интерференция опорной и объектной волн имеет место на выходе интерференционного микроскопа – в задней фокальной плоскости тубусной линзы. Однако можно воспользоваться представлением об интерференции опорной и объектной волн в пространстве предметов, рассма-

тривая взаимное наложение пространства опорного зеркала и пространства объекта и соответственно наложение объектного и опорного волновых полей. Исходя из этих представлений, для распределения интенсивности света в интерференционном изображении можно записать следующее уравнение:

$$I(x, y, z) = \langle |U_S(t, x, y, z) + U_R(t, x, y, z)|^2 \rangle = \langle |U_S(t, x, y, z)|^2 \rangle + \langle |U_R(t, x, y, z)|^2 \rangle + \langle U_S(t, x, y, z)U_R^*(t, x, y, z) \rangle + \langle U_S^*(t, x, y, z)U_R(t, x, y, z) \rangle = I_S(x, y) + I_R(x, y) + \Gamma_{SR}(x, y, z) + \Gamma_{SR}^*(x, y, z), \quad (3)$$



где угловые скобки  $\langle \dots \rangle$  определяют временное усреднение, эквивалентное статистическому усреднению по ансамблю реализаций освещающего случайного поля  $U_0(t, x, y, z)$ ;  $U_S(t, x, y, z)$  и  $U_R(t, x, y, z)$  – комплексные амплитуды объектного и опорного оптических волновых полей, определяемые выражениями (1) и (2),  $I_S(x, y)$  и

$$I_S(x, y) = \langle |U_S(t, x, y, z)|^2 \rangle = \langle |U_0(t, x, y, z - 2h(x, y))|^2 \rangle r_S^2(x, y) = I_0(x, y, z - 2h(x, y)) r_S^2(x, y) \approx I_0(x, y, z) r_S^2(x, y), \quad (4)$$

$$I_R(x, y) = \langle |U_R(t, x, y, z)|^2 \rangle = \langle |U_0(t, x, y, z - 2x \sin \alpha - 2\Delta z_R)|^2 \rangle r_R^2(x, y) = I_0(x, y, z - 2x \sin \alpha - 2\Delta z_R) r_R^2(x, y) \approx I_0(x, y, z) r_R^2(x, y), \quad (5)$$

где  $I_0(x, y, z)$  – интенсивность идентичных полей, освещающих объект и опорное зеркало.

В (4) и (5) мы пренебрегли возможным изменением интенсивности поля  $I_0(x, y, z)$  вдоль оптической оси в небольшом интервале  $\Delta z$ , определяемом дефокусировкой опорного поля из-за осевого сдвига опорного зеркала, или

$$\begin{aligned} \Gamma(x, y, z) &= \langle U_S(t, x, y, z) U_R^*(t, x, y, z) \rangle = \langle U_0(t, x, y, z - 2h(x, y)) \cdot U_0^*(t, x, y, z - 2x \sin \alpha - 2\Delta z_R) \rangle \times \\ &\quad \times r_S(x, y) r_R(x, y) \exp(ik_0 2(h(x, y) - x \sin \alpha - \Delta z_R)) = \\ &= \Gamma_0(x, y, z, \Delta z) \cdot r_S(x, y) r_R(x, y) \exp(ik_0 2(h(x, y) - x \sin \alpha - \Delta z_R)) = \\ &= I_0(x, y, z) \gamma_0(x, y, \Delta z) r_S(x, y) r_R(x, y) \times \exp(ik_0 2(h(x, y) - x \sin \alpha - \Delta z_R)), \end{aligned} \quad (6)$$

где  $\Delta z = 2(h(x, y) - x \sin \alpha - \Delta z_R)$  – разность значений продольной (осевой) координаты  $z$  в освещающем поле  $U_0(t, x, y, z)$  для различных по-

$$\Gamma_0(x, y, z, \Delta z) = \langle U_0(t, x, y, z - 2h(x, y)) \cdot U_0^*(t, x, y, z - 2x \sin \alpha - 2\Delta z_R) \rangle, \quad (7)$$

$$\gamma_0(x, y, z, \Delta z) = \frac{\Gamma_0(x, y, z, \Delta z)}{\sqrt{I_0(x, y, z - 2h(x, y)) I_0(x, y, z - 2x \sin \alpha)}} \approx \frac{\Gamma_0(x, y, z, \Delta z)}{I_0(x, y, z)} \quad (8)$$

– нормированная функция продольной когерентности освещающего поля.

Выражение (6) показывает, что степень взаимной когерентности опорной и объектной волн, определяемая модулем нормированной функции взаимной когерентности  $|\gamma_{SR}(x, y, z)| = |\Gamma_{SR}(x, y, z) / \sqrt{I_S(x, y, z) I_R(x, y, z)}|$ , зависит от степени продольной когерентности поля, освещающего опорное зеркало и объект,  $|\gamma_{SR}(x, y, z)| = |\gamma_0(x, y, z, \Delta z)|$ . В свою очередь, степень продольной когерентности освещающего

$I_R(x, y)$  – интенсивности объектного и опорного полей,  $\Gamma_{SR}(x, y, z) = \langle U_S(t, x, y, z) U_R^*(t, x, y, z) \rangle$  – функция взаимной когерентности объектного и опорного полей.

Интенсивности объектного  $I_S(x, y)$  и опорного  $I_R(x, y)$  полей в (3) можно представить в следующем виде:

объектного поля из-за осевого сдвига и микро-рельефа поверхности объекта.

Функцию взаимной когерентности объектного и опорного полей  $\Gamma_{SR}(x, y, z) = \langle U_S(t, x, y, z) U_R^*(t, x, y, z) \rangle$  в (3) можно записать в развернутом виде с использованием (1) и (2):

перечных координат  $(x, y)$ ;  $\Gamma_0(x, y, z, \Delta z)$  – функция продольной когерентности освещающего поля:

поля  $|\gamma_0(x, y, z, \Delta z)|$  в общем случае зависит от ширины частотного спектра  $\Delta \omega$  и ширины углового спектра  $\theta$  поля. При этом длина  $l_c$  продольной когерентности оптического поля в общем случае определяется выражением [43, 44]:

$$\frac{1}{l_c} \approx \frac{1}{l_c} + \frac{1}{\rho_{//}}. \quad (9)$$

Здесь  $l_c$  – длина временной когерентности, определяемая шириной частотного спектра,  $l_c \approx \lambda_0^2 / \Delta \lambda$ , где  $\Delta \lambda$  – ширина частотного спектра в шкале длин волн;  $\rho_{//}$  – длина продольной когерентности, определяемая шириной  $\theta$  углового



спектра поля,  $\rho_{\parallel} \approx \lambda_0 / n2 \sin^2(\theta/2)$ , где  $n$  – показатель преломления иммерсии.

Ширина  $\theta$  углового спектра волнового поля  $U_0(t, x, y, z)$ , освещающего объект и опорное зеркало, определяется диаметром  $D_a$  входной апертуры поля  $A'$  и фокусным расстоянием микрообъектива  $MO$   $2tg\theta = D_a / f_{MO}$  (рис. 3). В пределе, когда  $D_a$  превышает диаметр апертуры микрообъектива, ширина углового спектра поля  $\theta = \theta_0$  определяется числовой апертурой  $NA$  микрообъектива  $\sin \theta_0 = NA/n$ .

С учетом (2)–(7) для пространственного распределения интенсивности в интерференционном изображении получаем выражение

$$\begin{aligned} I(x, y, z) = & I_0(x, y, z) \cdot \{r_s^2(x, y) + r_r^2(x, y) + \gamma_0(x, y, \Delta z) r_r(x, y) \times \\ & \times r_s(x, y) \exp(ik_0 n 2h(x, y)) \exp(-ik_0 2(x \sin \alpha + \Delta z_R)) + \gamma_0^*(x, y, \Delta z) \times \\ & \times r_r(x, y) r_s(x, y) \exp(-ik_0 n 2h(x, y)) \exp(ik_0 2(x \sin \alpha + \Delta z_R))\}. \end{aligned} \quad (10)$$

Это выражение можно также записать в виде классического интерференционного уравнения [27], объединив два последних комплексно сопряженных слагаемых,

$$\begin{aligned} I(x, y, z) = & I_0(x, y, z) \{r_s^2(x, y) + r_r^2(x, y) + 2|\gamma_0(x, y, \Delta z)| \times \\ & \times r_r(x, y) r_s(x, y) \cos(k_0 2(h(x, y) - x \sin \alpha - \Delta z_R) + \phi)\}, \end{aligned} \quad (11)$$

где  $\phi = \arg\{\gamma_0(x, y, \Delta z)\}$ .

Линейное изменение разности фаз волн  $\Delta\phi(x) = 2k_0 x \sin \alpha$  определяет формирование параллельных опорных интерференционных полос – несущих полос голограммной структуры [12, 13]. Поэтому выражение (10) можно рассматривать в качестве голограммной структуры при записи голограммы сфокусированного изображения [12, 13].

Если в области расположения исследуемого объекта достаточно велика степень взаимной когерентности интерферирующих полей,  $|\gamma_0(x, y, z, \Delta z)| \approx 1$ , то третье и четвертое слагаемые в (10) содержат в себе информацию о комплексном коэффициенте отражения объекта:  $\rho_s(x, y) = r_s(x, y) \exp(i 4\pi h(x, y) / \lambda_0)$ . В этом случае на изображении объекта наблюдаются несущие интерференционные полосы, форма которых определяется микрорельефом  $h(x, y)$  поверхности объекта.

Интерференционные полосы в частично когерентном свете имеют локализованный характер. Полосы формируются в той области изображения, где разность хода опорной и объектных волн не

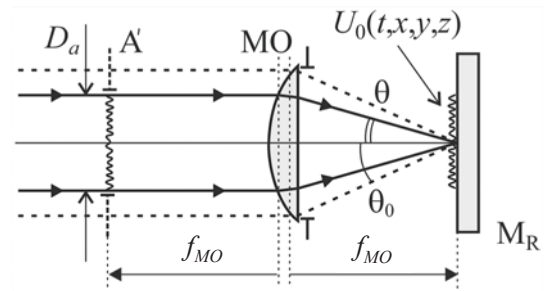


Рис. 3. Угловая апертура  $\theta$  поля, освещающего опорное зеркало и объект:  $A'$  – изображение апертурной диафрагмы в фокальной плоскости микрообъектива  $MO$ ;  $D_a$  – диаметр изображения апертурной диафрагмы;  $M_R$  – опорное зеркало

превышает длину продольной когерентности оптического поля  $L_C$ :  $2(h(x, y) + x \sin \alpha + \Delta z_R) \leq L_C$ . При этом центр области локализации полос, где контраст полос максимален, определяется как  $x_{\max} = (h(x, y) + \Delta z_R) / \sin \alpha$ . Изменением величины  $\Delta z_R$  – положения опорного зеркала, можно смещать положение области локализации полос и совмещать ее с объектом исследования. Вне изображения объекта, где  $h(x, y) = \text{const}$  – зеркальная поверхность подложки, протяженность  $2x_L$  области локализации полос в перпендикулярном полосам направлении (рис. 4) определяется выражением  $2x_L \approx L_C / \sin \alpha$ .

На рис. 4 представлено пространственное распределение интенсивности в изображении поверхности тестового объекта, рассчитанное в соответствии с (11). В качестве объекта рассматривался сферический выступ, поверхность которого  $h(x, y)$  задавалась уравнением  $h(x, y) \approx h_0 (1 - (x^2 + y^2) / R^2)$  при  $(x^2 + y^2) \leq R^2$ , где  $h_0 = 0.5$  мкм и  $R = 350$  мкм – высота и радиус границы выступа на плоскости объектного зеркала. Формирование опорных полос осуществлялось путем наклона зеркала в опорном плече на угол  $\alpha = 10^\circ$ . Рассматривались источник белого света (рис. 4, а) с центральной длиной волны  $\lambda_H = 0.535$  мкм и длиной временной когерентности  $l_C = 1.5$  мкм, и красный светодиод (рис. 4, б) с  $\lambda_D = 0.63$  мкм и  $l_C = 15$  мкм. При этом модуль нормированной функции продольной когерентности освещающего поля задавался в виде  $|\gamma_0(\Delta z)| = \exp(-\Delta z^2 / l_C^2)$ .

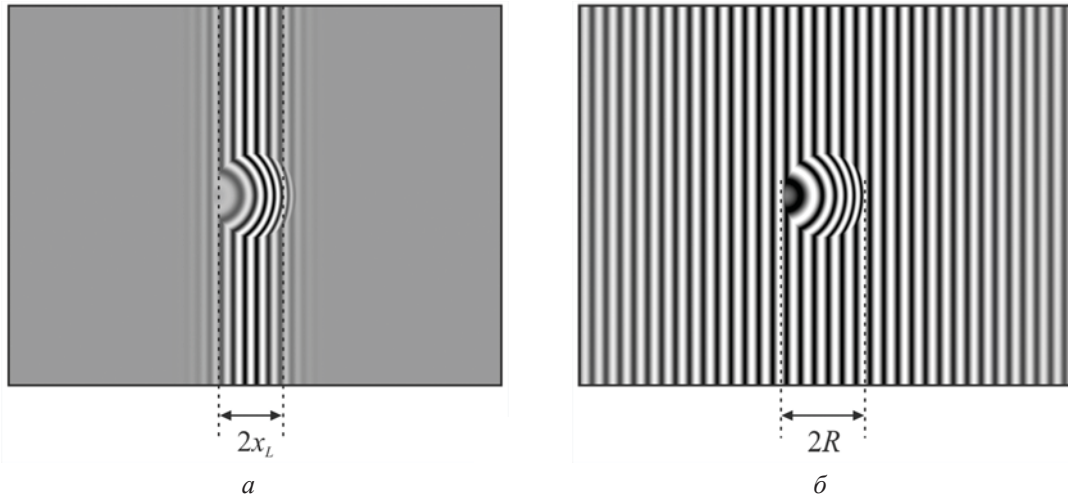


Рис. 4. Рассчитанные интерференционные изображения: *a* – для белого света с  $l_C = 1.5$  мкм; *б* – для квазимонохроматического света с  $l_C = 15$  мкм

На участке зеркала, содержащем выступ, образуется изгиб опорных полос из-за переменной разности хода волн  $\Delta_S(x, y) = 2nh(x, y)$ , вносимой в отраженное волновое поле вариациями рельефа поверхности объекта.

Таким образом, цифровая голограмма сфокусированного изображения в частично когерентном свете имеет локализованный характер – голографическая запись осуществляется в локальной области изображения.

#### Голографическая обработка интерферограмм в частично когерентном свете

Для восстановления по цифровой голограмме комплексной амплитуды объектного поля  $U_S(t, x, y, z)$  и построения микрорельефа поверхности объекта  $h(x, y)$  необходимо отфильтровать в (10) третье или четвертое слагаемое, что возможно при использовании спектральной фильтрации. В цифровой голографии пространственно-частотная фильтрация выполняется с помощью специализированной численной процедуры, включающей: фурье-преобразование исходной голограммы, полосовую фильтрацию компонент спектра голограммы, соответствующих объектному полю, обратное фурье-преобразование для восстановления в численном виде комплексной амплитуды объектного поля. Полная (чистая) фильтрация третьего или четвертого компонента в (10) возможна при условии, если частота опорных полос  $f_R$  голограммной структуры более чем в два раза превышает максимальную частоту спектра интенсивности изображения объекта  $f_{S_{\text{int}}}$ ,  $f_R \geq 2f_{S_{\text{int}}}$  [1].

Если в микроинтерферометре используется освещение по Келлеру [27], то интенсивность освещающего волнового поля  $I_0(x, y, z)$  и его степень продольной когерентности  $|\gamma_0(x, y, z, \Delta z)|$  практически постоянны в плоскости объекта и опорного зеркала. Коэффициент отражения опорного зеркала  $r_R(x, y) \approx r_R$  – постоянная величина, если используется «хорошее» опорное зеркало – без царапин и пылинок на поверхности, что, однако, не всегда бывает. Таким образом, ширина составляющих пространственного спектра голограммы в лучшем случае определяется в основном пространственными вариациями комплексного коэффициента отражения объекта  $\rho(x, y) = r_S(x, y) \cdot \exp(ik_0 n 2h(x, y))$  – вариациями амплитудного коэффициента отражения поверхности объекта  $r_S(x, y)$  и, в значительной степени, фазовыми вариациями объектного поля  $\varphi_S(x, y) = k_0 n 2h(x, y)$ , обусловленными вариациями микрорельефа поверхности  $h(x, y)$ . Максимальная пространственная частота объектного поля ограничивается числовой апертурой микрообъектива и длиной волны света  $f_{S_{\text{max}}} = NA/\lambda_0$ . Отсюда следует, что для максимального разрешения голографического микроскопа период опорных полос должен быть в 2 и более раза меньше элемента оптического разрешения микроскопа.

Однако в интерференционных микроскопах (в том числе в микроинтерферометре Линника) имеются технические ограничения по созданию опорных полос требуемой высокой пространственной частоты  $f_R$ . Это приводит к тому, что спектральные компоненты объектного поля могут частично перекрываться с компонентами





спектра интенсивности объектного поля, что ограничивает возможности по частотной фильтрации голограммы (рис. 5, а). Для уменьшения влияния пересечения спектральных компонент на эффективность спектральной фильтрации можно использовать особую последовательность записи цифровых изображений. На первом этапе – запись изображения картины интерференции опорного и объектного полей, затем – запись только изображения объекта  $I_S(x, y)$  и запись только изображения опорного зеркала  $I_R(x, y)$ . Численное вычитание изображений  $I_S(x, y)$  и  $I_R(x, y)$  из интерференционной картины позволяет устранить в (10) первое и второе слагаемые, и для переменной составляющей интенсивности в интерференционном изображении можно записать выражение

$$\tilde{I}(x, y, z) = I_0(x, y, z) 2 \operatorname{Re} \{ \gamma_0(x, y, z, \Delta z) r_r(x, y) r_s(x, y) \times \exp[ik_0 2h(x, y)] \exp[-ik_0 2(x \sin \alpha_x + y \sin \alpha_y + \Delta z_R)] \}, \quad (12)$$

где предполагается одновременный наклон опорного зеркала вокруг взаимно-перпендикулярных осей на углы  $\alpha_x$  и  $\alpha_y$ .

На рис. 5, б приведен спектр цифровой голограммы в частично когерентном свете до и после применения вышеописанной процедуры. Наблюдается устранение большей части компонент дифракционного гало, что позволяет эффективно выделять спектральные компоненты объектного поля в спектре голограммы.

Необходимо отметить, что численное устранение в спектре голограммы компонент дифракционного гало применимо для объектов, которые не претерпевают изменений во времени, так как запись изображений осуществляется в разные временные моменты.

Применение полосовой фильтрации спектра голограммы и последующее обратное фурье-преобразование отфильтрованной области дают возможность в численном виде восстановить комплексную амплитуду  $U_S(x, y)$  объектного поля в следующем виде:

$$U_S(x, y) \sim F^{-1} \{ B(\xi, \eta) \cdot F \{ r_s(x, y) \exp[ik_0 2h(x, y)] \times \exp[-ik_0 2(x \sin \alpha_x + y \sin \alpha_y + \Delta z_R)] \} \} = F^{-1} \{ B(\xi, \eta) \} \otimes (r_s(x, y) \exp[ik_0 2h(x, y)] \times \exp[-ik_0 2(x \sin \alpha_x + y \sin \alpha_y + \Delta z_R)]), \quad (13)$$

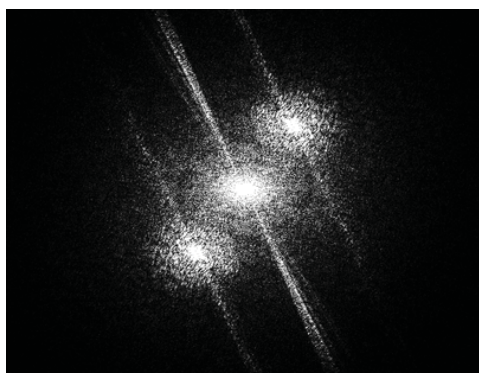
где  $B(\xi, \eta)$  – апертурная функция окна фильтрации, фурье-образ которой  $F^{-1} \{ B(\xi, \eta) \}$  определяет импульсный отклик системы и соответственно разрешение восстановленного изображения.

В (13) сомножитель  $\exp[-2ik_0(x \sin \alpha_x + y \sin \alpha_y)]$ , связанный с использованием при записи голограммы наклонно падающей под углами  $\alpha_x$  и  $\alpha_y$  опорной волны, модулирует по фазе по линейному закону восстановленное объектное поле  $U_S(x, y)$ . Для устранения этой модуляции цифровую голограмму необходимо поэлементно перемножить с дискретной комплексной функцией  $U'_R(x, y) = \exp(i\varphi'(x, y))$ , аргумент которой равен по величине, но противоположен по знаку аргументу сомножителя в (13):  $U'_R(x, y) = \exp[ik_0 2x \sin \alpha_x] \exp[ik_0 2y \sin \alpha_y]$ .

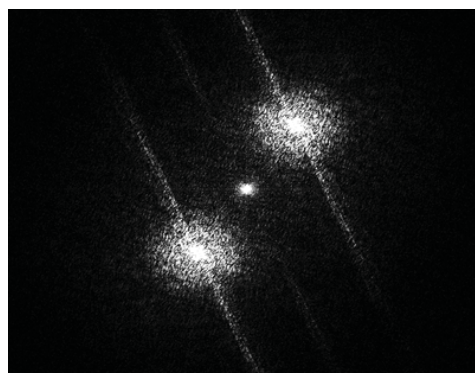
В результате такой процедуры происходит смещение спектральных компонент объектного поля в центр спектрального окна – в область нулевых частот (рис. 6). Полосовая фильтрация смещенных объектных компонент спектра позволяет устранить линейную фазовую модуляцию в восстановленной комплексной амплитуде объектного поля:

$$U_S(x, y) \sim F^{-1} \{ B(\xi, \eta) \} \otimes (r_s(x, y) \exp[ik_0 2h(x, y)]), \quad (14)$$

где  $\otimes$  – знак операции свертки.



а



б

Рис. 5. Спектры цифровой голограммы сфокусированного изображения в частично когерентном свете: а – спектр исходной голограммы; б – спектр после частичного устранения дифракционного гало

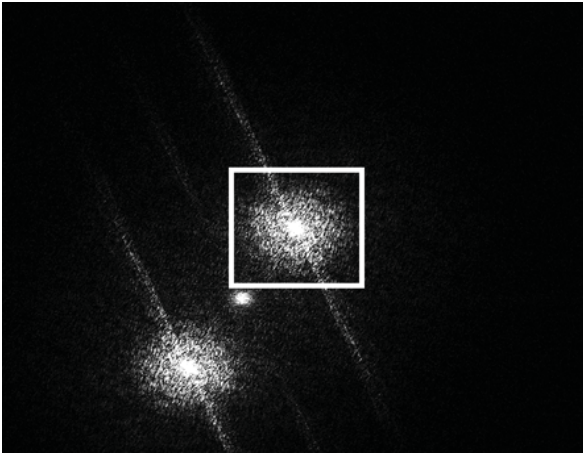


Рис. 6. Полосовая фильтрация объектных компонент в спектре цифровой голограммы, полученном в результате численной компенсации влияния наклонного падения опорной волны при записи голограммы

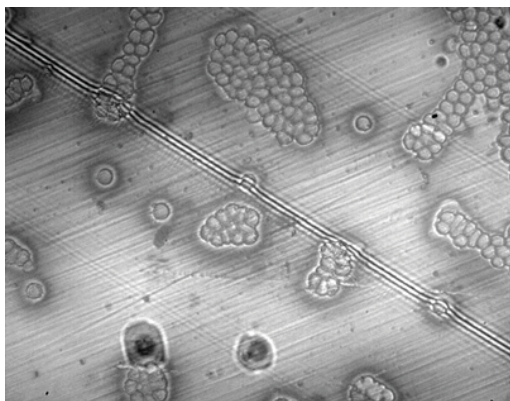
Вышеприведенный алгоритм голографической обработки интерферограмм в частично когерентном свете дает возможность численного восстановления и визуализации пространственного распределения комплексных амплитуд объектного поля и микрорельефа поверхности объекта.

#### Экспериментальные исследования микрообъектов в частично когерентном свете

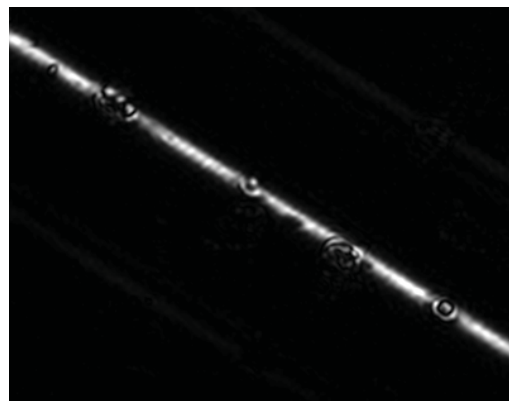
Голографическая обработка интерферограмм в частично когерентном свете использовалась для выявления особенностей морфологии

форменного элемента крови (эритроцита). Объектом исследования служил препарат образца крови человека в виде мазка на предметном стекле. Применялись три источника освещения: галогеновая лампа белого света с центральной длиной волны  $\lambda_H \approx 0.54$  мкм и длиной временной когерентности (с учетом полосы чувствительности фотодетектора)  $l_{CH} \approx 1.5$  мкм; светодиод ( $\lambda_D \approx 0.65$  мкм,  $l_{CD} \approx 10$  мкм); гелий-неоновый лазер ( $\lambda_L \approx 0.63$  мкм,  $l_{CL} \approx 0.3$  м). Опорные полосы на интерферограммах формировались путем наклона зеркала в опорном плече микроинтерферометра на угол  $\alpha \approx 6^\circ$ .

На рис. 7, а представлен фрагмент интерферограммы группы эритроцитов в белом свете. Малая длина временной когерентности обуславливает небольшое число несущих полос на изображении объекта и ограничивает область локализации полос в перпендикулярном направлениям. Таким образом, запись голографического изображения осуществляется только на некоторой небольшой по площади части интерферограммы, что приводит к восстановлению с голограммы пространственного распределения комплексной амплитуды объектного поля в такой же по размеру области (рис. 7, б). На приведенном рисунке видно, что размеры одиночного эритроцита фактически превышают ширину области восстановления изображения с голограммы, что ограничивает анализ морфологических особенностей клеток препарата.



а



б

Рис. 7. Голографическая обработка интерференционного изображения группы эритроцитов, наблюдаемых в белом свете в микроинтерферометре Линника: а – исходная интерферограмма; б – изображение, восстановленное путем голографической обработки интерферограммы

Применение лазерного излучения с большой длиной временной когерентности позволяет сформировать интерферограмму с системой

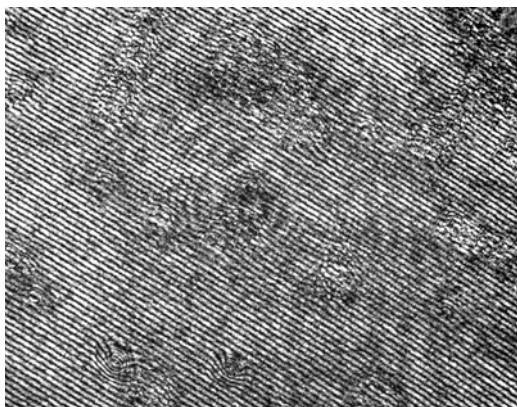
несущих полос по всему полю изображения (рис. 8, а). Однако в этом случае формируются интенсивные когерентные шумы, включая



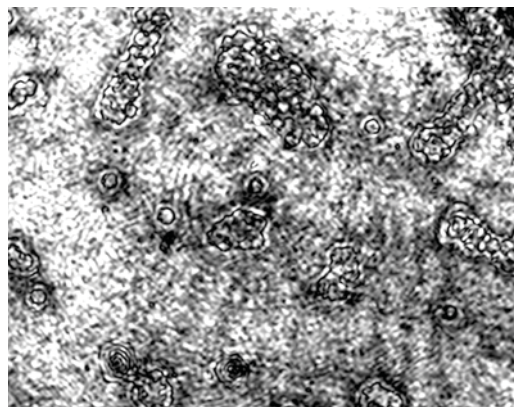


спекл-модуляцию, обусловленные интерференцией волн, рассеянных на пылинках, царапинах и иных неоднородностях в оптических каналах микроинтерферометра. Эта случайная

пространственная модуляция переносится на восстановленное изображение, что значительно снижает разрешение деталей в изображении (рис. 8, б).



а

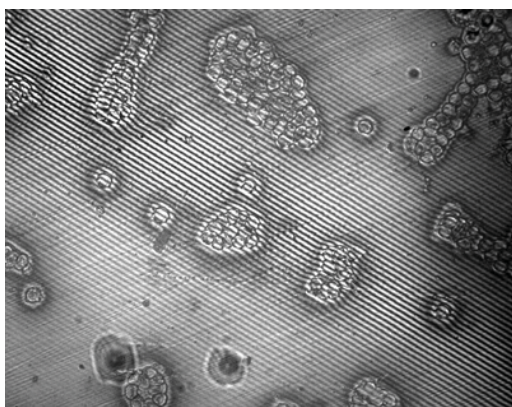


б

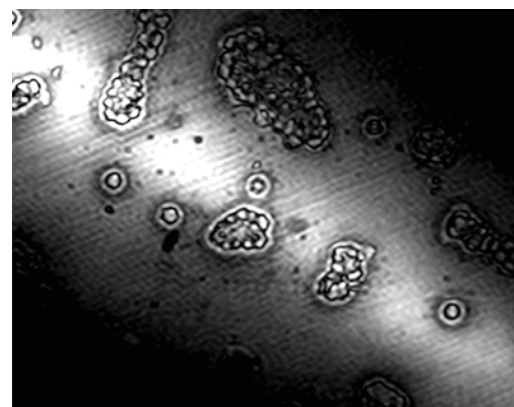
Рис. 8. Интерференционное изображение группы эритроцитов в лазерном свете (а) и восстановленное изображение (б)

Устранение паразитной модуляции происходит при использовании цветного светодиода с длиной временной когерентности большей, чем у белого света, и существенно меньшей, чем у лазера (рис. 9, а). По сравнению с белым светом значительно увеличивается протяженность области локализации интерференционных полос (см.

рис. 9, а) – голографическая структура формируется на значительной части изображения. Область, где восстанавливается комплексная амплитуда объектного поля, становится пропорционально больше – на восстановленном изображении присутствуют группы эритроцитов не только в центре изображения, но и на его периферии (рис. 9, б).



а



б

Рис. 9. Голографическая обработка интерференционного изображения группы эритроцитов в излучении цветного светодиода: а – исходная интерферограмма; б – восстановленное изображение

Контраст изображения снижается при движении от центра к границе области локализации интерференционных полос в соответствии с профилем модуля нормированной функции продольной когерентности  $|\gamma_0(\Delta)|$  освещающего поля (рис. 10).

Голографическая обработка интерферограмм предопределяет возможность прямого расчета и последующей визуализации микрорельефа  $h(x, y)$  поверхности исследуемого объекта:

$$h(x, y) = \frac{\lambda}{4\pi} \varphi_s(x, y) \sim \frac{\lambda}{4\pi} \arg\{U_s(x, y)\}, \quad (14)$$

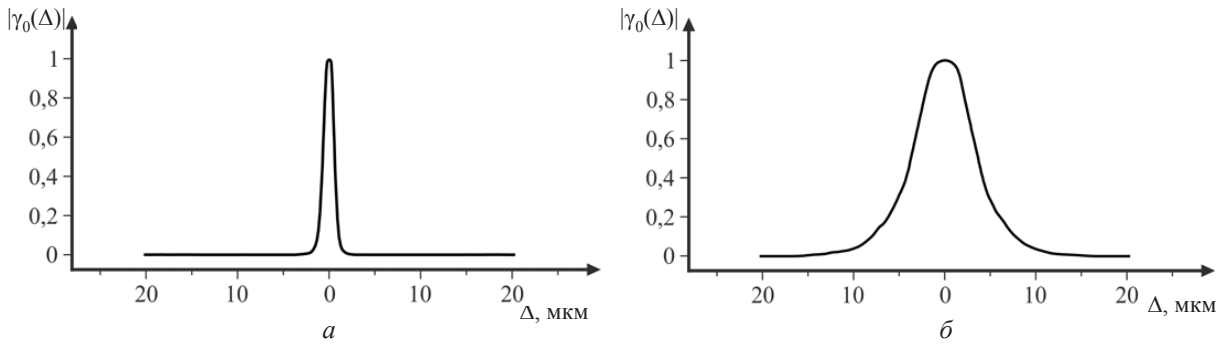


Рис. 10. Модуль степени когерентности  $|\gamma_0(\Delta)|$  освещающего поля в шкале разности хода  $\Delta$ , определенный по восстановленным изображениям: *a* – в белом свете (см. рис. 7, б); *б* – в свете светодиода (см. рис. 9, б)

где  $\varphi_s(x, y)$  – фазовое распределение в объектном поле. Численная процедура состоит из нескольких этапов: I – выбор области поверхности объекта, где требуется восстановление микрорельефа – из полного набора восстановленных комплексных амплитуд  $U_s(x, y)$  объектного поля выделяются относящиеся к выбранной области; II – вычисление распределения фазы  $\varphi_s(x, y)$  в объектном поле через вычисление аргумента для каждого элемента в массиве комплексных амплитуд  $\arg\{U_s(x, y)\}$ ; III – на основе пространственного распределения фазы  $\varphi_s(x, y)$  построение карты высот по поверхности объекта – визуализация микрорельефа  $h(x, y)$ .

На рис. 11 представлен результат численной визуализации микрорельефа поверхности нескольких эритроцитов, осуществленной по восстановленному с интерферограммы (см. рис. 9, а)

пространственному распределению комплексной амплитуды объектного поля. На рис. 11, а показана область в изображении восстановленного объектного поля, по которой осуществлялся расчет микрорельефа поверхности одиночной клетки и визуализация её трехмерного изображения (рис. 11, б). Хорошо различимы размер и форма эритроцита на подложке препарата. Оценка диаметра эритроцита по реконструированному профилю дает значение 7 – 8 мкм, что хорошо согласуется с результатами экспериментов с использованием полнопольной интерференционной микроскопии [45] и с литературными источниками [46, 47]. На рис. 11, в представлено трехмерное изображение пары близко расположенных эритроцитов, рассчитанное в соответствии с выделенной областью на изображении объектного поля препарата (рис. 11, в).

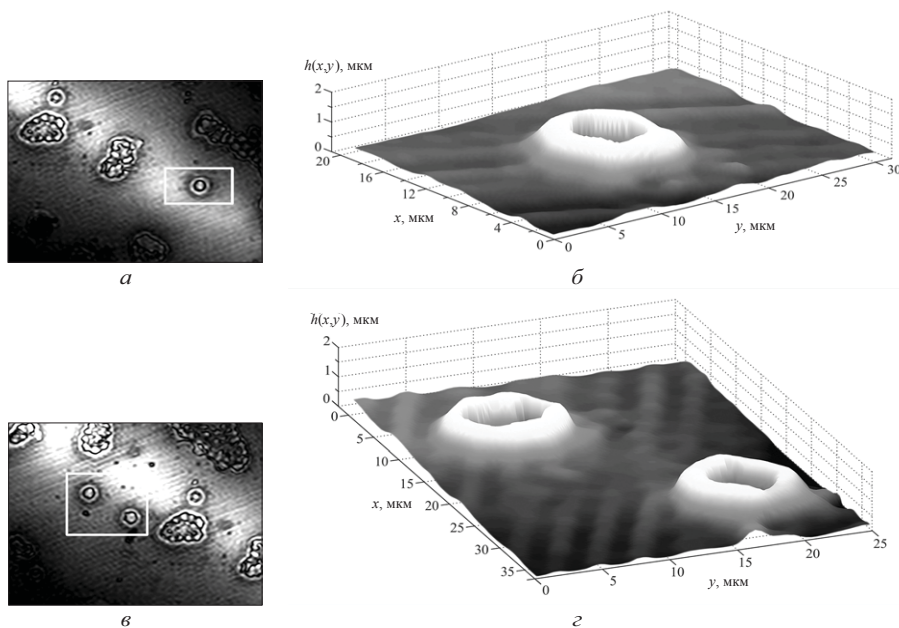


Рис. 11. Восстановление микрорельефа поверхности эритроцитов с интерферограммы, записанной в излучении светодиода: *a, в* – области восстановленных изображений эритроцитов, *б, г* – профили микрорельефа поверхности одиночного (*б*) и пары (*г*) эритроцитов





### Заключение

Таким образом, применение метода голографической обработки интерференционных изображений в частично когерентном свете позволяет представить пространственное распределение фазы объектного поля в численном виде, что исключает трудоемкий процесс интерпретации интерферограмм в полосах конечной ширины и позволяет осуществить трехмерную визуализацию микрорельефа поверхности исследуемого объекта. При этом имеется возможность при записи интерферограммы эффективно применять стандартные интерференционные системы формирования интерференционных изображений, например, микроинтерферометр Линника, широко используемый на практике, в промышленности, в технологических разработках.

Геометрия оптических схем интерференционных микроскопов и их апертурные параметры ограничивают возможности формирования опорных полос высокой пространственной частоты, что требуется для эффективного разделения компонент в спектре голограммы и увеличения разрешения восстанавливаемых и визуализируемых фазовых изображений при исследовании отражающих микрообъектов с высокими пространственными частотами микрорельефа поверхности. Для преодоления таких затруднений требуется разработка новых схемных решений записи голограмм отражающих объектов в пространственно частично когерентном свете с более высокой пространственной частотой несущих интерференционных полос, чем это технически возможно в существующих системах интерференционной микроскопии.

Авторы благодарны А. А. Гребенюку и С. Г. Каленкову за конструктивные замечания по теме настоящей работы.

*Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 16-19-10528).*

### Список литературы

1. Schnars U., Jueptner W. Digital holographic microscopy // Digital holography : digital hologram recording, numerical reconstruction, and related techniques. Berlin ; Heidelberg : Springer, 2005. P. 95–99.
2. Rappaz B., Marquet P., Cuhe E., Emery Y., Depeursinge C., Magistretti P. J. Measurement of the integral refractive index and dynamic cell morphometry of living cells with digital holographic microscopy // Opt. Express. 2005. Vol. 13, iss. 23. P. 9361–9373.
3. Kemper B., Langehanenberg P., von Bally G. Digital holographic microscopy // Optik & Photonik. 2007. Vol. 2, № 2. P. 41–44.
4. Kemper B., von Bally G. Digital holographic microscopy for live cell applications and technical inspection // Appl. Opt. 2008. Vol. 47, iss. 4. P. A52–A61.
5. Kim M. K. Digital Holographic Microscopy : Principles, Techniques, and Applications. Springer Series in Optical Sciences. Vol. 162. New York ; Dordrecht ; Heidelberg ; London : Springer, 2011. 236 p.
6. Pluta M. Microinterferometr // Advanced Light Microscopy : Measuring techniques. Amsterdam : Elsevier, 1993. Vol. 3. P. 317–506.
7. de Groot P. Principles of interference microscopy for the measurement of surface topography // Advances in Optics and Photonics. 2015. Vol. 7, iss. 1. P. 1–65.
8. Abdulhalim I. Spatial and temporal coherence effects in interference microscopy and full-field optical coherence tomography // Annalen der Physik. 2012. Vol. 524, № 12. P. 787–804.
9. Тычинский В. П. Когерентная фазовая микроскопия внутриклеточных процессов // УФН. 2001. Т. 171, № 6. С. 649–662.
10. Вишняков Г. Н., Левин Г. Г., Минаев В. Л., Цельмина И. Ю. Интерференционная микроскопия субнанометрового разрешения по глубине. Экспериментальные исследования // Оптика и спектроскопия. 2014. Т. 116, № 1. С. 170–175.
11. Резчиков А. Ф., Рябухо В. П. Высокоразрешающие интерференционные методы контроля рельефа поверхности и слоистой структуры изделий точного машиностроения и приборостроения // Проблемы машиностроения и надежности машин. 2010. Вып. 1. С. 68–79.
12. Кольер Р., Беркхарт К., Лин Л. Оптическая голография / пер. с англ. М. : Мир, 1973. 421 с.
13. Клименко И. С. Голография сфокусированных изображений и спекл-интерферометрия. М. : Наука, 1985. 224 с.
14. Франсон М. Оптика спеклов / пер. с англ. М. : Мир, 1980. 171 с.
15. Goodman J. W. Speckle Phenomena in Optics : Theory and Applications. Englewood : Roberts & Company Publishers, 2006. 387 p.
16. Джоунс Р., Уайкс К. Голографическая и спекл-интерферометрия / пер. с англ. М. : Мир, 1986. 328 с.
17. Dubois F., Joannes L., Legros J.-C. Improved three-dimensional imaging with a digital holography microscope with a source of partial spatial coherence // Appl. Opt. 1999. Vol. 38, iss. 34. P. 7085–7094.
18. Dubois F., Callens N., Yourassowsky C., Hoyos M., Kurovski P., Monnom O. Digital holographic microscopy with reduced spatial coherence for three-dimensional particle flow analysis // Appl. Opt. 2006. Vol. 45, iss. 5. P. 864–871.
19. Minetti C., Callens N., Coupler G., Podgorski T., Dubois F. Fast measurements of concentration profiles inside deformable objects in microflows with reduced spatial coherence digital holography // Appl. Opt. 2008. Vol. 47, iss. 29. P. 5305–5314.



20. Dubois F., Yourassowsky C., Callens N., Minetti C., Queeckers P. Applications of digital holographic microscopes with partially spatial coherence sources // J. Physics : Conf. Series. 2008. Vol. 139, № 1. P. 012027-1–012027-6.
21. Slabý T., Kolman P., Dostál Z., Antoš M., Lošťák M., Chmelík R. Off-axis setup taking full advantage of incoherent illumination in coherence-controlled holographic microscope // Opt. Express. 2013. Vol. 21, iss. 12. P. 14747–14762.
22. Grebenyuk A. A., Ryabukho V. P. Numerical focusing in digital holographic microscopy with partially spatially coherent illumination in transmission // Proc. SPIE 9031. 2014. P. 903119-1–903119-2.
23. Grebenyuk A. A., Tarakanchikova Y. V., Ryabukho V. P. An off-axis digital holographic microscope with quasispectral partially spatially coherent illumination in transmission // J. Optics. 2014. Vol. 16, № 10. P. 105301-1–105301-6.
24. Каленков С. Г., Каленков Г. С., Штанько А. Е. Пространственно-спектральная цифровая голография микрообъектов в низкокогерентном свете // Радиотехника и электроника. 2013. Т. 58, № 12. С. 1243–1248.
25. Kalenkov S. G., Kalenkov G. S., Shtanko A. E. Spectrally-spatial fourier-holography // Opt. Express. 2013. Vol. 21, iss. 21. P. 24985–24990.
26. Каленков Г. С., Каленков С. Г., Штанько А. Е. Гиперспектральная голографическая фурье-микроскопия // Квантовая электроника. 2015. Т. 45, № 4. С. 333–338.
27. Борн М., Вольф Э. Основы оптики / пер. с англ. М. : Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1973. 720 с.
28. Рябухо В. П., Перепелицына О. А. О локализации интерференционных полос в частично-когерентном излучении // Физ. образов. в вузах. 2001. Т. 7, вып. 2. С. 15–27.
29. Рябухо В. П., Лякин Д. В., Лычагов В. В. Какой тип когерентности оптического поля наблюдается в интерферометре Майкельсона // Оптика и спектроскопия. 2007. Т. 102, вып. 6. С. 996–1005.
30. Linnik V. P. Ein apparat fur mikroskopisch-interferometrische untersuchung reflektierender objekte (Mikrointerferometer) // Akad. Nauk S.S.S.R. Doklady. 1933. Vol. 21, № 1. P. 18–23.
31. Dubois A., Vabre L., Voccaro A.-C., Beaurepaire E. High-resolution full-field optical coherence tomography with a Linnik microscope // Appl. Opt. 2002. Vol. 41, iss. 4. P. 805–812.
32. Лычагов В. В., Рябухо В. П., Кальянов А. Л., Смирнов И. В. Низкокогерентная интерферометрия слоистых структур в полихроматическом свете с цифровой записью и обработкой интерферограмм // Комп. оптика. 2010. Т. 34, вып. 4. С. 23–36.
33. Kino G. S., Chim S. S. C. Mirau correlation microscope // Appl. Opt. 1990. Vol. 29, iss. 26. P. 3775–3783.
34. Wyant J. C., Creath K. Advances in interferometric optical profiling // Intern. J. Machine Tools and Manufacture. 1992. Vol. 32, № 1. P. 5–10.
35. Dubois A., Selb J., Vabre L., Voccaro A.-C. Phase measurements with wide-aperture interferometers // Appl. Opt. 2000. Vol. 39, iss. 14. P. 2326–2331.
36. Захарьевский А. Н. Ширина полос и эффективная длина волны в микроинтерферометрах // Измер. техника. 1957. № 2. С. 20–22.
37. Ingelstam E., Johansson L. P. Corrections due to aperture in transmission interference microscopes // J. Sci. Instrum. 1958. Vol. 35, № 1. P. 15–17.
38. Gates J. W. Fringe spacing in interference microscopes // J. Sci. Instrum. 1956. Vol. 33, № 12. P. 507.
39. Bruce C. F., Thornton B. S. Obliquity effects in interference microscopes // J. Sci. Instrum. 1957. Vol. 34, № 5. P. 203–204.
40. Sheppard C. J. R., Larkin K. G. Effect of numerical aperture on interference fringe spacing // Appl. Opt. 1995. Vol. 34, iss. 22. P. 4731–4734.
41. Creath K. Calibration of numerical aperture effects in interferometric microscope objectives // Appl. Opt. 1989. Vol. 28, iss. 15. P. 3333–3338.
42. Abdulhalim I. Theory for double beam interference microscopes with coherence effects and verification using the Linnik microscope // J. Modern Optics. 2001. Vol. 48, № 2. P. 279–302.
43. Рябухо В. П., Лякин Д. В., Лычагов В. В. Длина продольной когерентности оптического поля // Оптика и спектроскопия. 2009. Т. 107, № 2. С. 300–305.
44. Ryabukho V. P., Lyakin D. V., Grebenyuk A. A., Klyukov S. S. Wiener-Khintchin theorem for spatial coherence of optical wave field // J. Optics. 2013. Vol. 15, № 2. P. 025405-1–025405-11.
45. Кальянов А. Л., Малинова Л. И., Боголюбова Е. В., Смирнов И. В., Лычагов В. В., Рябухо В. П. Исследование комплекса «эритроцит – плазма» нативного мазка крови человека методом полнопольной микроинтерферометрии в белом свете // Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика. 2011. Т. 11, вып. 2. С. 19–24.
46. Физиология человека / под ред. В. М. Покровского, Г. Ф. Коротько. М. : Медицина, 2011. 664 с.
47. Turgeon M. L. Clinical Hematology : Theory and Procedures. Philadelphia ; Baltimore ; N.Y. ; L. : Lippincott Williams & Wilkins, 2011. 588 p.

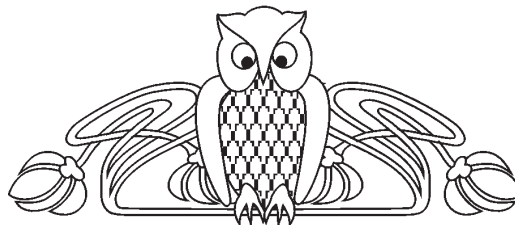


УДК 535.345.1

## НЕУПРУГИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ОПТИЧЕСКИХ СОЛИТОНОВ В РАМКАХ МОДЕЛИ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С ПЕРЕМЕННЫМИ КОЭФФИЦИЕНТАМИ

А. С. Пластун<sup>1</sup>, А. И. Конюхов<sup>1, 2</sup>, Л. А. Мельников<sup>2</sup>, С. А. Зарьков<sup>1</sup><sup>1</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского<sup>2</sup>Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю. А.

E-mail: plastun\_alex@mail.ru



Показано, что в системах, подчиняющихся нелинейному уравнению Шредингера с переменными коэффициентами, взаимодействие двух солитонов может носить неупругий характер. Неупругое столкновение солитонов может приводить к изменению их групповых скоростей, амплитуд, и длительностей. Рассмотрено несколько частных случаев, связанных с разделением солитонной пары, образованием связанного состояния двух солитонов. В прикладном аспекте данные эффекты могут быть использованы для управления солитонным взаимодействием в оптических линиях связи.

**Ключевые слова:** оптические солитоны, нелинейное уравнение Шредингера, волоконная оптика, математическое моделирование, взаимодействие солитонов.

### Optical Soliton Inelastic Interactions in Nonlinear Schrödinger Equation with Variable Coefficients Model

A. S. Plastun, A. I. Konyukhov, L. A. Melnikov, S. A. Zarkov

It is shown that in systems described by nonlinear Schrödinger equation with variable coefficients, interaction of two solitons can carry an inelastic character. Inelastic collision solitons can lead to changes in their group velocities, amplitudes and durations. We consider some particular cases related to the separation of the soliton pair and formation of a bound state of two solitons. In the applied aspect these phenomena can be used to control the soliton interaction in optical fiber communications.

**Key words:** optical soliton, nonlinear Schrödinger equation, fiber optics, numerical modeling, soliton collision.

DOI: 10.18500/1817-3020-2016-16-2-81-86

### Введение

Управление оптическими солитонами подразумевает собой возможность изменения числа солитонов, их амплитуд, групповых скоростей. Оптические солитоны подчиняются нелинейному уравнению Шредингера [1]. Солитонные решения этого уравнения отличаются неизменной формой. При столкновениях солитоны сохраняют свои параметры, т. е. взаимодействуют упруго. Изменение параметров оптических солитонов возможно при неупругих столкновениях. Не-

упругие столкновения описываются нелинейным уравнением Шредингера, в котором присутствуют некоторые слагаемые, описывающие возмущение. В качестве таких возмущений может использоваться спектральная фильтрация, нелинейные потери, нелинейное усиление, дисперсия высших порядков. В данном случае модифицированное нелинейное уравнение Шредингера часто называют комплексным уравнением Гинзбурга–Ландау [1]. Данное уравнение описывает достаточно большой класс задач, связанный с неупругим взаимодействием солитонов (см. главу 13 в [1]). Солитонные пары, описываемые комплексным уравнением Гинзбурга–Ландау, могут существовать в различных формах. Возможно формирование связанных солитонных состояний [2], формирование структур, которые изменяются периодически, квазипериодически или хаотично [3].

Для управления динамикой солитонов возможно использование модуляции фазы поля во времени [4]. Фазовая модуляция может использоваться для управления временным интервалом между солитонами.

Другой подход для управления взаимодействием солитонов основан на использовании поляризованных оптических солитонов [1, гл. 7]. В данном случае роль возмущения играет фазовая кросс-модуляция в системе двух связанных нелинейных уравнений Шредингера. Анализ данной системы показывает возможность управления групповыми скоростями и амплитудами солитонных импульсов.

Каждый из методов [1–4], предложенных для управления оптическими солитонами, при практической реализации имеет те или иные недостатки. Спектральная фильтрация увеличивает длительность импульсов, что может быть нежелательным эффектом. Модуляцию фазы, синхронную с последовательностью импульсов,



технически сложно реализовать. Особенно, если речь идет о частотах порядком в несколько гигагерц и, тем более, для терагерцовых несущих частот битовой последовательности. Ряд эффектов, которые были описаны на основе комплексного уравнения Гинзбурга–Ландау, требуют специального типа нелинейности, дисперсии или потерь.

В данной работе для управления солитонным взаимодействием предложено использовать среду с периодическим изменением дисперсии. В качестве такой среды может использоваться пассивное одномодовое оптическое волокно с периодическим изменением диаметра вдоль волокна [5]. Рассмотренные режимы могут быть реализованы при подборе всего лишь одного управляющего параметра, в качестве которого выступает период модуляции волокна.

### Нелинейное уравнение Шредингера с переменными коэффициентами

Остановимся на ряде приближений, которые используются в нашей модели. Отметим, что оптические волокна в той или иной степени обладают двулучепреломлением. Поэтому поляризация поля будет изменяться при распространении излучения вдоль волокна. В общем случае задача на распространение солитонов является векторной [1]. При использовании скалярного подхода ряд эффектов, связанных с поляризацией поля, теряется. Однако основные эффекты, связанные с взаимодействием солитонов, формированием бризеров, были описаны с использованием скалярного подхода.

Распространение оптического импульса в волокне подчиняется нелинейному уравнению Шредингера [1, 2]. Если диаметр волокна изменяется вдоль его длины, то показатель преломления становится зависящим от продольной координаты. В нашей задаче диаметр волокна изменяется достаточно медленно. На расстояниях порядка 100 м изменение диаметра не превышает 10% от среднего значения [5]. При адиабатическом изменении параметров можно ввести переменные коэффициенты дисперсии второго порядка  $\beta_2 = \beta_2(z)$  и керровской нелинейности  $\gamma = \gamma(z)$ . Нелинейное уравнение Шредингера принимает вид

$$\frac{\partial E}{\partial z} + i \frac{\beta_2(z)}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = i\gamma(z)|E|^2 E(z, t), \quad (1)$$

где  $E(z, t)$  – амплитуда основной моды волокна,  $z$  – длина распространения,  $t \rightarrow t - z/u$  – время в движущейся системе координат, связанной с началь-

ным импульсом,  $u$  – групповая скорость начального импульса,  $\gamma(z) = \langle \gamma \rangle (1 - 0.028 \sin(2\pi z/z_m))$  – коэффициент керровской нелинейности,  $\langle \gamma \rangle = 8.2 \text{Вт}^{-1} \text{км}^{-1}$ ,  $z_m$  – период модуляции,  $\beta_2(z) = \langle \beta_2 \rangle (1 + 0.2 \sin(2\pi z/z_m))$ ,  $\langle \beta_2 \rangle = -12.76 \text{пс}^2/\text{км}$ . Параметры  $\gamma(z)$ ,  $\beta_2(z)$  соответствуют волокну, использованному в экспериментах [5].

В расчетах использовался метод преобразования Фурье с контролем точности вычислений. Для подавления волн, отраженных от границ расчетного окна, использовались поглощающие граничные условия. Расчеты [5], проведенные по аналогичной схеме, показали хорошее согласие с экспериментальными данными.

Начальное поле задается в виде двух односолитонных импульсов:

$$E(0, t) = A \text{sech}(t/t_0 - T) + A \text{sech}(t/t_0 + T), \quad (2)$$

где  $A = t_0^{-1} \sqrt{|\langle \beta_2 \rangle| / \langle \gamma \rangle}$  – амплитуда односолитонного импульса,  $t_0$  – длительность начального импульса,  $T$  – безразмерный параметр, определяющий расстояние между пиками начальных импульсов.

Для описания результатов использовался метод обратной задачи рассеяния [4]. При отсутствии поглощения решению уравнения Шредингера (2) с постоянными коэффициентами дисперсии и нелинейности ( $z = \infty$ ) можно сопоставить солитонный спектр  $\lambda_j$ . Амплитуда солитона  $A_j$  и его групповая скорость  $v_j$  в движущейся системе координат связаны со спектральным параметром  $\lambda_j$  следующими соотношениями [1, 6]:

$$A_j = A 2 \text{Im}(\lambda_j), \quad 1/v_j = |\langle \beta_2 \rangle| t_0^{-1} 2 \text{Re}(\lambda_j). \quad (3)$$

Спектральные параметры  $\lambda_j$  соответствуют нулю одного из коэффициентов матрицы рассеяния  $a^*(\lambda_j) = 0$  [1]. Для двухсолитонного бризера ( $T = 0$ ) начальному полю (2) соответствуют мнимые параметры  $\lambda_1 = i0.5$  и  $\lambda_2 = i1.5$  [1]. Для двух отдельных импульсов ( $T \neq 0$ ) аналитическое решение найдено только при значительном расстоянии между импульсами ( $T \gg t_0$ ) [7]. В остальных случаях  $\lambda_j$  могут быть найдены численно [6].

### Взаимодействие солитонов с изменением групповых скоростей

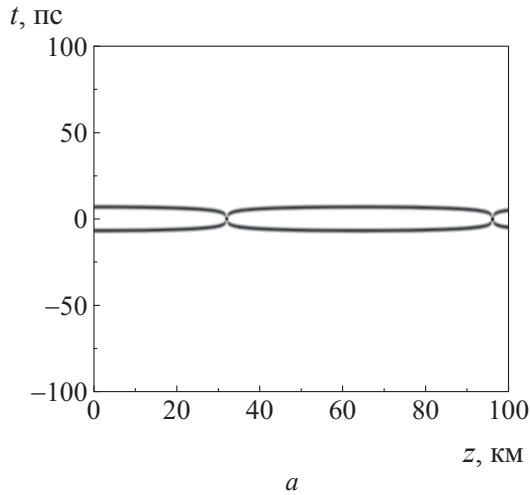
На рис. 1 показано распространение двух солитонов, распространяющихся в волокне без модуляции ( $z_m = \infty$ ). Синфазные солитоны (2) притягиваются и после столкновения расходятся (рис. 1, а). Спектральные параметры  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  остаются неизменными при распространении импульсов.





Их положение ( $\lambda_1 = i \times 0.49753$ ,  $\lambda_2 = i \times 0.502495$ ) определяется пересечением линий  $\text{Re}[a^*(\lambda)] = 0$  и  $\text{Im}[a^*(\lambda)] = 0$  (рис. 1, б). Расстояние, после прохождения которого солитоны сталкиваются, определяется соотношением [7]:

$$z_c = (\pi/2)t_0^2|\langle\beta_2\rangle|^{-1}(\lambda_1^2 - \lambda_2^2)^{-1}. \quad (4)$$



Период бризера будет равен  $2z_c$ . В нашем случае  $z_c = 31.7$  км (см. рис. 1, а). При увеличении расстояния  $T$  спектральные параметры  $\lambda_{1,2}$  стремятся к величине  $i0.5$ . Соответственно величина  $z_c$  стремится к бесконечности. Фактически это означает, что солитоны не взаимодействуют.

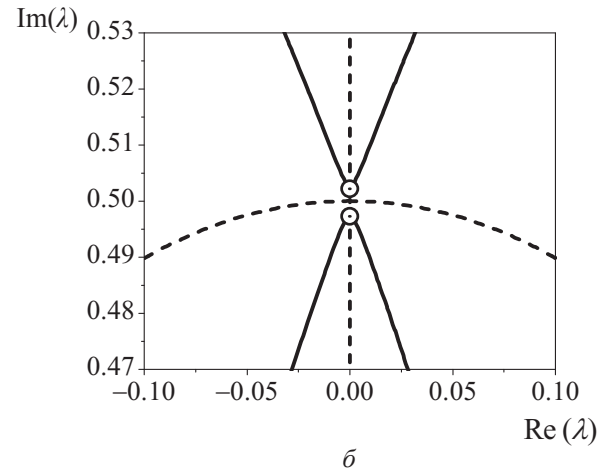


Рис. 1. Распространение двух синфазных солитонов в волокне с постоянной дисперсией ( $z_m = \infty$ ).  $t_0 = 1.13$  пс,  $T = 6$ : а – интенсивность  $|E(z,t)|^2$ , максимум интенсивности соответствует черному цвету; б – линии уровня  $\text{Re}[a^*(\lambda)] = 0$  (сплошная линия) и  $\text{Im}[a^*(\lambda)] = 0$  (пунктир) при  $z = 100$  км. Положение спектральных параметров  $\lambda_{1,2}$  отмечено кружками

В волокне с периодической модуляцией дисперсии характер взаимодействия солитонов изменяется. Типичным поведением двухсолитонного бризера является его разделение на два отдельных импульса (рис. 2). На начальном этапе исходные импульсы плавно притягиваются, затем следует момент резкого сближения. После объединения ( $z = 18.76$  км) солитоны отталкиваются и расходятся с разными групповыми скоростями. Солитоны приобретают разные по знаку, но одинаковые по модулю добавки к групповой скорости (рис. 2, а). Симметрия при разделении солитонов диктуется законом сохранения импульса [1]. Поведение отдельных солитонов удобно проследить на плоскости  $\text{Re}[a^*(\lambda)]$ ,  $\text{Im}[a^*(\lambda)]$  (рис. 2, б). При  $z = 0$  положение спектральных параметров  $\lambda_{1,2}$  отмечено кружками. В момент слияния импульсов  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  также объединяются. Затем они расходятся вдоль линии  $\text{Im}[a^*(\lambda)] = 0$  (см. рис. 2, б). Конечное положение ( $z = 100$  км) показано крупными черными точками (см. рис. 2, б). Как следует из (3), такое расположение  $\lambda_{1,2}$  соответствует двум солитонам с разными групповыми скоростями

и одинаковыми амплитудами. Изменение групповой скорости импульса связано со сдвигом его несущей частоты  $v_j = 1/(\langle\beta_2\rangle|\Delta\omega_j)$ , где  $\Delta\omega_j$  – величина сдвига частоты импульса. После изменения групповой скорости импульсов ( $z > 20$  км) амплитуда солитонов постепенно уменьшается. Такая особенность связана с излучением дисперсионной волны за счет периодического изменения дисперсии и нелинейности.

Разделение двухсолитонного бризера на два отдельных солитона наблюдается в широком диапазоне параметров. Изменение периода модуляции  $z_m$  приводит к изменению расстояния, на котором происходит столкновение солитонов, изменяются их групповые скорости. При определенных значениях  $z_m$  можно добиться такого режима, при котором солитоны распространяются практически без взаимного притяжения (рис. 2, в). За счет излучения дисперсионной волны амплитуда солитонов постепенно уменьшается (рис. 2, г), а длительность возрастает. При этом групповые скорости солитонов остаются неизменными ( $\text{Re}(\lambda) = 0$ ).

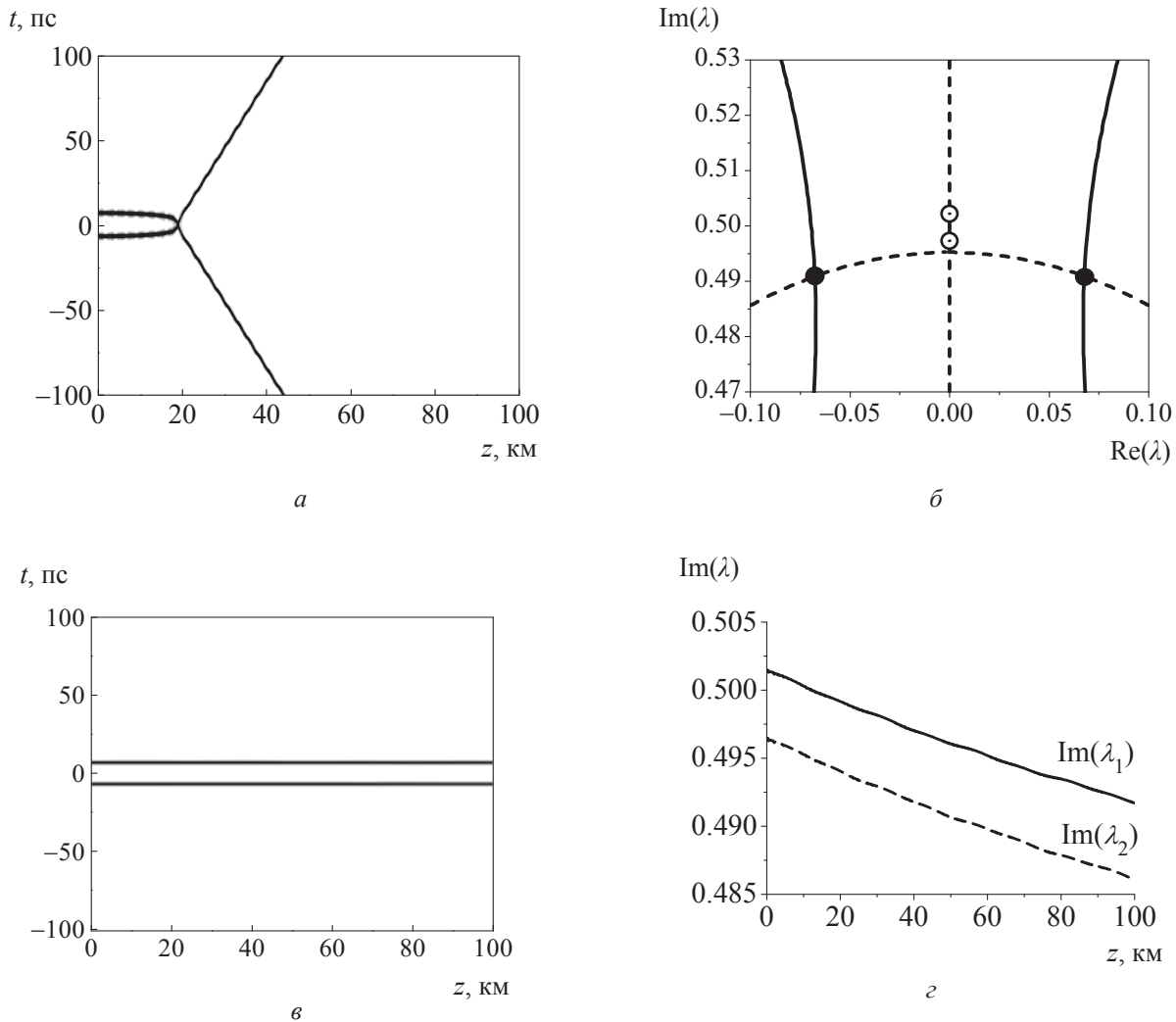


Рис. 2. Распространение двух синфазных солитонов в волокне с периодическим изменением дисперсии:  $a, б - z_m = 2.4$  км;  $в - z_m = 0.1$  км;  $a, в -$  интенсивность  $I = |E(z, t)|^2$ ;  $б -$  линии уровня  $\text{Re}[a^*(\lambda)] = 0$  (сплошная линия) и  $\text{Im}[a^*(\lambda)] = 0$  (пунктир) при  $z = 100$  км;  $г -$  мнимая часть спектрального параметра для первого и второго солитонов, показанных на рис. 2, в. Остальные параметры см. рис. 1

### Преобразование солитонных импульсов в составном волокне

Рассмотрим распространение солитонной пары в составном волокне. Первая часть волокна характеризуется периодическим изменением дисперсии, вторая часть имеет постоянную дисперсию ( $z_m = \infty$ ). На рис. 3 расстояние между пиками исходных импульсов равно четырем длительностям импульса (4.52 пс). Для первоначальных импульсов спектральные параметры  $\lambda_1 = i \cdot 0.445$  и  $\lambda_2 = i \cdot 0.707$ . В соответствии с (9) полупериод такого бризера будет равен  $z_c = 0.52$  км. По мере распространения импульсов в волокне с периодической модуляцией (рис. 3, а) параметры  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  перемещаются навстречу друг другу вдоль оси  $\text{Re}(\lambda) = 0$  (рис. 3,

б). Положение  $\lambda_{1,2}$  при  $z = 3$  км отмечено крупными точками (см. рис. 3, б). До столкновения солитонов их групповые скорости не меняются (8), изменяются только амплитуды. В момент столкновения решения  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  сливаются, а затем быстро расходятся вдоль линии  $\text{Im}[a^*(\lambda)] = 0$ . На рис. 3, б направление движения корней  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  показано стрелками. При  $z = 3$  км параметры  $\lambda_1 = i \cdot 0.543$ ,  $\lambda_2 = i \cdot 0.584$ . Данное состояние соответствует полупериоду бризера  $z_c = 6.8$  км. Это состояние можно «зафиксировать», используя составное волокно. При  $z < 3$  км (см. рис. 3, в) поле распространяется в волокне с периодическим изменением дисперсии. Для  $z \geq 3$  км импульсы распространяются в волокне с постоянным значением дисперсии и нелиней-

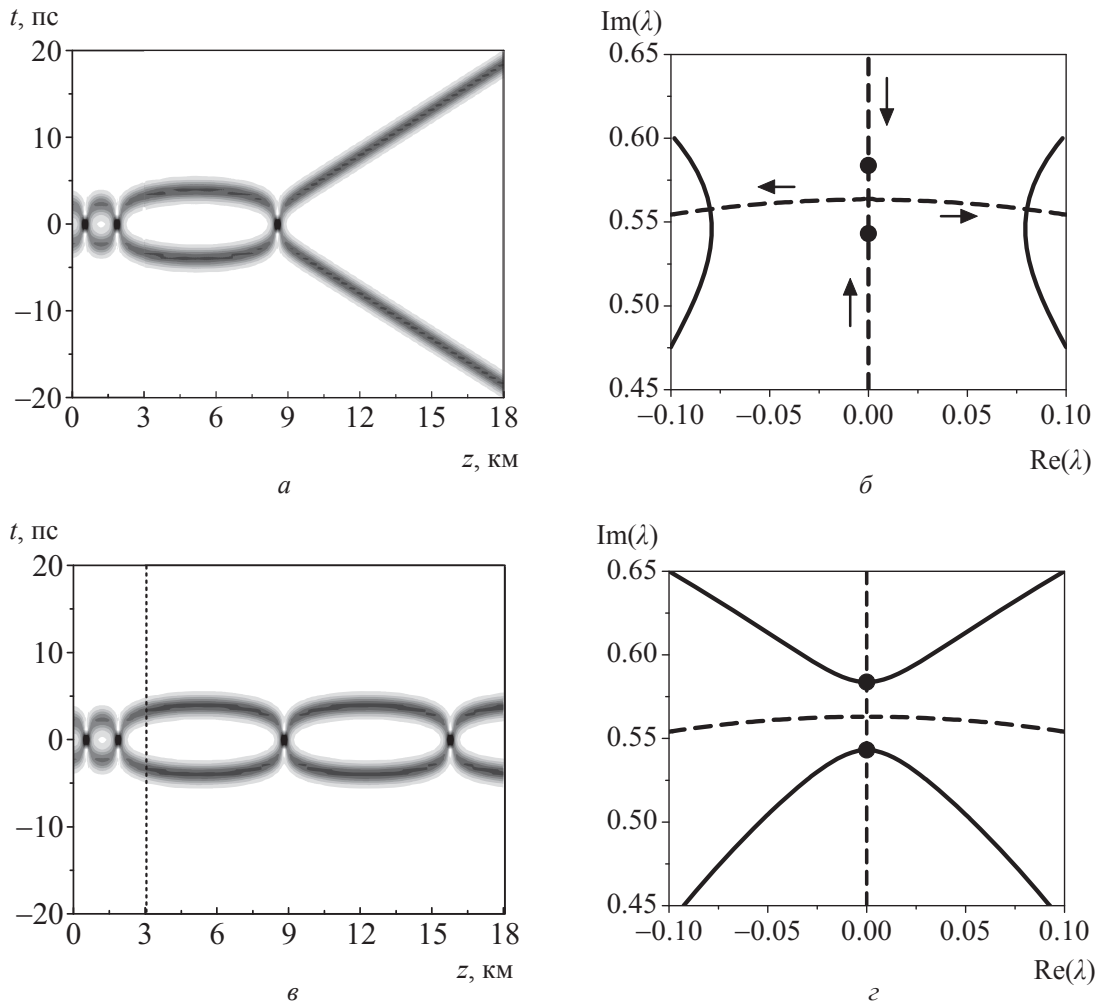


Рис. 3. Распространение двух близкорасположенных солитонов ( $T = 2$ ):  $a, б$  – в волокне с периодическим изменением дисперсии ( $z_m = 64$  м);  $в, г$  – в составном волокне: при  $z < 3$  период  $z_m = 0.064$  км, при  $z \geq 3$  (после вертикального пунктира на рисунке  $в$ )  $z_m = \infty$ ; для начальных импульсов  $T = 2$ . Линии уровня  $\text{Re}[a^*(\lambda)] = 0$  (сплошная) и  $\text{Im}[a^*(\lambda)] = 0$  (пунктир) показаны для  $z = 18$  км ( $б$ ) и  $z = 3$  км ( $г$ ). Остальные параметры и обозначения см. рис. 1

ности ( $z_m = \infty$ ). Используя такую конструкцию, получаем бризер с увеличенным периодом  $z_c = 6.8$  км. Положение спектральных параметров  $\lambda_{1,2}$  показано для  $z = 3$  км (рис. 3,  $г$ ). При дальнейшем распространении импульса в оптическом волокне с постоянными параметрами величины  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  не изменяются.

### Выводы

Периодическое изменение коэффициентов нелинейного уравнения Шредингера может приводить к неупругому взаимодействию солитонов. Данный эффект можно использовать для управления солитонным взаимодействием в оптических линиях связи. При использовании оптических солитонов для передачи информации наличие притяжения между синфазными соли-

тонами может приводить к потере данных. Для предотвращения столкновения солитонов можно использовать два подхода, основанных на применении волокна с периодическим изменением дисперсии. В одном варианте используется режим, когда импульсы распространяются на фиксированном расстоянии друг от друга, т. е. фактически без взаимного притяжения. В другом варианте солитонная пара разделяется на два импульса с различной несущей частотой. В этом случае передача информации может вестись параллельно на двух частотных диапазонах. Для солитонов, распространяющихся на небольшом расстоянии друг от друга, волокно с периодическим изменением дисперсии можно использовать для увеличения дистанции, на которой происходит столкновение солитонов.



## Список литературы

1. *Ахмедиев Н. Н., Анкевич А.* Солитоны. Нелинейные импульсы и пучки. М.: Физматлит, 2003. 304 с.
2. *Binh L. N.* Optical multi-bound solitons. USA, Kentucky: CRC Press, 2015. 567 p.
3. *Soto-Crespo J. M., Grelu Ph., Akhmediev N., Devine N.* Soliton complexes in dissipative systems: Vibrating, shaking, and mixed soliton pairs // *Phys. Rev. E.* 2007. Vol. 75. P. 016613.
4. *Chang W., Akhmediev N., Wabnitz S.* Effect of an external periodic potential on pairs of dissipative solitons // *Phys. Rev. A.* 2009. Vol. 80. P. 013815.
5. *Sysoliatin A. A., Dianov E. M., Konyukhov A. I., Melnikov L. A., Stasyuk V. A.* Soliton splitting in a dispersion-oscillating fiber // *Laser Physics.* 2007. Vol. 17, № 11. P. 1306–1310.
6. *Выслоух В. А., Чередни И. В.* Многосолитонные составяющие решений нелинейного уравнения Шредингера с возмущающим членом // *Теоретическая и математическая физика.* 1987. Т. 71. С. 13–20.
7. *Konyukhov A. I., Dorokhova M. A., Melnikov L. A., Plastun A. S.* Inelastic collision and fusion of optical solitons in dispersion oscillating fiber // *Laser Physics Lett.* 2015. Vol. 12, № 5. P. 1–5.

# РАДИОФИЗИКА, ЭЛЕКТРОНИКА, АКУСТИКА

УДК 621.372.2: 620.179

## ВОЛНОВОДНО-ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ РЕЗОНАНС В СИСТЕМЕ С НАНОМЕТРОВЫМ МЕТАЛЛИЧЕСКИМ СЛОЕМ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПОДЛОЖКЕ

**Д. А. Усанов, А. В. Скрипаль, Д. В. Пономарев,  
Е. В. Латышева, В. Б. Феклистов**

Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского  
E-mail: Usanovda@info.sgu.ru

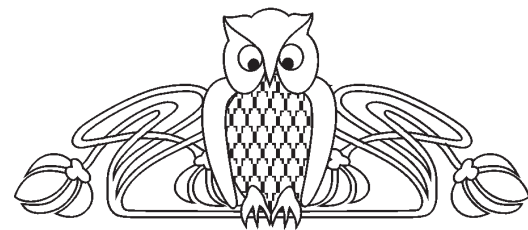
Установлена высокая чувствительность частотных зависимостей коэффициента прохождения электромагнитной волны к изменению толщин нанометровых металлических слоев, нанесенных на диэлектрические пластины, в случае возникновения волноводно-диэлектрического резонанса при частичном заполнении структурой поперечного сечения волновода по ширине и асимметричном размещении относительно его середины. Обоснован теоретически и экспериментально СВЧ-метод измерения толщины металлических пленок в слоистых металлодиэлектрических структурах, частично заполняющих поперечное сечение волновода.

**Ключевые слова:** волноводно-диэлектрический резонанс, металлодиэлектрические структуры, нанометровые металлические слои, измерение толщины на СВЧ.

### Waveguide-dielectric Resonance in Systems with Nanometer Metal Layer on Dielectric Substrate

**D. A. Usanov, A. V. Skripal, D. V. Ponomarev,  
E. V. Latysheva, V. B. Feklistov**

High sensitivity of an electromagnetic wave transmission spectra to change the thickness of the nanometer metal layers on dielectric plates in the case of the waveguide-dielectric resonance emergence due to the waveguide cross section is partially filled across the width



and asymmetrically occupied relative to its middle by the investigated structure has been established. The microwave method of measurements the metal films thickness in the layered metal-dielectric structures which are partially filling the cross section of the waveguide has been theoretically and experimentally justified.

**Key words:** waveguide-dielectric resonance, metal-dielectric structures, nanometer metal layers, microwave measurements of thickness.

DOI: 10.18500/1817-3020-2016-16-2-86-90

### Введение

Для определения параметров материалов и структур, включающих нанометровые металлические слои, используемых при создании приборов полупроводниковой СВЧ-электроники, наиболее предпочтительными являются СВЧ-методы измерений [1–5].

С целью повышения чувствительности таких методов используются СВЧ-схемы, в которых частотная зависимость спектров отражения и прохождения для измеряемых слоистых структур резко изменяется при вариации параметров входящих в их состав слоев [6–10].





Одним из таких методов является метод, основанный на использовании одномерных волноводных СВЧ фотонных кристаллов с нарушением периодичности. В фотонной запрещенной зоне такого кристалла может проявляться резонансная особенность [11], называемая примесной модой колебаний [12] и обладающая высокой чувствительностью к параметрам нарушения.

Авторы [7–10] предложили использовать в качестве такого нарушения металлодиэлектрические или полупроводниковые структуры и определять их параметры по частотным зависимостям коэффициентов прохождения и отражения электромагнитного излучения в окрестности резонансной особенности.

Однако добротность примесной моды колебаний может оказаться недостаточной для достижения высокой чувствительности частотных зависимостей коэффициентов прохождения и отражения электромагнитного излучения к вариации параметров металлодиэлектрических структур при измерении сверхтонких слоев с толщинами, составляющими единицы нанометров.

В работе [13] описана возможность использования волноводно-диэлектрического резонанса для определения электропроводности полупроводникового образца толщиной 10 мкм и более по изменению его резонансной частоты и добротности. Задача по исследованию возможности измерения параметров нанометровых металлических слоев на диэлектрической подложке авторами [13] не решалась.

В представленной работе рассмотрена возможность использования волноводно-диэлектрического резонанса для реализации высокочувствительного СВЧ-метода измерения параметров нанометрового металлического слоя, нанесенного на диэлектрическую подложку.

### Модель волновода с металлодиэлектрической структурой

Исследовалось взаимодействие электромагнитного излучения трехсантиметрового диапазона длин волн с образцом, представляющим собой двухслойную структуру, состоящую из пластины поликора ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ,  $\varepsilon=9.6$ ) размером  $10 \times 10 \times 1$  мм с нанесенным нанометровым металлическим слоем ( $\text{TaAlN}$ ) толщиной  $t$  (рис. 1).

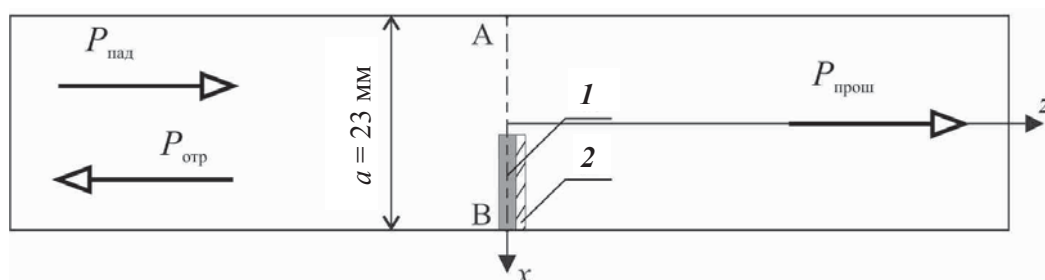


Рис. 1. Расположение исследуемой структуры в волноводе: 1 –  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , 2 –  $\text{TaAlN}$ .  $P_{\text{пад}}$  – падающая мощность,  $P_{\text{прош}}$  – прошедшая мощность,  $P_{\text{отр}}$  – отраженная мощность

Исследуемая структура размещалась асимметрично относительно середины волновода сечением  $23 \times 10$  мм, полностью заполняя его по высоте и частично по ширине.

Компьютерное моделирование амплитудно-частотных характеристик (АЧХ) исследуемой структуры было проведено при помощи системы электродинамического моделирования и проектирования HFSS.

При частичном заполнении исследуемой структурой поперечного сечения волновода возникает волноводно-диэлектрический резонанс, проявляющийся в резком ослаблении на резонансной частоте прошедшей волны и увеличении амплитуды отраженной.

Геометрические размеры и электрофизические параметры диэлектрической пластины и сте-

пень заполнения образцом поперечного сечения волновода подбирались таким образом, чтобы пик ослабления располагался в трехсантиметровом диапазоне длин волн.

Результаты расчета частотных зависимостей квадратов модулей коэффициентов прохождения электромагнитного излучения ( $|D|^2$ ), взаимодействующего с металлодиэлектрической структурой при различных значениях толщины  $t$  нанометровой металлической пленки, представлены на рис. 2.

Как следует из результатов расчета, при частичном заполнении поперечного сечения волновода пластиной поликора без металлической пленки частотная зависимость коэффициента прохождения характеризуется наличием пика ослабления на частоте 11.6 ГГц, величина которого составляет  $-26.7$  дБ.

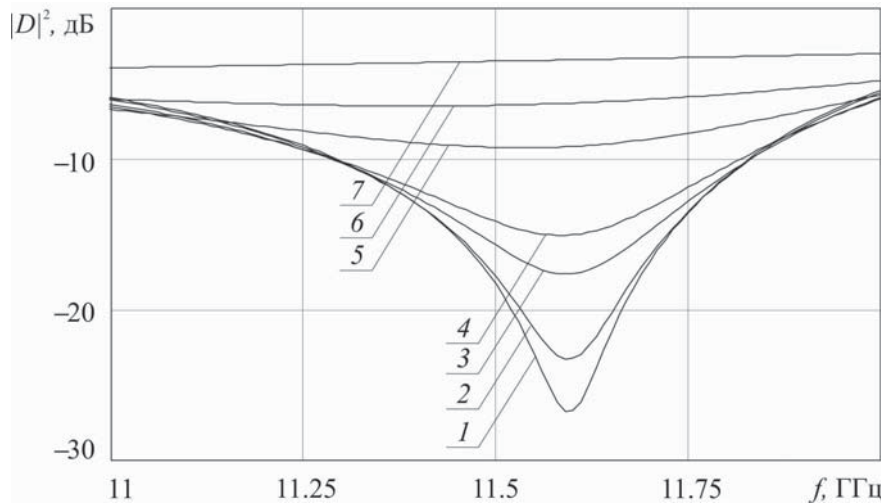


Рис. 2. Расчетные частотные зависимости квадратов модулей коэффициентов прохождения электромагнитного излучения, взаимодействующего с металлодиэлектрической структурой: 1 – пластина поликора без металлической пленки, 2 –  $t=1$  нм, 3 –  $t=3$  нм, 4 –  $t=4$  нм, 5 –  $t=7$  нм, 6 –  $t=13.5$  нм, 7 –  $t=40$  нм

Результаты расчета распределения напряженности электромагнитного поля на частоте, соответствующей пику ослабления, в поперечном сечении волновода вдоль линии АВ представлены на рис. 3. Область, занимаемая исследуемой структурой вдоль этой линии, заштрихована.

Как следует из результатов расчета на частоте, соответствующей пику ослабления, в поперечном сечении волновода возникает распределение поля (см. рис. 3), соответствующее стоячей волне с двумя пучностями (преимущественному возбуждению в волноводе волны  $H_{20}$ ).

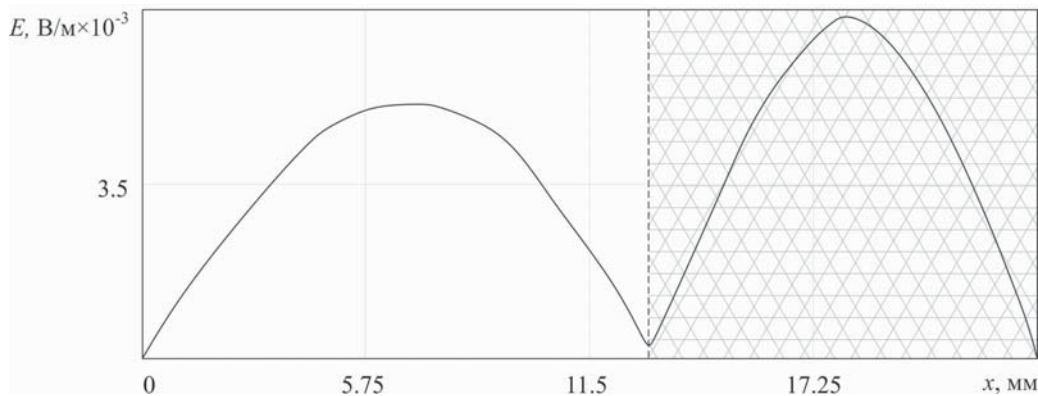


Рис. 3. Распределение напряженности электрического поля  $E$  электромагнитной волны на частоте 11.6 ГГц в поперечном сечении волновода вдоль линии АВ

Нанесение тонкой металлической пленки оказывает влияние на величину ослабления, вносимого образцом на резонансной частоте.

При нанесении металлической пленки толщиной более 7.0 нм на частотной зависимости коэффициента пропускания резонансная особенность исчезает.

На рис. 4 представлены расчетные зависимости квадратов модулей коэффициента прохождения от толщины металлической пленки на частоте  $f=11.6$  ГГц, соответствующей пику ослабления

в отсутствие металлического слоя. На указанной частоте увеличение толщины металлического слоя от 0 до 1 нм приводит к изменению величины коэффициента прохождения от  $-26.7$  до  $-23.3$  дБ. В этом диапазоне толщин расчетная чувствительность  $d(|D|^2)/dt$  достигает 3.4 дБ/нм.

#### Экспериментальные исследования

Измерения частотных зависимостей квадратов модулей коэффициентов прохождения  $|D|^2(f)$  электромагнитного излучения, взаимодействующего

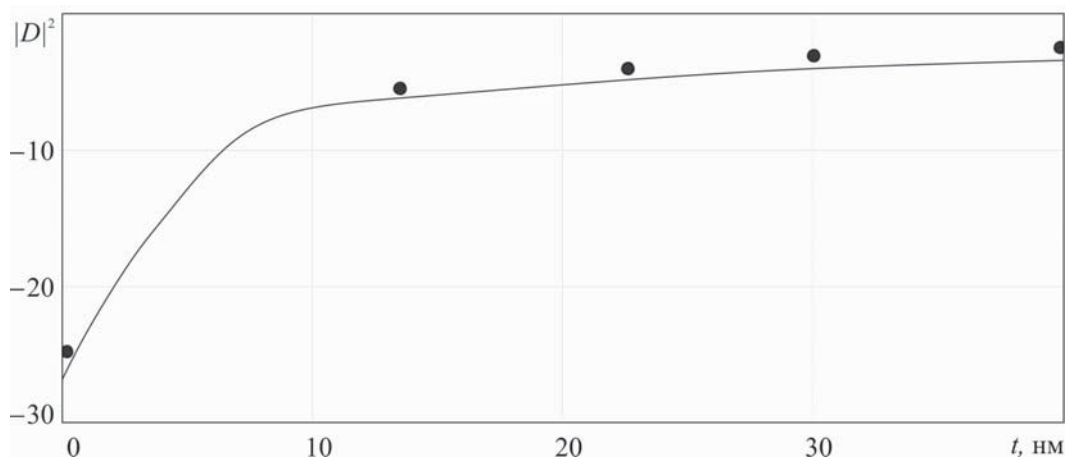


Рис. 4. Расчетная (линия) и экспериментальная (точки) зависимости квадрата модуля коэффициента прохождения электромагнитного излучения, взаимодействующего с металлодиэлектрической структурой, от толщины металлической пленки на фиксированной частоте  $f = 11.6$  ГГц

ющего с металлодиэлектрической структурой, расположенной асимметрично относительно середины волновода, полностью заполняя его по высоте и частично по ширине, проводились с помощью векторного анализатора цепей Agilent PNA N5230A (США, Agilent).

Толщины металлических слоев (TaAlN), нанесенных на поликоровые подложки, были измерены с помощью атомно-силового микроскопа Agilent 5600LS AFM (США, Agilent).

Экспериментальные значения  $|D|^2$  на фиксированной частоте  $f = 11.6$  ГГц при геометрических размерах и электрофизических параметрах металлодиэлектрической структуры, соответствующих используемым при численном моделировании, представлены на рис. 4.

Следует отметить хорошее количественное совпадение результатов расчета с экспериментальными данными. Некоторое расхождение между расчетными и экспериментальными данными может быть обусловлено пренебрежением конечной проводимостью стенок волновода и неконтролируемой неоднородностью геометрических и электрофизических параметров используемых структур.

Полученные расчетные и экспериментальные данные свидетельствуют о возможности использования волноводно-диэлектрического резонанса для измерения параметров нанометровых металлических слоев, нанесенных на диэлектрическую подложку, при частичном заполнении исследуемой металлодиэлектрической структурой поперечного сечения волновода.

Для определения электрофизических параметров материалов и структур СВЧ-методом

измерения нанометровых металлических слоев, основанным на использовании СВЧ фотонных кристаллов с нарушением периодичности, в качестве которого выступает измеряемая структура, авторами [7–10] используется один из способов решения обратной задачи. Величина чувствительности  $d(|D|^2)/dt$  для одномерного волноводного фотонного кристалла, содержащего нарушение в виде металлодиэлектрических структур с приведенными выше геометрическими размерами и электрофизическими параметрами, составляет  $\sim 0.4$  дБ/нм. Таким образом теоретически обоснованная чувствительность коэффициента прохождения к вариации толщины в предложенном в настоящей работе методе в несколько раз превышает чувствительность метода на основе использования СВЧ фотонных кристаллов. В то же время решение обратной задачи для определения параметров металлодиэлектрической структуры, частично заполняющей поперечное сечение волновода, связано с необходимостью использования ЭВМ при решении прямой задачи. Возникающая погрешность при реализации численных методов с помощью ЭВМ еще и при решении обратной задачи приводит к ограничению области параметров нанослоев металла, которые могут быть определены данным методом.

С целью повышения чувствительности СВЧ-методов измерения сверхтонких нанометровых проводящих пленок возможно использование волноводно-диэлектрического резонанса, обладающего большей величиной добротности и реализующегося при размещении исследуемой структуры перпендикулярно широким и под углом к узким стенкам волновода.



### Заключение

Таким образом, в настоящей работе исследованы особенности волноводно-диэлектрического резонанса, возникающего в результате частичного заполнения исследуемой металлодиэлектрической структурой поперечного сечения волновода по ширине и асимметричного размещения относительно его середины.

Обоснована теоретически и установлена экспериментально высокая чувствительность коэффициента прохождения электромагнитной волны к изменению толщины сверхтонкого нанометрового металлического слоя, входящего в состав металлодиэлектрической структуры.

Показана возможность использования волноводно-диэлектрического резонанса для разработки методов измерения параметров нанометровых металлических слоев, нанесенных на диэлектрическую подложку, при частичном заполнении исследуемой структурой поперечного сечения волновода.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (государственное задание № 1376 и 1575) и стипендии Президента РФ (СП-2622.2015.3).*

### Список литературы

1. Гершензон Е. М., Литвак-Горская Л. Б., Плохова Л. А., Зарубина Т. С. Методы определения параметров полупроводников и полупроводниковых пленок на СВЧ // Полупроводниковые приборы и их применение / под ред. Е. А. Федотова. М. : Сов. радио, 1970. Вып. 23. С. 3–48.
2. Усанов Д. А. СВЧ-методы измерения параметров полупроводников. Саратов : Изд-во Саратов. ун-та, 1985. 55 с.
3. Арапов Ю. Г., Давыдов А. Б. Волноводные методы измерения электрофизических параметров полупроводников на СВЧ // Дефектоскопия. 1978. № 11. С. 63–87.
4. Asfar M. N., Birch J. R., Clarke R. N. The Measurement of the Properties of Materials // Proc. IEEE. 1986. Vol. 74, № 1. P. 183–199.
5. Усанов Д. А., Горбатов С. С. Эффекты ближнего поля в электродинамических системах с неоднородностями и их использование в технике СВЧ. Саратов : Изд-во Саратов. ун-та, 2011. 392 с.
6. Усанов Д. А., Скрипаль А. В., Абрамов А. В., Боголюбов А. С. Измерения толщины нанометровых слоев металла и электропроводности полупроводника в структурах металл–полупроводник по спектрам отражения и прохождения электромагнитного излучения // ЖТФ. 2006. Т. 76, вып. 5. С. 112–117.
7. Dmitry Usanov, Alexander Skripal, Anton Abramov, Anton Bogolubov, Vladimir Skvortsov, Merdan Merdanov. Measurement of the Metal Nanometer Layer Parameters on Dielectric Substrates using Photonic Crystals based on the Waveguide Structures with Controlled Irregularity in the Microwave Band // Proc. of 37rd European Microwave Conference. Munich, Germany, 2007. P. 198–201.
8. Никитов С. А., Гуляев Ю. В., Усанов Д. А., Скрипаль А. В., Пономарев Д. В. Определение проводимости и толщины полупроводниковых пластин и нанометровых слоев с использованием одномерных СВЧ фотонных кристаллов // Докл. Академии наук. 2013. Т. 448, № 1. С. 35–37.
9. Усанов Д. А., Никитов С. А., Скрипаль А. В., Пономарев Д. В., Латышева Е. В. Многопараметровые измерения эпитаксиальных полупроводниковых структур с использованием одномерных сверхвысокочастотных фотонных кристаллов // Радиотехника и электроника. 2016. Т. 61, № 1. С. 45–53.
10. Усанов Д. А., Мерданов М. К., Скрипаль А. В., Пономарев Д. В. СВЧ фотонные кристаллы. Новые сферы применения // Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика. 2015. Т. 15, вып. 1. С. 57–73.
11. Yablonovitch E., Gmitter T. J., Meade R. D., Rappe A. M., Brommer K. D., Joannopoulos J. D. Donor and acceptor modes in photonic band structure // Phys. Rev. Lett. 1991, Dec. Vol. 67, № 24. P. 3380.
12. Belyaev B. A., Voloshin A. S., Shabanov V. F. Study of Q-factor of impurity mode resonance in microstrip model of 1D-photonic crystal // Doklady Physics (Doklady Akademii Nauk). 2005. Vol. 403, № 3. P. 319.
13. Занин В. И., Усанов Д. А., Феклистов В. Б. Определение электрофизических параметров полупроводника волноводным резонансным методом // Электродинамика слоисто-неоднородных структур СВЧ : межвуз. сб. науч. ст. Самара : Самар. ун-т, 1995. С. 88–99.

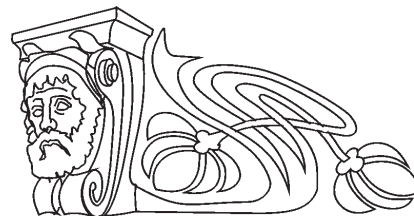




## БИОФИЗИКА И МЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА

УДК 535.361.22:577.3

### ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЭТАНОЛА НА ТРАНСЭПИДЕРМАЛЬНЫЙ ТРАНСПОРТ ИНДОЦИАНИНОВОГО ЗЕЛЁНОГО С ПОМОЩЬЮ СПЕКТРОСКОПИИ ОБРАТНОГО РАССЕЯНИЯ



Э. А. Генина<sup>1,2</sup>, А. Н. Башкатов<sup>1,2</sup>, В. В. Тучин<sup>1-3</sup>

<sup>1</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского

<sup>2</sup>Томский государственный университет

<sup>3</sup>Институт проблем точной механики и управления РАН, Саратов  
E-mail: eagenina@yandex.ru

В работе исследовано влияние 40%-ного водного раствора этанола на трансэпидермальный транспорт фотодинамического красителя индоцианинового зелёного с помощью спектроскопии обратного рассеяния. Впервые получено значение коэффициента диффузии красителя через роговой слой *ex vivo* при использовании этанола в качестве усилителя диффузии:  $(6.85 \pm 3.75) \times 10^{-7} \text{ см}^2/\text{с}$ .

**Ключевые слова:** индоцианиновый зелёный, роговой слой эпидермиса, коэффициент диффузии, спектроскопия обратного рассеяния.

#### Study of Ethanol Impact on the Transepidermal Transport of Indocyanine Green with Backscattering Spectroscopy

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

In the work, impact of aqueous 40%-ethanol solution on the transepidermal transport of photodynamic dye indocyanine green has been studied with backscattering spectroscopy. It has been first obtained the value of the dye diffusion coefficient through the stratum corneum *ex vivo* at the use of ethanol as a diffusion enhancer:  $(6.85 \pm 3.75) \times 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$ .

**Key words:** indocyanine green, epidermal stratum corneum, diffusion coefficient, backscattering spectroscopy.

DOI: 10.18500/1817-3020-2016-16-2-91-96

#### Введение

Трансэпидермальный молекулярный транспорт имеет долгую историю и до сих пор вызывает большой интерес в связи с развитием методов местной доставки лекарственных препаратов. Внутренние пути и механизмы проникновения воды, оптических просветляющих агентов, фотодинамических красителей и различных лекарств через эпидермальный слой кожи активно исследуются многими научными группами

[1–7]. Серьёзной проблемой является улучшение молекулярного транспорта через роговой слой эпидермиса, который является естественным барьером, препятствующим диффузии агентов в подлежащие слои кожи [8, 9]. В настоящее время предложено большое количество как химических, так и физических методов усиления проницаемости рогового слоя эпидермиса. Например, в качестве химических усилителей диффузии оптических просветляющих агентов предложены азон [10], олеиновая кислота [11], диметилсульфоксид (ДМСО) [12, 13], этанол [14, 15], пропиленгликоль [8, 16], тиазон [17], жидкий парафин [18] и некоторые другие [19, 20].

Несмотря на большое количество работ, посвящённых исследованию влияния химических усилителей диффузии на чрескожный молекулярный транспорт, проблема эффективной доставки биосовместимых красителей в кожу остаётся по-прежнему актуальной.

Одним из широко используемых красителей как в диагностике (в основном ангиографии) [21], так и фотодинамической и фототермической терапии [22, 23] является индоцианиновый зелёный (ИЗ). ИЗ (4,5-бензоиндотрикарбоцианин) представляет собой трикарбоцианиновый краситель. Химическая формула ИЗ –  $\text{C}_{43}\text{H}_{47}\text{N}_2\text{O}_6\text{S}_2\text{Na}_2$ , молекулярный вес – 775. Краситель является водорастворимым анионным фотосенсибилизатором [24]. В красной и ближней инфракрасной областях спектра ИЗ имеет две полосы поглощения, коротковолновая (~690–730 нм) соответствует поглощению димера, а длинноволновая (~770–790 нм) – поглощению мономера красителя. Увеличение скорости диффузии красителя в кожу при его местном нанесении является важной задачей при разработке методов эффективного лечения некоторых дерматологических заболеваний, в частности акне (*acne vulgaris*).



Целью работы является исследование влияния 40%-ного раствора этилового спирта на транспорт индоцианинового зелёного через эпидермальный слой кожи.

### 1. Материалы и методы

Для исследований использовался ИЗ (Aldrich Chemical Co., США), растворённый в дистиллированной воде и 40%-ном водном растворе этилового спирта. Концентрация ИЗ в растворах составляла 1 мг/мл.

Материалом для исследования диффузии ИЗ в биоткани послужили 10 образцов кожи белых аутбредных лабораторных крыс, полученные посредством аутопсии. Все измерения проводились

при комнатной температуре ( $\sim 20^\circ\text{C}$ ). Перед проведением эксперимента подкожный жировой слой и шерсть тщательно удалялись. Размер образцов составлял  $\sim 3 \times 3 \text{ см}^2$ , толщина –  $0.87 \pm 0.04 \text{ мм}$ .

Измерения коэффициента отражения проводились с помощью оптического многоканального анализатора LESA-5 («Биоспек», Россия). На отверстии цилиндрической кюветы, предварительно заполненной исследуемым раствором, закреплялся образец кожи. Кювета закреплялась в лабораторном штативе горизонтально так, чтобы раствор соприкасался с поверхностью образца, как показано на рис. 1. Волоконно-оптический датчик прибора, в свою очередь, закреплялся на противоположной поверхности исследуемого образца.

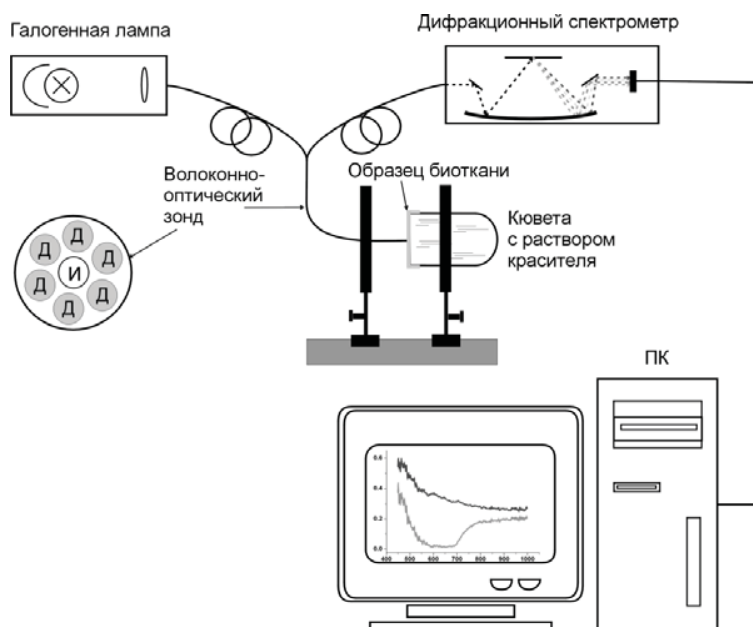


Рис. 1. Схема экспериментальной установки: Д – волокно-детектор, И – волокно-источник

Образец располагался таким образом, чтобы проникновение красителя происходило со стороны эпидермиса, а регистрация спектров обратного рассеяния осуществлялась со стороны дермы. Во избежание дегидратации образца кожи в процессе эксперимента он покрывался с внешней стороны парафиновой пленкой (Parafilm «М», American National Con, Chicago, IL, USA) за исключением участка, контактирующего с волоконно-оптическим датчиком.

Волоконно-оптический датчик («Биоспек», Россия) состоял из 7 волокон, центральное волокно (И) служило для транспорта излучения в биоткань, а шесть других, симметрично располо-

женных по окружности (Д) вокруг центрального волокна, – для сбора излучения, обратно рассеянного образцом биоткани. Диаметр каждого волокна составлял 200 мкм, расстояние между центрами излучающего и приемных волокон – 290 мкм. Источником излучения в спектральном диапазоне от 450 до 1000 нм служила галогенная лампа. Время накопления сигнала составляло 100 мс. Нормировка спектров перед началом измерений проводилась на сигнал от эталонного отражателя  $\text{BaSO}_4$  («Ocean Optics», США).

Измерение коэффициента обратного рассеяния (диффузного отражения) кожи производилось в течение 4–8 часов до прекращения



изменения интенсивности отражённого сигнала. По измеренным спектрам диффузного отражения рассчитывались спектры эффективной оптической плотности (ЭОП) с помощью соотношения [25]:

$$A(\lambda) = \ln(R(\lambda)), \quad (1)$$

где  $A(\lambda)$  – эффективная оптическая плотность (ЭОП) кожи,  $R(\lambda)$  – зависящий от времени экспериментально измеренный коэффициент отражения,  $\lambda$  – длина волны, нм.

С учетом уравнения (1) ЭОП образца кожи, измеренная в различные моменты времени при проникновении красителя в биоткань, определялась следующим образом [26, 27]:

$$A(t, \lambda) = A(t=0, \lambda) + \Delta\mu_a(t, \lambda)L, \quad (2)$$

где  $t$  – время,  $\lambda$  – длина волны,  $\Delta\mu_a(t, \lambda) = \varepsilon(\lambda)C(t)$  – разность между коэффициентами поглощения биоткани в каждый момент времени и в начальный момент времени (фактически определяет коэффициент поглощения красителя внутри биоткани),  $\varepsilon(\lambda)$  – молярный коэффициент поглощения красителя,  $C(t)$  – концентрация красителя в биоткани,  $A(t=0, \lambda)$  – ЭОП образца, измеренная в начальный момент времени до его окрашивания и  $L$  – эффективная длина пути регистрируемых фотонов зависит как от поглощающих, так и от рассеивающих характеристик среды, а также от расстояния между источником и детектором. Поскольку в данной работе расстояние источник–детектор составляло 290 мкм, что соизмеримо с транспортной длиной свободного пробега фотонов, величина  $L$  определяется в основном рассеивающими свойствами слизистой оболочки [28].

Уравнение (2) можно переписать следующим образом:

$$\Delta A(t, \lambda) = A(t, \lambda) - A(t=0, \lambda) = \Delta\mu_a(t, \lambda)L. \quad (3)$$

Кинетика изменения значения  $\Delta A(t, \lambda)$  позволяет определить коэффициент диффузии красителя в биоткани. Более подробно методика определения коэффициента диффузии описана в работах [26, 27].

## 2. Результаты и их обсуждение

На рис. 2 представлены спектры оптической плотности водного раствора ИЗ (правая ось), рассчитанной исходя из измеренного спектра коллимированного пропускания  $T(\lambda)$  раствора с помощью выражения  $A(\lambda) = -\ln(T(\lambda))$ , и ЭОП кожи в процессе взаимодействия водного раствора ИЗ с эпидермисом (левая ось). Хорошо видно, что спектр раствора красителя в исследуемом диапазоне имеет две хорошо выраженные по-

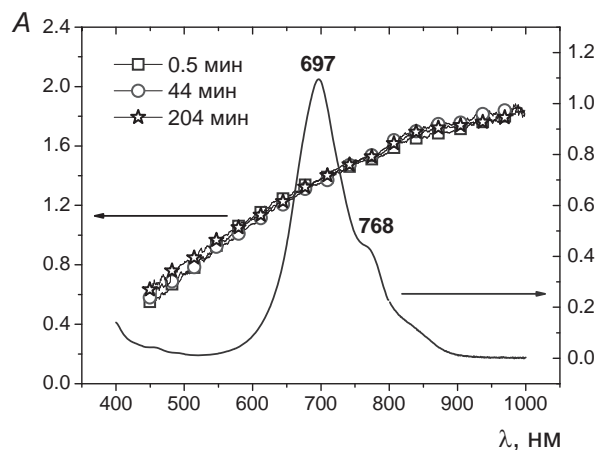


Рис. 2. Спектры оптической плотности водного раствора индоцианинового зелёного с концентрацией 1 мг/мл (правая ось) и эффективной оптической плотности кожи через различные временные интервалы после начала её взаимодействия с данным раствором со стороны эпидермиса (левая ось)

лосы, определяемые поглощением мономерной (768 нм) и димерной (697 нм) формами ИЗ. В водном растворе при данной концентрации красителя значительно преобладает димерная форма.

Диффузия красителя в ткань должна вызывать изменение формы спектра диффузного отражения ткани, выражающееся в появлении полос поглощения красителя на фоне спектра ЭОП кожи. По данным работы [29], в процессе диффузии водного раствора ИЗ в дерме кожи наблюдалось вначале преобладание мономеров, вызванное, по-видимому, малой концентрацией красителя в ткани, а затем, по мере увеличения его концентрации, – постепенный переход из мономерной формы в димерную. Однако на рис. 2 хорошо видно, что в течение почти 3.5 ч от начала воздействия форма спектра кожи практически не изменилась. Это свидетельствует о чрезвычайно низкой проницаемости рогового слоя эпидермиса для водного раствора ИЗ.

Хорошо известно, что диффузия водных растворов веществ через кожный барьер затруднена. Толщина рогового слоя составляет приблизительно 10–20 мкм. Он состоит из корнеоцитов или ороговевших плотно упакованных плоских безъядерных клеток диаметром приблизительно 40 мкм и толщиной 0.5 мкм [30]. Корнеоциты включены в липидный бислойный матрикс. Межклеточные липиды формируют непрерывную структуру и создают прочный гидрофобный барьер [30, 31].

Возможными путями проникновения водорастворимых препаратов через роговой слой



являются придатки кожи (в основном волосяные фолликулы) и поры, пронизывающие эпидермис [9, 30, 32, 33].

За счёт наличия липидного барьера длина пути для молекул воды в роговом слое в 50 раз больше толщины рогового слоя. Это предполагает извилистость пути проникновения гидрофильных веществ по межклеточному матриксу. Однако часть вещества может также проникать в корнеоциты за счёт их набухания в водной среде [30].

В работе [1] было получено, что коэффициент диффузии воды в роговом слое варьирует от  $2.5 \times 10^{-10}$  до  $8.34 \times 10^{-10}$  см<sup>2</sup>/с в зависимости от степени гидратации рогового слоя. Таким образом, структура и состав рогового слоя способствуют уменьшению значения коэффициента диффузии в  $10^3$  раз по сравнению с его значением в клеточных мембранах [34].

Типичные значения коэффициентов диффузии красителей в растворах находятся в диапазоне  $10^{-5} - 10^{-6}$  см<sup>2</sup>/с [35, 36]. Значение коэффициента диффузии водного раствора ИЗ в дермальном слое образца кожи, полученное в работе [29], составляет  $(7.7 \pm 2.5) \times 10^{-7}$  см<sup>2</sup>/с. Однако при взаимодействии водного раствора ИЗ с роговым слоем эпидермиса полного окрашивания образцов кожи в течение всего периода наблюдения не происходило, что не дало возможности в данном случае оценить коэффициент диффузии.

На рис. 3 представлены спектры оптической плотности ИЗ в 40%-ном растворе этилового спирта (правая ось) и ЭОП кожи в процессе взаимодействия этого раствора с эпидермисом (левая ось). Две полосы в спектре спиртового раствора красителя определяются поглощением мономеров (785 нм) и димеров (720 нм). В данном случае при такой же концентрации красителя в спиртовом растворе преобладает мономерная форма.

В течение первого часа изменения в спектре обратного рассеяния кожи хорошо заметны. На длине волны 806 нм наблюдается пик, соответствующий длине волны максимума поглощения мономеров ИЗ. Смещение положения максимума поглощения ИЗ в коже в длинноволновую область по сравнению со спектром ИЗ в растворе объясняется влиянием рассеяния ткани.

С течением времени амплитуда пика увеличивается, что соответствует приближению границы окрашенной ткани к детектору и увеличению концентрации красителя в зондируемом объёме. При этом положение пика поглощения мономеров остаётся вблизи длины волны 806 нм.

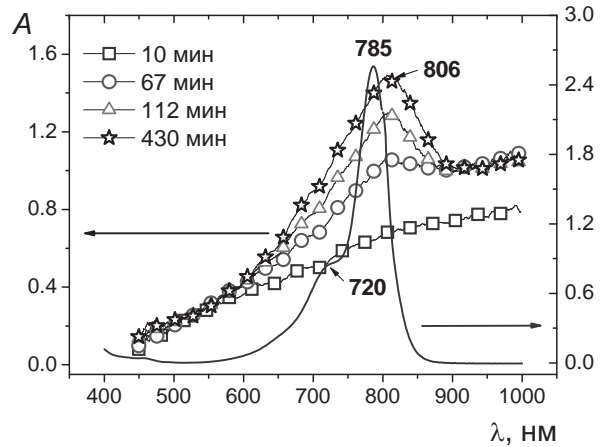


Рис. 3. Спектры оптической плотности 40%-ного спиртового раствора индоцианинового зелёного с концентрацией 1 мг/мл (правая ось) и эффективной оптической плотности кожи через различные временные интервалы после начала её взаимодействия с данным раствором со стороны эпидермиса (левая ось)

Для образца кожи, представленного на рис. 3, изменение спектров ЭОП завершалось после 400 мин взаимодействия образца с раствором красителя. На рис. 4 показана кинетика параметра  $\Delta A(t, \lambda)$ , характеризующего изменение поглощения биоткани с течением времени на четырёх длинах волн из области полосы поглощения раствора ИЗ. Прекращение изменения показывает, что образец в области соприкосновения с раствором прокрашен на всю толщину. Это позволило оценить коэффициент диффузии спиртового раствора ИЗ в коже через роговой слой эпидермиса. Коэффициент диффузии рассчитывался для каждого образца на 4 длинах волн, и полученные значения усреднялись. Среднее значение для 5 образцов составило  $(6.85 \pm 3.75) \times 10^{-7}$  см<sup>2</sup>/с.

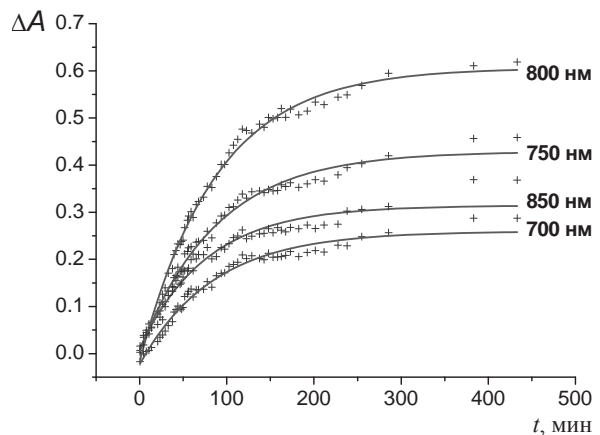


Рис. 4. Кинетика разностной эффективной оптической плотности кожи при её взаимодействии со спиртовым раствором индоцианинового зелёного на четырёх длинах волн из области полосы поглощения данного раствора





Как видно, добавление этанола в раствор красителя значительно облегчает его диффузию. Так, значение коэффициента диффузии ИЗ через роговой слой эпидермиса при использовании спиртового раствора сопоставимо с его значением в дерме при использовании водного раствора красителя, в то время как водный раствор ИЗ в течение того же периода времени практически не проникает в роговой слой.

Хорошо известно, что этанол является растворителем, модифицирующим барьерные свойства рогового слоя. Ряд работ посвящён исследованию влияния этанола различных концентраций на транспорт некоторых полярных/ионных агентов в кожу мыши *in vitro* [33, 37, 38]. Показано, что при достаточно высокой концентрации (~40%) этанол способствует образованию пор и существенно увеличивает транспорт веществ через поры благодаря увеличению размера и/или плотности пор в эпидермальной мембране [14, 37, 38]. Такие дополнительные пути проникновения являются результатом комбинации изменений конформации протеинов, реорганизации внутри участков липидных полярных головок или экстракции липидов [15, 19, 33].

### Заключение

В работе представлены экспериментальные результаты исследования диффузии фотодинамического красителя индоцианинового зелёного, растворённого в дистиллированной воде и 40%-ном водном растворе этилового спирта, через роговой слой эпидермиса кожи крысы *ex vivo*. Показано, что при взаимодействии рогового слоя с водным раствором красителя проникновения красителя в кожу за время наблюдения (4–6 ч) не происходит. При использовании в качестве усилителя диффузии ИЗ водного 40%-го спиртового раствора наблюдалось полное окрашивание образца в течение 6–7 часов, в результате чего удалось оценить коэффициент диффузии ИЗ через роговой слой эпидермиса, который составил  $(6.85 \pm 3.75) \times 10^{-7}$  см<sup>2</sup>/с. Результаты могут быть использованы для разработки новых и оптимизации существующих методов фототермолиза и фототерапии кожных заболеваний.

*Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ НШ-7898.2016.2.*

### Список литературы

1. Blank I. H., Moloney J., Emslie A. G., Simon I., Apt C. The diffusion of water across the stratum corneum as a function of its water content // *J. Invest. Dermatol.* 1984. Vol. 82. P. 188–194.
2. Sennhenn B., Giese K., Plamann K., Harendt N., Kolmel K. *In vivo* evaluation of the penetration of topically applied drugs into human skin by spectroscopic method // *Skin Pharmacol.* 1993. Vol. 6. P. 152–160.
3. Mitragotri S. *In situ* determination of partition and diffusion coefficients in the lipid bilayers of stratum corneum // *Pharm. Res.* 2000. Vol. 17. P. 1026–1029.
4. Weigmann H.-J., Lademann J., Schanzer S., Lindemann U., von Pelchrzim R., Schaefer H., Sterry W., Shah V. Correlation of the local distribution of topically applied substances inside the stratum corneum determined by tape stripping to differences in bioavailability // *Skin Pharmacol. Appl. Skin Physiol.* 2001. Vol. 14. P. 93–103.
5. Star W. M., Aalders M. C. G., Sac A., Sterenborg H.J.C.M. Quantitative model calculation of the time-dependent Protoporphyrin IX concentration in normal human epidermis after delivery of ALA by passive topical application or iontophoresis // *Photochem. Photobiol.* 2002. Vol. 75, № 4. P. 424–432.
6. Genina E. A., Bashkatov A. N., Korobko A. A., Zubkova E. A., Tuchin V. V., Yaroslavsky I., Altshuler G. B. Optical clearing of human skin: comparative study of permeability and dehydration of intact and photothermally perforated skin // *J. Biomed. Opt.* 2008. Vol. 13, № 2. P. 021102.
7. Andanson J. M., Hadgraft J., Kazarian S. G. *In situ* permeation study of drug through the stratum corneum using attenuated total reflection Fourier transform infrared spectroscopic imaging // *J. Biomed. Opt.* 2009. Vol. 14, № 3. P. 034011.
8. Williams A. C., Barry B. W. Penetration enhancers // *Adv. Drug Deliv. Rev.* 2004. Vol. 56. P. 603–618.
9. Cevc G., Vierl U. Nanotechnology and the transdermal route. A state of the art review and critical appraisal // *J. Controlled Release.* 2010. Vol. 141, № 3. P. 277–299.
10. Xu X., Zhu Q. Evaluation of skin optical clearing enhancement with Azone as a penetration enhancer // *Optics Communications.* 2007. Vol. 279. P. 223–228.
11. Jiang J., Wang R. K. How different molarities of oleic acid as enhancer exert its effect on optical clearing of skin tissue *in vitro* // *J. X-Ray Science and Technology.* 2005. Vol. 13. P. 149–159.
12. Jiang J., Boese M., Turner P., Wang R. K. Penetration kinetics of dimethyl sulphoxide and glycerol in dynamic optical clearing of porcine skin tissue *in vitro* studied by Fourier transform infrared spectroscopic imaging // *J. Biomed. Opt.* 2008. Vol. 13, № 2. P. 021105.
13. Bui A. K., McClure R. A., Chang J., Stoianovici C., Hirshburg J., Yeh A. T., Choi B. Revisiting optical clearing with dimethyl sulfoxide (DMSO) // *Lasers Surg. Med.* 2009. Vol. 41. P. 142–148.



14. *Sznitowska M.* The influence of ethanol on permeation behavior of the porous pathway in the stratum corneum // *Intern. J. Pharmacol.* 1996. Vol. 137. P. 137–140.
15. *Kurihara-Bergstrom T., Knutson K., de Noble L. J., Goates C. Y.* Percutaneous absorption enhancement of an ionic molecule by ethanol–water system in human skin // *Pharm. Res.* 1990. Vol. 7. P. 762–766.
16. *Zhi Z., Han Z., Luo Q., Zhu D.* Improve optical clearing of skin in vitro with propylene glycol as a penetration enhancer // *J. Innov. Opt. Health Sci.* 2009. Vol. 2, № 3. P. 269–278.
17. *Zhong H., Guo Z., Wei H., Guo L., Wang C., He Y., Xiong H., Liu S.* Synergistic effect of ultrasound and thiazone–PEG 400 on human skin optical clearing *in vivo* // *Photochem. Photobiol.* 2010. Vol. 86, № 3. P. 732–737.
18. *Chen K., Liang Y., Zhang Y.* Study on reflection of human skin with liquid paraffin as the penetration enhancer by spectroscopy // *J. Biomed. Opt.* 2013. Vol. 18, № 10. P. 105001.
19. *Kai T., Mak V. H., Potts R. O., Guy R. H.* Mechanism of percutaneous penetration enhancement: effect of *n*-alkanols on the permeability barrier of hairless mouse skin // *Controlled Release.* 1990. Vol. 12. P. 103–112.
20. *Beastall J., Guy R. H., Hadgraft J., Wilding I.* The influence of urea on percutaneous absorption // *Pharmaceutical Research.* 1986. Vol. 3, № 5. P. 294–297.
21. *Alander J. T., Kaartinen I., Laakso A., Patila T., Spillmann T., Tuchin V. V., Venermo M., Valisuo P.* A review of indocyanine green fluorescent imaging in surgery // *Intern. J. Biomedical Imaging.* 2012. Vol. 2012. P. 940585.
22. *Park K. Y., Kim J. Y., Hyun M. Y., Oh W. J., Jeong S. Y., Han T. Y., Ahn J. Y., Kim B. J., Kim M. N.* 1,213 Cases of treatment of facial acne using indocyanine green and intense pulsed light in Asian skin // *BioMed Research International.* 2015. Vol. 2015. P. 596161.
23. *Khosroshahi M. E., Nourbakhsh M. S., Saremi S., Tabatabaee F.* Characterization of skin tissue soldering using diode laser and indocyanine green: *in vitro* studies // *Lasers Med. Sci.* 2010. Vol. 25, № 2. P. 207–212.
24. *Mamoon A.-M., Gamal-Eldeen A. M., Ruppel M. E., Smith R. J., Tsang T., Miller L. M.* *In vitro* efficiency and mechanistic role of indocyanine green as photodynamic therapy agent for human melanoma // *Photodiagnosis and Photodynamic Therapy.* 2009. Vol. 6. P. 105–116.
25. *Mourant J. R., Johnson T. M., Los G., Bigio I. J.* Non-invasive measurement of chemotherapy drug concentrations in tissue : preliminary demonstrations of *in vivo* measurements // *Phys. Med. Biol.* 1999. Vol. 44. P. 1397–1417.
26. *Genina E. A., Bashkatov A. N., Tuchin V. V.* Effect of ethanol on the transport of methylene blue through stratum corneum // *Medical Laser Application.* 2008. Vol. 23, № 1. P. 31–38.
27. *Генина Э. А., Башкатов А. Н., Чикина Е. Э., Тучин В. В.* Диффузия метиленового синего в слизистой оболочке верхнечелюстной пазухи человека // *Биофизика.* 2007. Т. 52, № 6. С. 1104–1111.
28. *Mourant J. R., Bigio I. J., Jack D. A., Johnson T. M., Miller H. D.* Measuring absorption coefficients in small volumes of highly scattering media : source-detector separations for which path lengths do not depend on scattering properties // *Appl. Opt.* 1997. Vol. 36, № 22. P. 5655–5661.
29. *Генина Э. А., Башкатов А. Н., Тучин В. В.* Исследование диффузии фотодинамического красителя индоцианинового зеленого в коже с помощью спектроскопии обратного рассеяния // *Квантовая электроника.* 2014. Т. 44, № 7. С. 689–695.
30. *Schaefer H., Redelmeier T. E.* *Skin Barrier. Principles of Percutaneous Absorption.* Basel : Karger, 1996. 310 p.
31. *Barry B. W.* Action of skin penetration enhancers – the lipid protein partitioning theory // *Intern. J. Cosmetic Science.* 1988. Vol. 10. P. 281–293.
32. *Genina E. A., Bashkatov A. N., Sinichkin 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.
33. *Ghanem A. -H., Mahmoud H., Higuchi W. I., Liu P., Good W. R.* The effects of ethanol on the transport of lipophilic and polar permeants across hairless mouse skin : Methods/validation of a novel approach // *Intern. J. Pharm.* 1992. Vol. 78. P. 137–156.
34. *Mollee T. R., Bracken A. J.* A Model of solute transport through stratum corneum using solute capture and release // *Bull. of Mathematical Biology.* 2007. Vol. 69. P. 1887–1907.
35. *Физические величины : справочник / под ред. И. С. Григорьевой, Е. З. Мейлихова.* М. : Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
36. *Котык А., Яначек К.* *Мембранный транспорт.* М. : Мир, 1980. 341 с.
37. *Inamori T., Ghanem A.-H., Higuchi W. I., Srinivasan V.* Macromolecules transport in and effective pore size of ethanol pretreated human epidermal membrane // *Intern. J. Pharm.* 1994. Vol. 105. P. 113–123.
38. *Peck K. D., Ghanem A. -H., Higuchi W. I.* Hindered diffusion of polar molecules through and effective pore radii estimates of intact and ethanol treated human epidermal membrane // *Pharm. Res.* 1994. Vol. 11. P. 1306–1314.



## ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 539.194; 539.196.3

### МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ 4,4'-ХЛОРБЕНЗОФЕНОНА

Л. М. Бабков<sup>1</sup>, В. А. Бойков<sup>1</sup>, Н. А. Давыдова<sup>2</sup>, К. Е. Успенский<sup>3</sup>

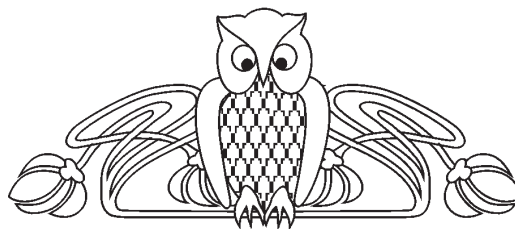
<sup>1</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского

E-mail: babkov@sgu.ru

<sup>2</sup>Институт физики НАН Украины, Киев

E-mail: davydova@iop.kiev.ua

<sup>3</sup>Российская академия народного хозяйства и государственной службы при Президенте РФ, Поволжский институт управления имени П. А. Столыпина, Саратов



При комнатной температуре измерены спектры инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния 4,4'-дихлорбензофенона в диапазонах 400–3200 и 0–3200 см<sup>-1</sup> соответственно. Методом теории функционала плотности B3LYP/6-31+g(d) и 6-31-g(d) проведено моделирование структуры и колебательных спектров молекулы: рассчитаны минимальная энергия, геометрическая структура, составляющие дипольного момента и тензора поляризуемости, силовые постоянные и частоты нормальных колебаний в гармоническом приближении, их интенсивности в ИК спектре и активности в спектре КР. Дана интерпретация измеренных спектров.

**Ключевые слова:** 4,4'-дихлорбензофенон, моделирование, метод теории функционала плотности, ИК спектр, спектр КР, нормальные колебания, частота, интенсивность, КР активность.

#### Molecular Modeling and Vibrational Spectra of 4,4'-chlorobenzophenone

L. M. Babkov, V. A. Boykov,  
N. A. Davydova, K. E. Uspenskiy

Vibrational infrared and Raman spectra of 4,4'-chlorobenzophenone have been measured at room temperature in the ranges 400–3200 and 0–3200 cm<sup>-1</sup> respectively. Modeling of structure and vibrational spectra has been performed by a density functional theory method B3LYP/6-31+g(d) and 6-31-g(d). Energy, structure, components of the dipole moment and polarizability tensor, force constants, frequencies of normal modes in harmonic approximation and their intensities in the IR and Raman activity have been calculated. Interpretation of measured spectra is given.

**Key words:** 4,4'-chlorobenzophenone, molecular modeling, density functional theory method, IR spectrum, Raman spectrum, normal modes, frequency, intensity, Raman activity.

DOI: 10.18500/1817-3020-2016-16-2-97-102

#### Введение

В статье обсуждены результаты исследования структуры 4,4'-дихлорбензофенона

(4,4'-ХБФ) и его колебательных спектров: инфракрасного (ИКС) спектра поглощения и спектра комбинационного рассеяния (СКР). Целью исследования явилось установление связи «спектр – структура – свойства» в 4,4'-ХБФ. Исследования такого рода актуальны для фундаментальной науки, в частности квантовой физики молекулярных систем и конденсированного состояния и для приложений. Проведённое исследование носит комплексный характер: оно включает в себя эксперимент и теорию. Роль теории в подобных исследованиях сильно возросла благодаря успехам, достигнутым в развитии квантово-химических методов расчёта структуры молекул и кристаллов [1–3]. Возросшая точность, с которой рассчитываются молекулярные параметры – минимальная энергия, геометрия, дипольные моменты, тензор поляризуемости, силовые постоянные – позволяет с успехом использовать их в теоретической спектроскопии.

4,4'-ХБФ – соединение из числа галогензамещённых бензофенона (БФ), большинство из которых, в частности, бромзамещённые, образуют стеклофазу. Наличие стеклофазы определило первоначальный интерес к галогензамещённым БФ. Стеклофаза бромзамещённых БФ стала предметом исследования в [4]. 4,4'-ХБФ, как выяснилось, в отличие от бромзамещённых БФ, стеклофазы не образует, но обладает полиморфизмом. У него имеются две соразмерные кристаллические модификации (высокотемпературная и низкотемпературная) с моноклинными кристаллическими решётками, в промежутке между которыми реализуется не-



соразмерная фаза [5] в интервалах температур 184–165 К при охлаждении образца и 192–206 К – при нагревании. Исследование полиморфизма 4,4'-ХБФ, проявляющегося в структуре и колебательных спектрах, представляет интерес. Авторами статьи реализован первый его этап, связанный с интерпретацией колебательных спектров высокотемпературной модификации 4,4'-ХБФ, измеренных при нормальных условиях, на основе результатов моделирования структуры и колебательных спектров 4,4'-ХБФ методом теории функционала плотности (ТФП). Результаты, полученные на этом этапе, обсуждаются в статье.

### Эксперимент и моделирование

ИК спектры 4,4'-ХБФ измерены при комнатной температуре на Фурье-спектрометре IFC-88 фирмы Брукер с разрешением  $2\text{ см}^{-1}$  в спектральной области  $500\text{--}3500\text{ см}^{-1}$ . Программное обеспечение эксперимента осуществлялось с помощью комплекса OPUS. Образцы располагались между пластинами CsI, прозрачными в ИК области.

Спектры КР регистрировались на спектрометре Jobin-V von Ramanog U-1000 (двойной монохроматор) в диапазоне  $10\text{--}3500\text{ см}^{-1}$ . Спектральная ширина щели  $2\text{ см}^{-1}$ . Возбуждение осуществлялось линией 514 нм Ar лазера с мощностью 100 мВт. Образец находился в стеклянном капилляре, закреплённом в криостате.

Моделирование структуры ИК спектра 4,4'-ХБФ проводилось на основе метода ТФП [1–3], реализованного в стандартном лицензионном пакете программ GAUSSIAN'03, с использованием функционала B3LYP и базисов 6-31+g(d), 6-31-g(d). Минимизирована энергия, рассчитаны значения геометрических параметров, силовых постоянных в гармоническом приближении, дипольных моментов и компонент тензора поляризуемости молекулы. Анализ численных значений указанных параметров, рассчитанных с использованием обоих базисов, указывает на их соответствие общепринятым в структурной химии и позволяет считать их достоверными. Полученные результаты не выявили преимуществ одного базиса перед другим. Рассчитанные параметры использованы в моделировании ИК спектра и спектра КР молекулы 4,4'-ХБФ. Результаты моделирования колебательных спектров оказались ожидаемыми и удовлетворительными. С помощью процедуры

масштабирования рассчитанных частот, широко используемой в мировой практике (см., например, статьи [6, 7] и [8–16]) минимизированы расхождения между измеренными и рассчитанными частотами, обусловленные ограниченностью гармонического приближения. Использование масштабирования признано целесообразным в мировом научном сообществе для интерпретации спектров соединений гомологического ряда какого-либо соединения или ряда его замещённых. В статье авторами проведено масштабирование для повышения эффективности анализа колебательных спектров и их интерпретации. Анггармонизм сильнее влияет на частоты колебаний лёгких атомов, слабее – тяжёлых. Процедура масштабирования учитывает это: масштабирующие множители для разных диапазонов колебательного спектра молекулы различаются. В диапазоне  $0\text{--}1000\text{ см}^{-1}$ , в котором проявляются валентные и деформационные колебания бензольных колец и связей C–Cl, теоретические спектры сдвинуты относительно экспериментальных в высокочастотную сторону на 1.5%, и масштабирующий множитель равен 0.985. В диапазоне  $1000\text{--}1750\text{ см}^{-1}$  смещение теоретического спектра достигает 2.5–3%, и масштабирующий множитель равен 0.975. В диапазоне  $3000\text{--}3100\text{ см}^{-1}$  рассчитанные частоты валентных колебаний связей C–H превышают измеренные на 5–7%, т.е. на  $150\text{--}200\text{ см}^{-1}$ , и масштабирующий множитель для этой области равен 0.95. Масштабирование рассчитанных частот позволило устранить обусловленную гармоническим приближением систематическую ошибку, неявно учтя таким образом механический ангармонизм.

### Обсуждение результатов

**Структура 4,4'-ХБФ.** Строение изолированной молекулы 4,4'-ХБФ приведено на рис. 1. Значения рассчитанных длин связей и углов приведены в табл. 1. Их сравнение с соответствующими параметрами в молекулах БФ и его бромзамещённых [4] показало, что замещение в молекуле БФ атомов водорода в положениях 4 и 4' не приводит к существенным изменениям геометрии карбонильной группы и фенильных колец. Длина связи C=O составляет  $1.22\text{ \AA}$ . Она не изменяется при переходе БФ – 4-бромбензофенон – 4,4'-ХБФ. Длина связи C–Cl составляет  $1.75\text{ \AA}$ , что на  $0.15\text{ \AA}$  меньше длины связи C–Br в 4-бромбензофеноне.



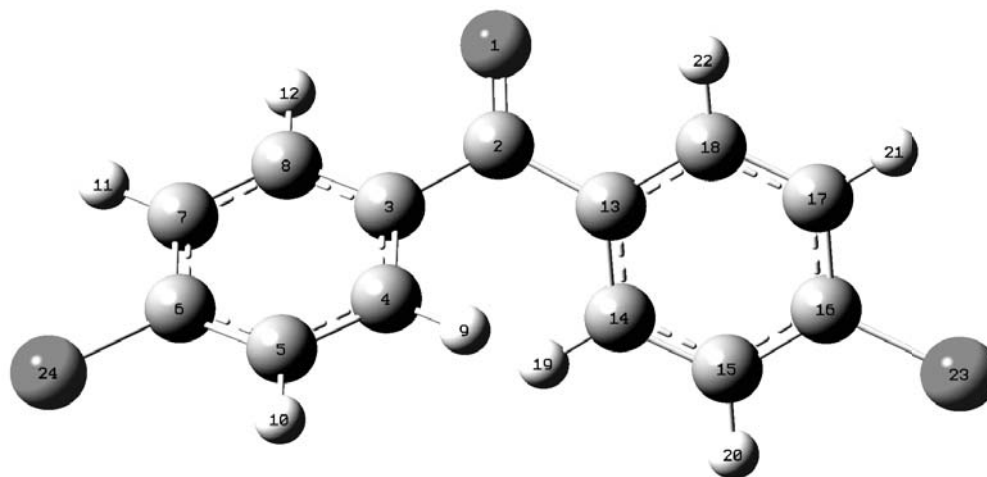


Рис. 1. Строение молекулы 4,4'-ХБФ

Таблица 1

Геометрические параметры 4,4'-ХБФ

Связь	Длина, Å	Связь	Длина, Å
O <sub>1</sub> -C <sub>2</sub>	1.22	C <sub>3</sub> -C <sub>14</sub>	1.40
C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	1.49	C <sub>14</sub> -C <sub>15</sub>	1.39
C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub>	1.40	C <sub>15</sub> -C <sub>16</sub>	1.39
C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	1.39	C <sub>16</sub> -C <sub>17</sub>	1.39
C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub>	1.39	C <sub>17</sub> -C <sub>18</sub>	1.39
C <sub>6</sub> -C <sub>7</sub>	1.39	C <sub>14</sub> -H <sub>19</sub>	1.08
C <sub>7</sub> -C <sub>8</sub>	1.39	C <sub>15</sub> -H <sub>20</sub>	1.08
C <sub>4</sub> -H <sub>9</sub>	1.08	C <sub>17</sub> -H <sub>21</sub>	1.08
C <sub>5</sub> -H <sub>10</sub>	1.08	C <sub>18</sub> -H <sub>22</sub>	1.08
C <sub>6</sub> -H <sub>11</sub>	1.08	C <sub>6</sub> -Cl <sub>24</sub>	1.75
C <sub>8</sub> -H <sub>12</sub>	1.08	C <sub>16</sub> -Cl <sub>23</sub>	1.75
C <sub>2</sub> -C <sub>13</sub>	1.49		

Угол	град.	Угол	град.
O <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	119	O <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> -C <sub>13</sub>	119
C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub>	118	C <sub>2</sub> -C <sub>13</sub> -C <sub>14</sub>	118
C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>8</sub>	122	C <sub>2</sub> -C <sub>13</sub> -C <sub>18</sub>	122
C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub> -H <sub>9</sub>	118	C <sub>13</sub> -C <sub>14</sub> -H <sub>19</sub>	118
C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	120	C <sub>13</sub> -C <sub>14</sub> -C <sub>15</sub>	120
C <sub>5</sub> -C <sub>4</sub> -H <sub>9</sub>	120	C <sub>15</sub> -C <sub>14</sub> -H <sub>19</sub>	120
C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub> -H <sub>10</sub>	120	C <sub>14</sub> -C <sub>15</sub> -H <sub>20</sub>	120
C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub>	119	C <sub>14</sub> -C <sub>15</sub> -C <sub>16</sub>	119
C <sub>6</sub> -C <sub>5</sub> -H <sub>10</sub>	120	C <sub>16</sub> -C <sub>15</sub> -H <sub>20</sub>	120
C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub> -Cl <sub>24</sub>	119	C <sub>15</sub> -C <sub>16</sub> -Cl <sub>23</sub>	119
C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub> -C <sub>7</sub>	121	C <sub>15</sub> -C <sub>16</sub> -C <sub>17</sub>	121
C <sub>7</sub> -C <sub>6</sub> -Cl <sub>24</sub>	119	C <sub>17</sub> -C <sub>16</sub> -Cl <sub>23</sub>	119
C <sub>6</sub> -C <sub>7</sub> -C <sub>8</sub>	119	C <sub>16</sub> -C <sub>17</sub> -C <sub>18</sub>	119
C <sub>6</sub> -C <sub>7</sub> -H <sub>11</sub>	120	C <sub>16</sub> -C <sub>17</sub> -H <sub>21</sub>	120
C <sub>8</sub> -C <sub>7</sub> -H <sub>11</sub>	120	C <sub>18</sub> -C <sub>17</sub> -H <sub>21</sub>	120
C <sub>7</sub> -C <sub>8</sub> -H <sub>12</sub>	118	C <sub>17</sub> -C <sub>18</sub> -H <sub>22</sub>	118
C <sub>7</sub> -C <sub>8</sub> -C <sub>3</sub>	120	C <sub>17</sub> -C <sub>18</sub> -C <sub>13</sub>	120
C <sub>3</sub> -C <sub>8</sub> -H <sub>12</sub>	120	C <sub>13</sub> -C <sub>18</sub> -H <sub>22</sub>	120
C <sub>8</sub> -C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub>	118	C <sub>18</sub> -C <sub>13</sub> -C <sub>14</sub>	118

**Колебательные спектры.** Молекула 4,4'-ХБФ принадлежит к группе симметрии  $C_2$ . Её 66 нормальных колебаний поровну делятся между двумя типами симметрии:  $\Gamma_{vibr} = 33a + 33b$ . В соответствии с правилами отбора по симметрии в ИК спектре и спектре КР молекулы разрешены колебания обоих типов. В табл. 2 приведены измеренные частоты ИКС и СКР и рассчитанные частоты нормальных колебаний 4,4'-ХБФ. Дано их отнесение по формам колебания.

Влияние замещения атомов водорода в положениях 4 и 4' на атомы хлора существенно сказывается на формах колебаний в низкочастотных областях спектра (ниже  $500\text{ см}^{-1}$ ), где проявляются плоские и неплоские деформационные колебания бензольных колец, неплоские деформационные колебания связей, соединяющих бензольные кольца. Основными по вкладу в формы нормальных колебаний являются смещения атомов O<sub>1</sub>, C<sub>2</sub>, C<sub>3</sub>, C<sub>13</sub>, C<sub>4</sub>, C<sub>8</sub>, C<sub>14</sub>, C<sub>18</sub>. При этом влияние смещений самих атомов хлора также существенно в нормальных колебаниях фенильных колец и соединяющей их группы атомов.

Влияние валентных колебаний Q(C-Cl) существенно сказывается на нормальных модах  $\nu_{15}$ ,  $\nu_{16}$ ,  $\nu_{18}$ ,  $\nu_{20}$ ,  $\nu_{25}$ , которым соответствуют интенсивные пики в области ниже  $800\text{ см}^{-1}$  измеренных спектров.

Замещение атома водорода на атом хлора сказывается на неплоских деформационных колебаниях бензольных колец  $\chi(\text{C}(\text{C}(\text{H}))_2)$ , соответствующих нормальным колебаниям  $\nu_{30}$ ,  $\nu_{31}$ ,  $\nu_{32}$ . В нормальные колебания  $\nu_{37}$ ,  $\nu_{38}$ ,  $\nu_{39}$  вносят вклад валентные колебания Q(C-Cl) наравне с деформационными  $\beta(\text{C}(\text{C}(\text{H}))_2)$ ,  $\beta(\text{C}(\text{C}(\text{H}))_1)$ ,



$\beta(\text{CCH}_{20})$ ,  $\beta(\text{CCH}_{21})$ ). В нормальные колебания, проявляющиеся в области средних частот (1100–1650  $\text{cm}^{-1}$ ), основной вклад вносят плоские деформационные координаты  $\beta_{R1(R2)}(\text{CCH})$ .

Нормальной моде  $\nu_{45}$  соответствуют интенсивные пики 1295  $\text{cm}^{-1}$  в ИК спектре, и 1288  $\text{cm}^{-1}$  в спектре КР. Модам  $\nu_{56}$ ,  $\nu_{57}$  соответствуют пики в области ниже 1750  $\text{cm}^{-1}$ .

Таблица 2

## Измеренные и рассчитанные частоты фундаментальных колебаний молекулы 4,4'-ХБФ

№	$\nu_{\text{эксп}}^{\text{КР}}$	$\nu_{\text{эксп}}^{\text{ИК}}$	$\nu_{\text{теор}}$	Форма колебания
15	465	468	463	$Q_{R-R1,R2}(\text{C-Cl})$ ; $\gamma_{R1,R2}(\text{CCC})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{CCCC})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{CCCH})$ ;
16	467	469	461	$Q_{R-R1,R2}(\text{C-Cl})$ ; $\gamma_{R1,R2}(\text{OCC})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{CCCC})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{CCCH})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{CICCC})$
17	510	512	501	$Q_{R-R1,R2}(\text{C-Cl})$ ; $\chi(\text{CCCC})$ ; $\chi(\text{CCCH})$ ; $\chi(\text{HCCC})$ ;
18	515	515	515	$Q_{R-R1,R2}(\text{C-Cl})$ ; $Q_{R-R1,R2}(\text{C-C})$ ; $\gamma(\text{OCC})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{CCCC})$ ; $\chi(\text{CCCH})$ ;
19	594	595	588	$Q_{R-R1,R2}(\text{C-Cl})$ ; $Q_{R-R1,R2}(\text{C-C})$ ; $\gamma(\text{OCC})\gamma(\text{CCC})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{CCCC})$ ; $\chi(\text{CCCH})$ ;
20	638	640	620	$Q_{R-R1,R2}(\text{C-Cl})$ ; $Q_{R-R1,R2}(\text{C-C})$ ; $\gamma(\text{OCC})\gamma(\text{CCC})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{CCCC})$ ; $\chi(\text{CCCH})$ ;
21	645	647	652	$\gamma(\text{CCC})$ ; $\gamma(\text{CCH})$ ;
22	680	677	679	$\chi(\text{OCCC})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{CCCC})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{HCCC})$ ;
23	724	725	716	$Q(\text{C-Cl})$ ; $\gamma(\text{CCC})$ ; $\chi(\text{OCCC})$ ;
24	731	735	730	$\chi(\text{OCCC})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{CCCC})$ ;
25	771	772	760	$Q(\text{C-Cl})$ ; $Q_{R-R1,R2}(\text{C-C})$ ; $\gamma(\text{CCC})$ ; $\chi(\text{CCCH}_{12})$ ; $\chi(\text{CCCH}_{22})$ ;
26	772	773	773	$\chi(\text{OCCC})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{CCCC})$ ; $\chi_{R2}(\text{CICCC})$ ; $\chi(\text{CCCH}_9)$ ; $\chi(\text{CCC H}_{19})$ ;
27	841	845	830	$\chi_{R1,R2}(\text{CCCH})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{HCCCl})$ ;
28	845	849	841	$\chi_{R1,R2}(\text{CCCH})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{HCCCl})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{OCCH})$ ;
29	848	851	849	$\chi_{R1,R2}(\text{CCCH})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{CICCH})$ ;
30	867	870	863	$\chi_{R1,R2}(\text{CCCC})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{CICCH})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{CCCH})$ ;
31	940	943	928	$Q_{R-R2}(\text{C-C})$ ; $Q(\text{C}_3\text{-C}_8)$ ; $Q(\text{C}_{13}\text{-C}_{18})$ ; $\gamma(\text{CCC})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{HCCH})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{HCCCl})$ ;
32	976	971	971	$\chi_{R1,R2}(\text{CCCH})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{HCCH})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{HCCCl})$ ;
33	981	983	980	$\chi_{R1,R2}(\text{CCCH})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{HCCH})$ ;
34	989	983	987	$\chi_{R1,R2}(\text{CCCH})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{HCCH})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{HCCCl})$ ;
35	990	986	1001	$\chi_{R1,R2}(\text{CCCH})$ ; $\chi_{R1,R2}(\text{HCCH})$ ;
36	1031	1032	1021	$Q(\text{C}_3\text{-C}_8)$ ; $Q(\text{C}_{13}\text{-C}_{18})$ ; $Q(\text{C-Cl})$ ; $\gamma(\text{CCC})$ ;
37	1032	1034	1041	$Q(\text{C}_3\text{-C}_8)$ ; $(\text{C}_{13}\text{-C}_{18})$ ; $Q(\text{C-Cl})$ ; $\gamma(\text{CCC})$ ;
38	1105	1109	1110	$Q(\text{C}_5\text{-C}_6)$ ; $Q(\text{C}_{15}\text{-C}_{16})$ ; $Q(\text{C-Cl})$ ; $\beta(\text{CCH}_{10})$ ; $\beta(\text{CCH}_{11})$ ; $\beta(\text{CCH}_{20})$ ; $\beta(\text{CCH}_{21})$ ;
39	1106	1110	1115	$Q(\text{C}_6\text{-C}_7)$ ; $Q(\text{C}_{16}\text{-C}_{17})$ ; $Q(\text{C-Cl})$ ; $\beta(\text{CCH}_{10})$ ; $\beta(\text{CCH}_{11})$ ; $\beta(\text{CCH}_{20})$ ;
40	1137	1139	1132	$Q(\text{C}_4\text{-C}_5)$ ; $Q(\text{C}_7\text{-C}_8)$ ; $Q(\text{C}_{14}\text{-C}_{15})$ ; $Q(\text{C}_{17}\text{-C}_{18})$ ; $\beta(\text{CCH}_{10})$ ; $\beta(\text{CCH}_{11})$ ; $\beta(\text{CCH}_{20})$ ; $\beta(\text{CCH}_{21})$ ; $\beta(\text{CCH}_{12})$ ; $\beta(\text{CCH}_{22})$ ;
41	1140	1143	1149	$Q(\text{C}_4\text{-C}_5)$ ; $Q(\text{C}_7\text{-C}_8)$ ; $Q(\text{C}_{14}\text{-C}_{15})$ ; $Q(\text{C}_{17}\text{-C}_{18})$ ; $\beta(\text{CCH}_{10})$ ; $\beta(\text{CCH}_{11})$ ; $\beta(\text{CCH}_{20})$ ; $\beta(\text{CCH}_{21})$ ; $\beta(\text{CCH}_{12})$ ; $\beta(\text{CCH}_{22})$ ;
42	1171	1172	1167	$Q(\text{C-C})$ ; $Q(\text{C}_3\text{-C}_4)$ ; $Q(\text{C}_{13}\text{-C}_{18})$ ; $\beta(\text{CCH}_8)$ ; $\beta(\text{CCH}_{12})$ ; $\beta(\text{CCH}_{22})$ ; $\beta(\text{CCH}_{18})$ ;
43	1208	1209	1203	$Q(\text{C}_4\text{-C}_5)$ ; $Q(\text{C}_{14}\text{-C}_{15})$ ; $\beta(\text{CCH}_9)$ ; $\beta(\text{CCH}_{12})$ ; $\beta(\text{CCH}_{22})$ ; $\beta(\text{CCH}_{19})$ ;
44	1213	1216	1212	$Q(\text{C}_4\text{-C}_5)$ ; $Q(\text{C}_{14}\text{-C}_{15})$ ; $\beta(\text{CCH}_9)$ ; $\beta(\text{CCH}_{11})$ ; $\beta(\text{CCH}_{12})$ ; $\beta(\text{CCH}_{22})$ ; $\beta(\text{CCH}_{21})$ ; $\beta(\text{CCH}_{19})$ ;
45	1295	1299	1288	$Q(\text{C-C})$ ; $Q(\text{C}_3\text{-C}_4)$ ; $Q(\text{C}_{13}\text{-C}_{14})$ ; $\gamma(\text{OCC})$ ; $\beta(\text{CCH}_9)$ ; $\beta(\text{CCH}_{10})$ ; $\beta(\text{CCH}_{11})$ ; $\beta(\text{CCH}_{19})$ ;



Окончание табл. 2

№	$\nu_{\text{эксп}}^{\text{КР}}$	$\nu_{\text{эксп}}^{\text{ИК}}$	$\nu_{\text{теор}}$	Форма колебания
46	1332	1333	1310	$Q(C_5-C_6)$ ; $Q(C_{15}-C_{16})$ ; $Q(C_6-C_7)$ ; $\beta(CCH_9)$ ; $\beta(CCH_{10})$ ; $\beta(CCH_{11})$ ; $\beta(CCH_{12})$ ; $\beta(CCH_{19})$ ; $\beta(CCH_{20})$ ; $\beta(CCH_{21})$ ; $\beta(CCH_{22})$ ;
47	1333	1335	1328	$Q(C_5-C_6)$ ; $Q(C_{15}-C_{16})$ ; $Q(C_6-C_7)$ ; $\beta(CCH_9)$ ; $\beta(CCH_{10})$ ; $\beta(CCH_{11})$ ; $\beta(CCH_{12})$ ; $\beta(CCH_{19})$ ; $\beta(CCH_{20})$ ; $\beta(CCH_{21})$ ; $\beta(CCH_{22})$ ; $\beta(CCH_{23})$ ;
48	1342	1346	1340	$Q(C-C)$ ; $\beta_{R1,R2}(CCH)$
49	1343	1346	1341	$Q(C-C)$ ; $\gamma(CCC)$ ; $\beta_{R1,R2}(CCH)$
50	1436	1442	1421	$Q(C_4-C_5)$ ; $Q(C_7-C_8)$ ; $Q(C_{14}-C_{15})$ ; $\gamma(CCC)$ ; $\beta_{R1,R2}(CCH)\gamma(CCCl)$ ;
51	1437	1442	1437	$Q(C_4-C_5)$ ; $Q(C_7-C_8)$ ; $Q(C_{14}-C_{15})$ ; $Q(C_{17}-C_{18})$ ; $\beta_{R1,R2}(CCH)\gamma(CCCl)$ ;
52	1526	1531	1503	$Q(C-C)$ ; $\beta_{R1,R2}(CCH)$
53	1530	1535	1523	$Q(C-H)$ ; $Q(C-C)$ ; $\beta_{R1,R2}(CCH)$
54	1609	1617	1607	$Q(O=C)$ ; $Q(C-C)$ ; $\beta_{R1,R2}(CCH)$ ;
55	1610	1618	1623	$Q(C-H)$ ; $Q(C-C)$ ; $\beta_{R1,R2}(CCH)$ ;
56	1636	1645	1639	$Q(C-H)$ ; $Q(C-C)$ ; $\beta_{R1,R2}(CCH)$ ;
57	1638	1646	1631	$Q(C-H)$ ; $Q(C-C)$ ; $\beta_{R1,R2}(CCH)$ ;
58	1651	1650	1701	$Q(O=C)$ ; $Q(C-C)$ ; $\chi_{R1-R2}(CCCC)$
59	3045	3045	3048	$q(C_4-H)$ ; $q(C_5-H)$ ; $q(C_{14}-H)$ ; $q(C_{15}-H)$ ;
60	3048	3048	3054	$q(C_4-H)$ ; $q(C_5-H)$ ; $q(C_{14}-H)$ ; $q(C_{15}-H)$ ;
61	3059	3059	3063	$q(C_7-H)$ ; $q(C_8-H)$ ; $q(C_{17}-H)$ ; $q(C_{18}-H)$ ;
62	3067	3067	3064	$q(C_7-H)$ ; $q(C_8-H)$ ; $q(C_{17}-H)$ ; $q(C_{18}-H)$ ;
63	3073	3073	3068	$q(C_4-H)$ ; $q(C_5-H)$ ; $q(C_{14}-H)$ ; $q(C_{15}-H)$ ;
64	3075	3075	3077	$q(C_4-H)$ ; $q(C_5-H)$ ; $q(C_{14}-H)$ ; $q(C_{15}-H)$ ;
65	3087	3089	3098	$q(C_7-H)$ ; $q(C_8-H)$ ; $q(C_{17}-H)$ ; $q(C_{18}-H)$ ;
66	3103	3103	3123	$q(C_7-H)$ ; $q(C_8-H)$ ; $q(C_{17}-H)$ ; $q(C_{18}-H)$ ;

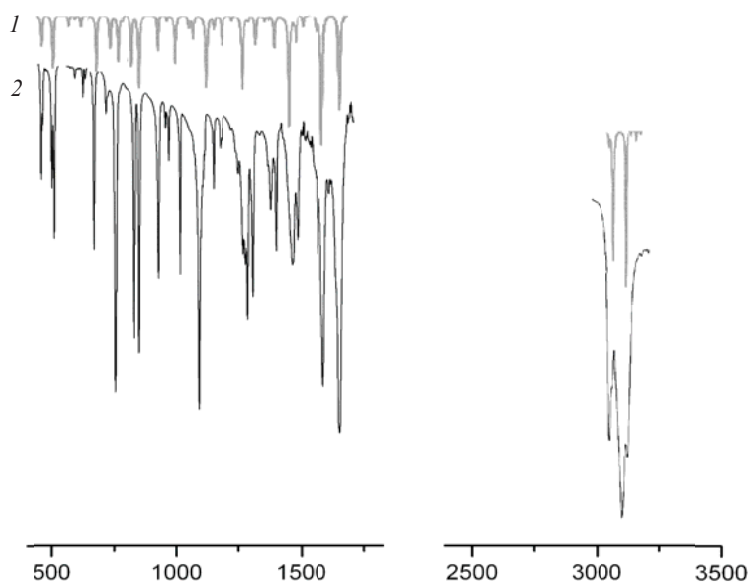


Рис. 2. ИК спектры 4,4'-ХБФ: 1 – теория, 2 – эксперимент

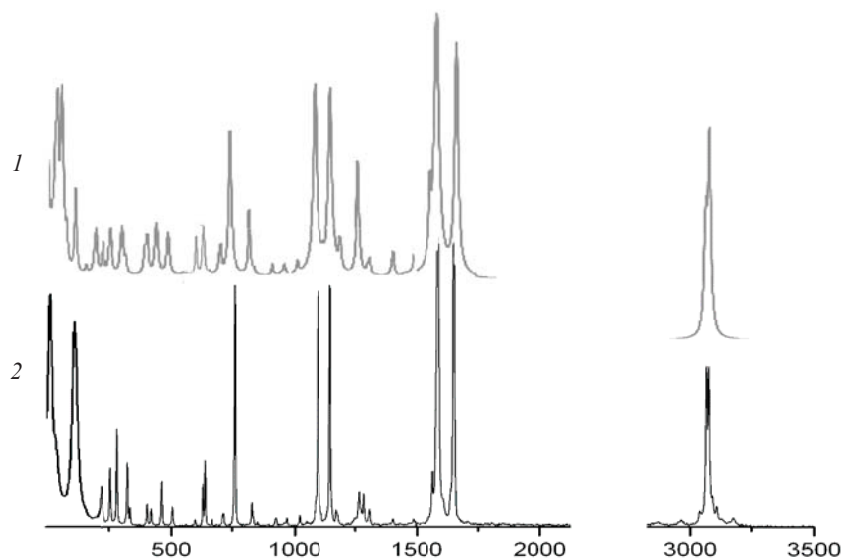


Рис. 3. Спектры КР, 4,4'-ХБФ: 1 – теория, 2 – эксперимент

### Заключение

Построена структурно-динамическая модель молекулы 4,4'-ХБФ методом ТФП с использованием функционала B3LYP и базисов 6-31+G(d) и 6-31-G(d). Результаты квантово-химических расчётов не выявили преимуществ одного базиса перед другим.

Оценено влияние замещения атома водорода фенильного кольца атомом хлора на геометрию молекулы, её динамику и колебательные спектры.

Установлен значительный вклад смещений атома хлора в большинство нормальных колебаний молекулы.

Дана интерпретация спектров ИК поглощения и КР, измеренных при комнатной температуре.

### Список литературы

1. Кон В. Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности // УФН. 2002. Т. 172, № 3. С. 336–348.
2. Полл Дж. Квантово-химические модели // УФН. 2002. Т. 172, № 3. С. 349–356.
3. Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. et al. Gaussian 03. Revision B.03 / Gaussian Inc. Pittsburgh, 2003. 302 p.
4. Babkov L. M., Baran J., Davydova N. A., Drozd D., Pyshkin O. S., Uspenskiy K. E. Influence of the bromo group on the vibrational spectra and macroscopic properties of benzophenone derivatives // J. Mol. Struct. 2008. Vol. 887. P. 87–91.
5. Mitkevich V. V., Lirtsman V. G., Strzhemechny M. A., Avdeenko A. A., Eremenko V. V. Investigation of the structural phase transitions near 190 K in 4,4'-dichlorobenzophenone // Acta Cryst. 1995. Vol. B 55. P. 799–806.
6. Yoshida H., Ehara A., Matsuura H. Density functional vibrational analysis using wavenumber-linear scale factors // Chem. Phys. Lett. 2000. Vol. 325, № 4. P. 477–483.
7. Yoshida H., Takeda K., Okamura J., Ehara A., Matsuura H. A new approach to vibrational analysis of large molecules by density functional theory : wave-number-linear scaling method // J. Phys. Chem. A. 2002. Vol. 106, № 14. P. 3580–3586.
8. Березин К. В., Нечаев В. В., Кривохижина Т. В. Применение метода линейного масштабирования частот в расчетах нормальных колебаний многоатомных молекул // Оптика и спектр. 2003. Т. 94, № 3. С. 398–401.
9. Бабков Л. М., Давыдова Н. А., Успенский К. Е. Водородная связь и структуры 2-, 3- и 4-бифенилметанолов // Журн. структурной химии. 2008. Т. 49, № 3. С. 419–426.
10. Бабков Л. М., Королевич М. В., Моисейкина Е. А. Расчет структуры и ИК спектра молекулы метил-β-D-глюкопиранозида методом функционала плотности // Журн. прикл. спектроскопии. 2010. Т. 77, № 2. С. 179–187.
11. Бабков Л. М., Королевич М. В., Моисейкина Е. А. Расчет структуры и ИК спектра метил-β-D-глюкопиранозида методом функционала плотности с учетом водородной связи // Журн. прикл. спектроскопии. 2011. Т. 78, № 2. С. 223–228.
12. Бабков Л. М., Королевич М. В., Моисейкина Е. А. Водородная связь, ИК спектры и строение метил-β-D-глюкопиранозида // Журн. структурной химии. 2012. Т. 53, № 1. С. 28–35.
13. Бабков Л. М., Давыдова Н. А., Моисейкина Е. А. ИК спектры циклогексанола и структурно-динамическая модель молекулы // Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика. 2012. Т. 12, вып. 1. С. 54–62.
14. Бабков Л. М., Давыдова Н. А., Моисейкина Е. А. Водородная связь и её влияние на структуру и колебательные спектры циклогексанола // Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика. 2013. Т. 13, вып. 1. С. 13–26.
15. Бабков Л. М., Ивлиева И. В., Королевич М. В. Расчет структуры и ИК спектра 2,3-ди-О-нитро-метил-β-D-глюкопиранозида методом функционала плотности // Журн. прикл. спектроскопии. 2015. Т. 82, № 3. С. 331–340.
16. Бабков Л. М., Давыдова Н. А., Ивлиева И. В. ИК спектры салола и их интерпретация на основе молекулярного моделирования // Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика. 2015. Т. 15, вып. 4. С. 44–54.





# ФИЗИКА АТОМНОГО ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

УДК 539.122.04

## ВЛИЯНИЕ ВТОРИЧНЫХ ЧАСТИЦ С ВЫСОКИМ ЗНАЧЕНИЕМ ЛИНЕЙНОЙ ПЕРЕДАЧИ ЭНЕРГИИ НА ФАКТОР КАЧЕСТВА ФОТОНОВ

А. В. Белоусов, Г. А. Крусанов, А. А. Калачев, А. П. Черняев

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова  
E-mail: belousovav@physics.msu.ru



В работе исследована энергетическая зависимость фактора качества моноэнергетического фотонного излучения с энергией до 40 МэВ при прохождении через тонкий слой. Условия облучения моделируют радиобиологические эксперименты по определению относительной биологической эффективности. Фактор качества вычисляется на основе данных о линейных потерях энергии всех частиц в облучаемом слое, которые рассчитываются методом Монте-Карло с использованием программного кода, разработанного в пакете Geant4. Показано, что в рассматриваемых слоях в результате образования тяжелых частиц с высоким значением линейной передачи энергии фактор качества фотонов существенно (в 3–15 раз в зависимости от толщины слоя) отличается от рекомендованного значения, равного 1.

**Ключевые слова:** фотонное излучение, фактор качества, линейная передача энергии, фотоядерные реакции, Geant4.

### Effect of Secondary Particles with High Linear Energy Transfer on Photon Beam Quality Factor

A. V. Belousov, G. A. Krusanov,  
A. A. Kalachev, A. P. Chernyaev

The energy dependence is investigated for a monoenergetic photon radiation quality factor with energies up to 40 MeV, while passing through a thin layer. The conditions of irradiation simulate radiobiological experiments to determine the relative biological effectiveness. The quality factor is calculated on the basis of data on linear energy transfer of all the particles in the irradiated layer, which are calculated using the Monte-Carlo method using GEANT4 code. It has been shown that in considered layers as a result of heavy particles with a high linear energy transfer photon quality factor significantly (3–15 times depending on the layer thickness) differs from the recommended value of 1.

**Key words:** photon radiation, quality factor, linear energy transfer, photonuclear reactions, Geant4.

DOI: 10.18500/1817-3020-2016-16-2-103-108

### Введение

Проблема биологической эффективности ионизирующих излучений с различными значениями линейной передачи энергии (ЛПЭ) продолжает оставаться одной из центральных

проблем радиобиологии. От ее решения зависят многочисленные вопросы, связанные с различными областями науки, промышленности, медицины и некоторых других областей. До последнего времени концепция относительной биологической эффективности (ОБЭ) использовалась как в радиобиологических экспериментах, так и в практике радиационной защиты. Зависимость величины коэффициента ОБЭ и связанных с этой величиной коэффициентов от ЛПЭ регламентируется различными международными комиссиями, главным образом МКРЗ (Международная комиссия по радиационной защите) и МКРЕ (Международная комиссия по радиационным единицам). В настоящее время концепцию ОБЭ принято использовать только в радиобиологии при сравнительных исследованиях действия различных типов излучения, в том числе для излучений одного вида, но с разными энергиями. В практике радиационной защиты предложены различные уточняющие коэффициенты ОБЭ, при этом полагают, что независимо от типа излучения биологический эффект будет одинаков, если одинакова эквивалентная доза, т.е. произведение поглощенной дозы на уточняющий коэффициент. В частности, одним из таких коэффициентов является фактор качества, который связан с ЛПЭ функциональной зависимостью. Согласно рекомендациям международных комиссий фотонное излучение считается излучением с низким значением ЛПЭ, и его ОБЭ принимается равным единице независимо от его энергии. Однако в процессе прохождения высокоэнергетичного излучения через биологические ткани образуются потоки ионизирующих излучений, ЛПЭ которых лежит в широких пределах. Обычно считается, что вклад продуктов фотоядерных реакций в погло-



ценную дозу незначителен, однако вследствие высоких значений ЛПЭ вклад в эквивалентную дозу может быть весьма весом. Особенно ярко, как показано в предыдущих работах [1], этот эффект проявляется при прохождении фотонов через тонкие слои облучаемого вещества, что соответствует практике радиобиологических экспериментов.

До настоящего времени к проблеме оценки биологической эффективности с помощью методов компьютерного моделирования получили развитие два подхода. В первом подходе оценивались только энергетические спектры фотонного излучения (для этого использовались хорошо известные программные коды линейек MCNP [2], EGS [3] и некоторые другие [4–7], разрабатываемые под каждый конкретный проект), вклад продуктов в поглощенную дозу оценивался «вручную» с помощью табличных значений сечений фотоядерных реакций и таблиц линейных коэффициентов ослабления и поглощения фотонного излучения. Данный подход позволяет определить средние значения ЛПЭ всех образовавшихся частиц, если известны сечения соответствующих реакций, однако весьма трудоемок и его погрешность велика. В случае аналитических расчетов велики погрешности, вносимые как аналитическими методами расчета, так и приближениями, согласно которым в любой точке облучаемой ткани наблюдается равновесие заряженных частиц.

Второй подход основан на вычислении усредненных микродозиметрических характеристик, таких как линейная и удельная энергия. Данный подход имеет то преимущество, что позволяет экспериментально проверить полученные величины, а его недостатком является расчет конечных величин по усредненным значениям. В результате определяются микродозиметрические характеристики в некоторой точке пространства, определяется функциональная зависимость от поглощенной дозы и производится свертка с так называемой биологической функцией, полученной в радиобиологических экспериментах. Однако к настоящему времени данный подход реализован только в расчетах с помощью программного кода на основе EGS [8], который позволяет учитывать только такие частицы, как фотоны, электроны и позитроны, и не позволяет учитывать вклад продуктов фотоядерных реакций. Основные направления исследования биологической эффективности различных видов ионизирующих излучений со-

гласно логике второго подхода сосредоточены в области моделирования полной клеточной структуры. Здесь существует некая разновидность, а именно разработан программный комплекс на основе кода GEANT4 (проект GEANT4-DNA [9–10]), который является готовым продуктом, не требующим от пользователя освоения пакета GEANT4. Однако в данном продукте (GEANT4-DNA) возможно моделирование процесса транспорта частиц только в водной среде и только некоторых частиц: фотонов, электронов протонов и альфа-частиц, причем в качестве вторичных частиц могут образовываться только фотоны, электроны и позитроны. Кроме того, невозможно симулировать процесс облучения масштабных фантомов, моделирующих биологическую ткань, а только отдельные клетки.

Целью настоящего исследования является определение линейной передачи энергии всех типов частиц, индуцированных фотонным излучением в биологических тканях, и расчет связанных с этой величиной характеристик: эквивалентной дозы и, в конечном итоге, фактора качества фотонного излучения различных энергий при облучении слоев различной толщины.

## 1. Материалы и методы

Для достижения поставленной цели решаются следующие задачи:

- 1) моделирование транспорта монохроматического фотонного излучения через изучаемый объект с заданной геометрией и элементным составом;
- 2) трассировка всех видов вторичных частиц, образовавшихся в слое, и определение значений их ЛПЭ;
- 3) определение поглощенной энергии, создаваемой в тонком слое каждой частицей, и расчет суммарной поглощенной слоем дозы;
- 4) определение биологической эффективности каждой частицы с определенным значением ЛПЭ и расчет суммарной эквивалентной дозы в слое;
- 5) расчет среднего значения фактора качества фотонного излучения.

Задача решается методом компьютерного моделирования с помощью программного кода GEANT4 [11–12], используемого для задач прохождения ионизирующего излучения через вещество методом Монте–Карло. GEANT4 представляет собой набор инструментов и библиотек языка программирования C++, не являясь готовым продуктом. Пользователю необходимо



самому написать программу, для чего требуется создать геометрию детектора, параметры пучка, физическую модель процессов и организовать возможность накопления и вывода данных. Для этих целей существуют как готовые классы, так и предоставлена возможность их модифицирования и создания новых. Благодаря гибкости кода GEANT4 применяется для решения широкого круга задач в ядерной, ускорительной физике, в том числе и в медицине.

В настоящей работе расчеты основываются на применении физической модели QGSP\_BIC, которая в дополнение к стандартным электромагнитным взаимодействиям описывает также адронные, т.е. взаимодействие протонов, нейтронов, пи- и К-мезонов, а также тяжелых ядер, с учетом вторичных частиц. Среди прочих эта модель оптимальным образом подходит для медицинских задач при энергиях пучка до 200 МэВ и рекомендована к применению.

Геометрия задачи моделирует реальные радиобиологические эксперименты и реализована следующим образом. Облучаемый слой воды переменной толщины, расположенный на подложке из полиметилметакрилата, облучается широким пучком фотонов для обеспечения поперечного электронного равновесия. Исследуемый слой определяется как чувствительный детектор (Sensitive Detector) и для каждого срабатывания детектора (hit), которое происходит при любом виде взаимодействия любой частицы в назначенном объеме, определяется длина шага (Step), который вызвал срабатывание. В конце каждого шага определяется энергия (TotalEnergyDeposit), выделившаяся в результате взаимодействия, причем не для всех видов взаимодействия эта величина отлична от нуля. ЛПЭ определяется как отношение выделившейся энергии к длине шага, выражается в единицах кэВ/мкм. Поскольку не вся выделившаяся энергия поглощается веществом, в счетчиках не учитываются процессы, в которых частица теряет энергию на образование вторичного тормозного излучения. Поскольку плотность всего объекта однородна, а поглощенная доза есть отношение поглощенной энергии к массе слоя, то, следовательно, можно оперировать понятием поглощенной энергии, которая будет выражать поглощенную дозу в некоторых условных единицах.

Для вычисления фактора качества используются два подхода. Согласно первому из них для каждой частицы, испытавшей взаимодей-

ствие в облучаемом слое, рассчитывается значение поглощенной энергии и линейной передачи энергии. Средний фактор качества рассчитывается согласно выражению

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_i D_i Q(L_i)}{\sum_i D_i}, \quad (1)$$

где  $D_i$  – поглощенная в результате  $i$ -го взаимодействия поглощенная доза, а  $Q(L_i)$  – коэффициент качества частицы, испытавшей данное взаимодействие, рассчитанный исходя из значения ЛПЭ. Данный подход тесно связан с микродозиметрическим определением коэффициента (фактора) качества, однако не зависит от выбора размеров объема, в котором определяются микродозиметрические величины, что приводит к некоторому усреднению результата и слабой применимости подхода в области малых доз. С другой стороны, он отличается большей точностью от второго подхода, симулирующего радиобиологические эксперименты, в которых результаты наблюдений усредняются по большому количеству клеток. На этом основании многие радиобиологи считают возможным использовать значения ЛПЭ, усредненные не по поглощенным дозам, а по количеству частиц. При таком подходе вычисляется среднее значение ЛПЭ по всем актам взаимодействия

$$\langle L \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L_i, \quad (2)$$

а затем по средним ЛПЭ определяется коэффициент качества. Для расчета фактора качества ( $Q$ ) используется следующая зависимость от значений ЛПЭ ( $L$ ), рекомендованная МКРЗ в 92-й публикации [13]:

$$Q(L) = \begin{cases} 1, & L < 10 \text{ кэВ} / \text{мкм}, \\ 0.32L^{-2.2}, & 10 \leq L \leq 100 \text{ кэВ} / \text{мкм}, \\ 300 / \sqrt{L}, & L > 100 \text{ кэВ} / \text{мкм}. \end{cases} \quad (3)$$

Исходя из выражения (3), второй подход должен приводить к меньшим значениям фактора качества при облучении протяженных объектов, т.е. там, где велико количество взаимодействия тех частиц, которые обладают низкими значениями ЛПЭ, т.е. электронов. Однако при этом не учитывается, что выделяются различные энергии, и тем самым плотность ионизации вокруг точек, в которых произошли события больше, а следовательно, больше биологический эффект.



## 2. Результаты и их обсуждение

На рис. 1 и 2 представлена зависимость фактора качества фотонов от их энергии для двух разных толщин слоя – 0.1 мм (рис. 1) и 10 мм (рис. 2), рассчитанного по формулам (1) и (2):

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_i D_i Q(L_i)}{\sum_i D_i},$$

где  $i$  – каждое событие;  $Q(\langle L \rangle)$  – по среднему значению ЛПЭ. Эти значения моделируют два крайних варианта радиобиологических экспериментов: облучения монослоя клеток и раствора клеток в питательной среде.

При энергиях выше 10 МэВ сечение фото-ядерных реакций становится достаточным, чтобы образовавшиеся частицы и ядра с высокими

значениями ЛПЭ повлияли на оценку фактора качества. Максимальное значение приходится на энергии фотонов около 25 МэВ, что соответствует максимальным сечениям фотоядерных реакций в области гигантского дипольного резонанса на легких ядрах. При энергиях свыше 25 МэВ фактор качества, рассчитанный по усредненным значениям ЛПЭ, существенно (в 3–4) меньше определенного в рамках другого подхода.

Для слоя 0.1 мм (см. рис. 1) фактор качества, посчитанный первым способом, достигает значения 16, для второго – 12. Оба значения соответствуют энергии ~26 МэВ. Для более толстого слоя в 10 мм (см. рис. 2) значения фактора качества не так высоки и составляют 4 для первого способа и энергии 26 МэВ и 3 для второго способа и энергии 23 МэВ.

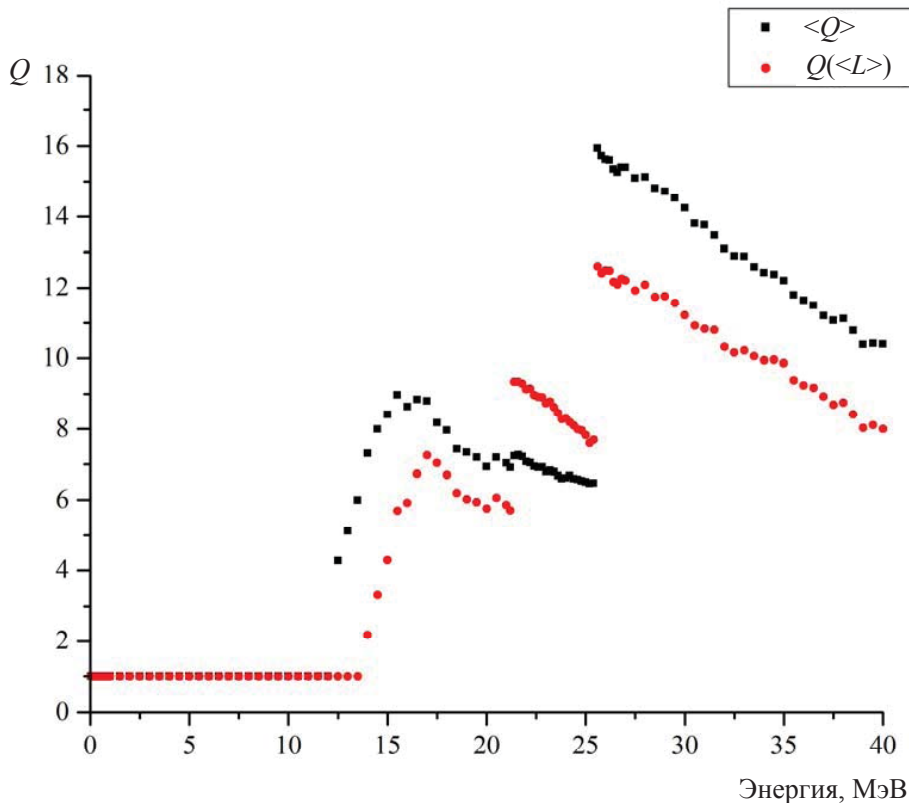


Рис. 1. Зависимость фактора качества фотонов от их энергии для толщины слоя 0.1 мм

Для толстых слоев, в которых существенно взаимодействие вторичных электронов, наблюдается описанная выше тенденция:  $\langle Q \rangle$  больше, чем  $Q(\langle L \rangle)$ , однако для тонких слоев, в диапазоне энергий 20–25 МэВ, ситуация обратная. По нашему мнению, данная ситуация связана со следующими обстоятельствами: в данной об-

ласти энергий, которая примерно соответствует максимуму гигантского дипольного резонанса, количество актов взаимодействия электронов с низкими значениями ЛПЭ, много меньше, чем тяжелых заряженных частиц. Таким образом, среднее значение ЛПЭ смещается в область максимума функции  $Q(L)$  (см. формулу (3)).



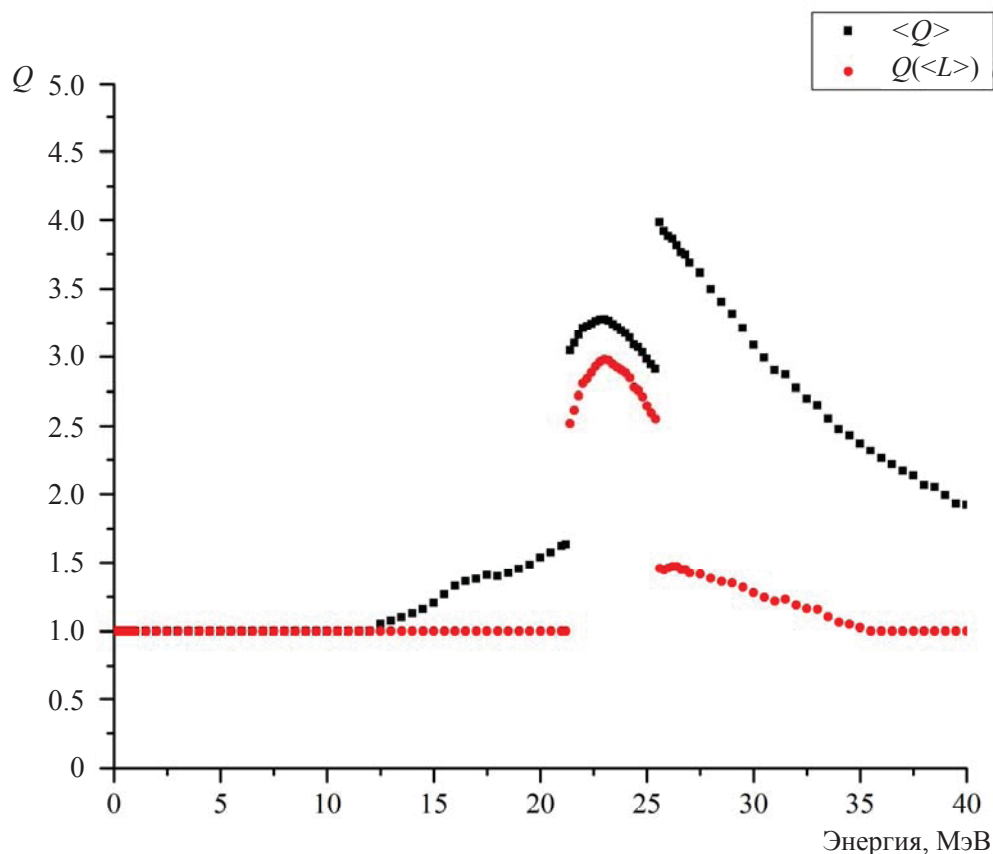


Рис. 2. Зависимость фактора качества фотонов от их энергии для толщины слоя 10 мм

### Заключение

В работе методом компьютерного моделирования исследован процесс транспорта монохроматического фотонного излучения через объекты, моделирующие биологические структуры при проведении экспериментов по определению относительной биологической эффективности. Определены значения линейной передачи энергии всех типов излучений, индуцированных в облучаемом объекте. Исследована энергетическая зависимость фактора качества, рассчитанная в рамках следующих моделей: по среднему значению ЛПЭ всех частиц, по распределению ЛПЭ для каждой частицы. Показано, что в рассматриваемых слоях в результате образования тяжелых частиц с высоким значением ЛПЭ фактор качества фотонов существенно (в 3–15 раз в зависимости от толщины слоя) отличается от рекомендованного для фотонов значения, равного 1. Результаты вычислений свидетельствуют о сильной зависимости фактора качества как от толщины облучаемого объекта, так и от способа определения.

### Список литературы

1. *Belousov A., Bliznyuk U., Chernyaev A.* Evaluation of the average weighting factor in thin layer irradiation by bremsstrahlung // *Biomedicine and Biotechnology*. 2014. Vol. 2, №. 4. P. 80–84.
2. *Gudowska I., Brahme A., Andreo P., Gudowska I., Brahme A., Andreo P., Gudowski W., Kierkegaard J.* Calculation of absorbed dose and biological effectiveness from photonuclear reactions in a bremsstrahlung beams of end point 50 MeV // *Phys. Med. Biol.* 1999. Vol. 44. P. 2099–2125.
3. *Kawrakow I.* Accurate condensed history Monte Carlo simulation of electron transport. I. EGSnrc, the new EGS4 version // *Med. Phys.* 2000. Vol. 27. P. 485.
4. *Sätherberg A., Johansson L.* Photonuclear production in tissue for different 50 MV bremsstrahlung beams // *Med. Phys.* 1998. Vol. 25. P. 683.
5. *Stewart R. D., Wilson W. E., McDonald J. C., Strom D. J.* Microdosimetric properties of ionizing electrons in water: a test of the PENELOPE code system // *Phys. Med. Biol.* 2002. Vol. 47. P. 79–88.
6. *Tunga C. J., Liua C. S., Wangc S. L., Changa J. P.* Calculations of cellular microdosimetry parameters for alpha particles and electrons // *Applied Radiation and Isotopes*. 2004. Vol. 61. P. 739–743.



7. Hsial Y., Stewart R. D. Monte Carlo simulation of DNA damage induction by x-rays and selected radioisotopes // *Phys. Med. Biol.* 2008. Vol. 53. P. 233–244.
8. Verhaegen F., Castellano I. A. Microdosimetric characterisation of 28 kV Mo/Mo, Rh/Rh, Rh/Al, W/Rh and Mo/Rh mammography X ray spectra // *Radiation Protection Dosimetry.* 2002. Vol. 99, №. 1–4. P. 393–396.
9. Karamitros M., Incerti S., Champion C. The Geant4-DNA project // *Rad. Onc.* 2012. March. Vol. 102. Suppl. 1. P. S191–S192.
10. Incerti S., Ivanchenko A., Karamitros M., Incerti S., Ivanchenko A., Karamitros M., Mantero A., Moretto P., Tran H. N., Mascialino B., Champion C., Ivanchenko V. N., Bernal M. A., Francis Z., Villagrasa C., Baldacchino G., Guèye P., Capra R., Nieminen P., Zacharotou C. Comparison of Geant4 very low energy cross section models with experimental data in water // *Med. Phys.* 2010. Vol. 37. P. 4692–4708.
11. Agostinelli S., Allison J., Amako K., Apostolakis J., Araujo H., Arce P., Asai M., Axen D., Banerjee S., Barrand G., Behner F., Bellagamba L., Boudreau J., Broglia L., Brunengo A., Burkhardt H., Chauvie S., Chuma J., Chytraccek R., Cooperman G., Cosmo G., Degtyarenko P., Dell'Acqua A., Depaola G., Dietrich D., Enami R., Feliciello A., Ferguson C., Fesefeldt H., Folger G., Foppiano F., Forti A., Garelli S., Giani S., Giannitrapani R., Gibin D., Gómez Cadenas J. J., González I., Gracia Abril G., Greeniaus G., Greiner W., Grichine V., Grossheim A., Guatelli S., Gumplinger P., Hamatsu R., Hashimoto K., Hasui H., Heikkinen A., Howard A., Ivanchenko V., Johnson A., Jones F. W., Kallenbach J., Kanaya N., Kawabata M., Kawabata Y., Kawaguti M., Kelner S., Kent P., Kimura A., Kodama T., Kokoulin R., Kossov M., Kurashige H., Lamanna E., Lampén T., Lara V., Lefebure V., Lei F., Liendl M., Lockman W., Longo F., Magni S., Maire M., Medernach E., Minamimoto K., Mora de Freitas P., Morita Y., Murakami K., Nagamatu M., Nartallo R., Nieminen P., Nishimura T., Ohtsubo K., Okamura M., O'Neale S., Oohata Y., Paech K., Perl J., Pfeiffer A., Pia M. G., Ranjard F., Rybin A., Sadilov S., Di Salvo E., Santin G., Sasaki T., Savvas N., Sawada Y., Scherer S., Sei S., Sirotenko V., Smith D., Starkov N., Stoecker H., Sulkimo J., Takahata M., Tanaka S., Tcherniaev E., Safai Tehrani E., Tropeano M., Truscott P., Uno H., Urban L., Urban P., Verderi M., Walkden A., Wander W., Weber H., Wellisch J. P., Wenaus T., Williams D. C., Wright D., Yamada T., Yoshida H., Zschesche D. Geant4 – A Simulation Toolkit // *Nuclear Instruments and Methods A.* 2003. Vol. 506. P. 250–303.
12. Allison J., Amako K., Apostolakis J., Araujo H., Arce P., Asai M., Barrand G., Capra R., Chauvie S., Chytraccek R., Cirrone G. A. P., Cooperman G., Cosmo G., Cuttone G., Daquino G. G., Donszelmann M., Dressel M., Folger G., Foppiano F., Generowicz J., Grichine V., Guatelli S., Gumplinger P., Heikkinen A., Hrivnacova I., Howard A., Incerti S., Ivanchenko V., Johnson T., Jones F., Koi T., Kokoulin R., Kossov M., Kurashige H., Lara V., Larsson S., Lei F., Link O., Longo F., Maire M., Mantero A., Mascialino B., McLaren I., Mendez Lorenzo P., Minamimoto K., Murakami K., Nieminen P., Pandola L., Parlati S., Peralta L., Perl J., Pfeiffer A., Pia M. G., Ribon A., Rodrigues P., Russo G., Sadilov S., Santin G., Sasaki T., Smith D., Starkov N., Tanaka S., Tcherniaev E., Tome B., Trindade A., Truscott P., Urban L., Verderi M., Walkden A., Wellisch J. P., Williams D. C., Wright D., Yoshida H. Geant4 Developments and Applications // *IEEE Transactions on Nuclear Science.* 2006. Vol. 53, № 1. P. 270–278.
13. Relative Biological Effectiveness (RBE). Quality Factor (Q), and Radiation Weighting Factor ( $W_R$ ). ICRP Publication 92 // *Annals of ICRP.* 2003. Vol. 33, № 4.



# ИЗ ИСТОРИИ ФИЗИКИ. К 120-ЛЕТИЮ СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ АКАДЕМИКА Н. Н. СЕМЁНОВА

УДК 53(091), 53(092)

## НИКОЛАЙ НИКОЛАЕВИЧ СЕМЁНОВ: ВОЛЖСКИЕ СЮЖЕТЫ ЖИЗНИ

В. М. Аникин, Д. А. Усанов

Саратовский национальный исследовательский государственный университет  
имени Н. Г. Чернышевского  
E-mail: AnikinVM@info.sgu.ru

Освещаются эпизоды биографии академика АН СССР, лауреата Нобелевской премии по химии Николая Николаевича Семёнова, связанные с его пребыванием на волжской земле.  
**Ключевые слова:** академик Н. Н. Семёнов, Саратов, Саратовский университет.

**Nikolai N. Semenov: Volga-Region Themes of the Life**

V. M. Anikin, D. A. Usanov

Some pages of the biography of Nikolai N. Semenov, Academician, Nobel Prize for Chemistry, connected to Volga-region period of his life, are described.

**Key words:** Academician Nikolai N. Semenov, Saratov, Saratov University.

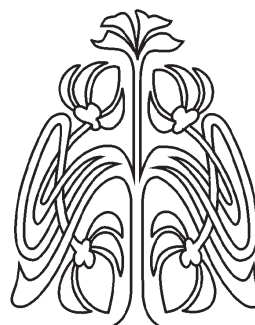
DOI: 10.18500/1817-3020-2016-16-2-109-121

Николай Николаевич Семёнов – единственный отечественный лауреат Нобелевской премии по химии, академик, один из основных создателей нового научного направления – химическая физика, крупный организатор научных исследований в нашей стране в области химической физики и химической кинетики в 1920–1980 гг., участник советского Атомного проекта, уроженец города Саратова. Еще при жизни Семёнова неподалеку от Саратовского государственного университета имени Н. Г. Чернышевского, при пересечении улиц Астраханской и Вавилова, был установлен бюст Николая Николаевича как дважды Героя Социалистического Труда СССР.

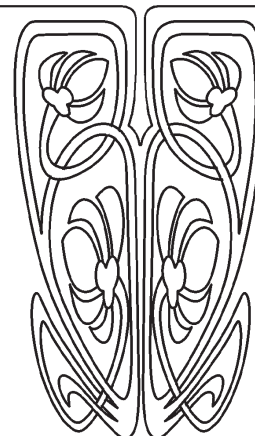
Страницы его биографии, связанные с пребыванием на волжской земле, воссоздают его личные воспоминания [1], воспоминания его родных, друзей, учеников, коллег по работе [2], всех тех, кто запомнил его, – гениального и мудрого, простого в общении и доброжелательного, ироничного и снисходительного...

### Начало биографии

В Саратов семья Семёновых приехала в 1895 г. из Царского Села после отставки главы семьи Николая Александровича с военной службы (по желанию жены Елены Александровны). В Саратове Н. А. Семёнов, которому было пожаловано личное дворянство, получил место помощника делопроизводителя Саратовского удельного



ПРИЛОЖЕНИЯ





округа<sup>1</sup>. Собственно, вопрос «трудоустройства» (гражданской службы) и привел Семёновых в Саратов. Елена Александровна была интеллигентной и образованной женщиной, окончила Высшие женские (Бестужевские) курсы в Петербурге, преподавала математику. Ее отец был Царскосельским служащим<sup>2</sup>.

3(15) апреля 1896 г. у Семёновых в Саратове родился первенец, которого назвали Николаем. В. И. Вардугин в своей книге «Тайна огня» [3, с. 4] сообщает такую подробность: на крестины мальчика приехали родители Елены Александровны – Вера Николаевна и Александр Дмитриевич Дмитриевы, а также друг семьи Дмитриевых по Царскому Селу Николай Николаевич Бер<sup>3</sup>.

<sup>1</sup> В справке Государственного архива Саратовской области говорится (см.: [http://saratov.rusarchives.ru/putgaso/0006/f\\_\\_1211\\_.htm](http://saratov.rusarchives.ru/putgaso/0006/f__1211_.htm)): «Удельный округ – административно-территориальная единица удельного управления России. Саратовский удельный округ был создан в числе других 12 удельных округов высочайше утвержденным указом от 26.12.1892 о переименовании Департамента уделов в Главное управление уделов. Во главе удельного округа стояло Управление удельного округа, наделенное административно-хозяйственными функциями. Удельный округ охватывал своей деятельностью несколько губерний, его территория делилась на удельные имения, возглавляемые управляющими, при которых состояли письмоводители. В состав Саратовского удельного округа входило 19 удельных имений, делившихся на лесокультурные участки.

Управление удельного округа руководило сельским хозяйством: выведением новых сельскохозяйственных культур, новых пород в животноводстве, разведением лесов, а также развитием сельскохозяйственных промыслов, строительством заводов и фабрик для переработки сельскохозяйственной продукции и обработки леса. На территории удельного округа существовали сахарные, винные, ткацкие, бумажные, деревообделочные предприятия и действовали училища и ремесленные заведения для крестьян, работавших в удельных округах.

В октябре 1908 года Управление Саратовского удельного округа было ликвидировано. Удельные имения, входившие в его состав, перешли в ведение Симбирского и Самарского удельных округов. Удельные округа ликвидированы постановлением Временного правительства от 14.04.1917».

<sup>2</sup> В списке жителей Царского Села за 1874–1877 годы можно найти такие сведения:

«Дмитриев Александр Дмитриевич –

1874 – коллежский советник, письмоводитель городской полиции в Царском Селе.

1875 – титулярный советник, письмоводитель городской полиции в Царском Селе.

1877 – титулярный советник, письмоводитель городской полиции в Царском Селе».

(см.: Жители Царского Села. URL: <http://pushkin-history.info/zhiteli-ts.s..html> (дата обращения: 16.05.2016). Далее в Табели о рангах следовал чин «Коллежский асессор», который присваивался после трех лет службы в предыдущем звании. Личное дворянство давал чин титулярного советника.

<sup>3</sup> В названном перечне жителей Царского Села имеется такая запись: «Бер Николай Николаевич, действительный статский советник. Главное Управление уделов. Московская улица, дом Мясникова» (см.: <http://pushkin-history.info/zhiteli-ts.s..html>).



Елена Александровна Семёнова с сыном.  
1897 год [2]



Крестный отец Коли Семёнова – его тёзка  
Николай Николаевич Бер

Приезд Бера в Саратов отчасти можно объяснить и «тягой к родным местам»: его отец несколько лет прослужил здесь, да и он в Саратове родился в 1844 г. После военной службы Н. Н. Бер сделал «внушительную» карьеру. С 1888 г. он занимал пост чиновника особых поручений при министре императорского двора и уделов, будучи действительным статским





советником, а с 1901 г. – пост шталмейстера с титулом тайного советника<sup>4</sup>.

Через год, в 1897 г., семья Семёновых переехала из Саратова в большое село Широкий Буерак в связи с тем, что Н. А. Семёнов получил должность управляющего Вольским удельным имением. А с 1906 г. семья Семёновых уже жила на два дома – в Широким Буераке и Вольске, поскольку Николай поступил в Вольское реальное училище (к шести годам он свободно читал и научился писать). Отец постоянно оставался в селе по долгу службы, а мать и дети (в 1898 г. родилась сестра Николая Ксения) обосновались в городе Вольске. Естественно, время для семьи Семёновых делилось между прекрасным двухэтажным домом с садом в Широким Буераке и съёмной «зимней квартирой» в Вольске. Достаточно подробно об этих годах жизни Семёновых рассказывается в книге В. И. Вардугина «Тайна огня» [3].

Реальное училище, открытое в Вольске в 1875 г., размещалось в просторном, с литыми чугунными лестницами доме купца Алексея Николаевича Сапожникова на Садовой улице, которому принадлежал и великолепный сад напротив дома, где в оранжереях выращивались лимоны и апельсины, росли редкие для наших

широт деревья. Наследники А. Н. Сапожникова в 1854 г. подарили дом и сад городу. Попечителем Вольского реального училища в течение десятилетнего периода, предшествовавшего поступлению в него юного Николая Семёнова, был граф Анатолий Дмитриевич Нессельроде, владевший имением Царевщина в Вольском уезде и известным саратовцам двухэтажным домом на пересечении Московской и Комсомольской (бывшей Приютской) улиц.

Нужно признать, что реальному училищу в Вольске повезло на талантливых учеников. До Николая Николаевича Семёнова в училище обучался Порфирий Иванович Бахметьев (1860–1913), русский физик и биолог, открывший явление анабиоза, а в 1918 г. училище окончил Борис Петрович Токин (1900–1984), биолог, создатель учения о фитонцидах (им и предложен сам термин).

Здание Вольского реального училища таким, каким оно, вероятно, выглядело при Семёнове, изображено на дореволюционной открытке. В наши дни памятная доска на стене Вольской школы № 16 отмечает его знаменитых учеников.

В период обучения в Вольском реальном училище Н. Н. Семёнов «заразился» химией. Впоследствии он вспоминал [1, с. 533]:

*«Еще в пятом классе я увлекся химией. Один и с товарищами, дома и во дворе, я делал различные простые химические опыты. У нас был неплохой преподаватель химии, но он никогда не старался понять устремления учеников. И хотя он дал мне возможность ставить опыты в школьном кабинете, больше он мной не занимался.»*

<sup>4</sup> В мае 1896 г., спустя месяц после посещения Саратова, Н. Н. Бер занимался подготовкой народного гулянья на Ходынском поле по случаю коронации Николая II. Причастность к ходынской трагедии не могла не сказаться на нем, хотя главным распорядителем коронационных торжеств был московский генерал-губернатор великий князь Сергей Александрович. Бер скончался в своей усадьбе в Рязанской губернии в 1904 году «от припадка сердечной астмы».



Вольское реальное училище. Начало XX века



*Я обратился к книгам. Беспорядочно читал все, что мог достать: учебники высшей школы, различные научно-популярные книги. Интерес к науке все возрастал, но вместе с тем я приходил в отчаяние: один я не мог переварить прочитанный материал.*

*Я чувствовал, что главная беда в том, что не знаю физики. Смутно сознавал я, что без нее невозможно понять химические явления. Но физику у нас преподавал учитель, которому наука была глубоко безразлична: человек болезненный и какой-то несчастный, видимо, задавленный многолетней нуждой. У него никогда не выходил ни один опыт, физику мы учили кое-как по учебнику и считали ее скучнейшим предметом».*

Книгами по химии Николаю помогали родственники из Петербурга. Самодельные опыты и взрывы, сопровождавшие их, велись непрерывно и в Вольске, и в Широким Буераке...

#### **Самарское реальное училище. «Домашний университет»**

В 1910 г. Н. А. Семёнов получил назначение на должность ревизора Самарского удельного округа, и семья переехала в Самару. В фондах Центрального государственного архива Самарской области сохранилось прошение коллежского советника Н. А. Семёнова на имя директора Самарского реального училища о переводе сына его Николая из Вольского реального училища в Самарское [4]. В общей ведомости учеников Самарского реального училища на 1911–1912 учебный год Семёнов Н. Н., «сын чиновника, рожденный 3 апреля 1896 г.», значится учащимся 6-го класса [4]. В Самаре Семёновы

поселились на улице Саратовской (ныне Фрунзе) в доме № 140, позднее переехали в дом Курлина на улице Троицкой (ныне Галактионовская) [4]. Близким другом Николая в Самаре станет его одноклассник Петр Сидоров, который впоследствии женится на его сестре Ксении.

Буквально перед поступлением Семёнова в училище, в 1909 г., его здание было реконструировано на средства семьи Субботиных (функционировало же оно с 1880 г.). Здание приобрело облик, который сделал его культурно-исторической достопримечательностью Самары. Были пристроены новые учебный и жилой корпуса с квартирами для педагогов. В училище располагались 14 основных и параллельных классов, химическая лаборатория, естественно-исторический кабинет, классы музыкальные и рисования, библиотека с большим количеством книг. По своим размерам, оборудованию, постановке учебного дела реальное училище заметно выделялось среди других учебных заведений Самары. В 1910 г. число учащихся в нем достигло 546 чел., в 1913–1914 годах – 620 чел.<sup>5</sup> Среди них основную массу составляли выходцы из «низших сословий» (мещане, крестьяне) – 73.3%. Учились и потомственные дворяне (3.3%). В 1897–1901 гг. в Самарском реальном училище обучался будущий писатель, граф Алексей Николаевич Толстой. Еще раньше, в 1889 г., училище с отличием окончил Глеб Максимилианович Кржижановский, с именем которого прежде всего ассоциируется план электрификации России 20-х годов двадцатого столетия (план ГОЭЛРО).

<sup>5</sup> URL: [https://ru.wikipedia.org/wiki/Самарское\\_реальное\\_училище](https://ru.wikipedia.org/wiki/Самарское_реальное_училище).



Здание Самарского реального училища после реконструкции в 1909 году



Самарский период для молодого Семёнова ознаменовался не только завершением обучения в реальном училище, но и знакомством с человеком, значительно определившим его дальнейшую судьбу или, по крайней мере, утвердившим его в выборе дальнейшего жизненного пути.

Для сравнения обратим внимание на аналогичную ситуацию, имевшую место в биографии другого российского научного корифея – Петра Николаевича Лебедева, основателя первой российской физической научной школы мирового уровня, гениального экспериментатора, доказавшего существование светового давления. Интересом к физике Лебедева «зажег» военный инженер-электротехник Александр Николаевич Бекнев, друг семьи Лебедевых, показавший 12-летнему Пете Лебедеву некоторые домашние опыты с электричеством.

Для Николая Семёнова роль «Бекнева» сыграл Владимир Иванович Кармилов, молодой преподаватель физики Самарского реального училища. Родом из Аткарского уезда Саратовской губернии, сын многодетного сельского учителя, Кармилов в 1912 г. окончил с отличием физико-математический факультет Казанского университета. Он был направлен в Самару «по распределению», поскольку учился в университете на казенный кошт. Подробно о В. И. Кармилове, учителе и друге Н. Н. Семёнова, физике-инноваторе в области магнитобиологии и магнитотерапии, рассказано в [5]. Отметим только, что в дополнение к школьным занятиям Кармилов организовал для реалистов «домашний университет», собрания которого, как правило, проходили в доме у Семёновых, где у Николая была оборудована специальная комната для проведения химических и физических опытов. Об этих занятиях физикой Семёнов вспоминал так [1, с. 533, 534]:

*«... В один прекрасный день к нам в класс вошел новый преподаватель. Маленького роста, с круглым лицом, с голубыми мечтательными глазами. Это был наш новый учитель физики Владимир Иванович Кармилов. Он недавно окончил Казанский университет, был очень молод и скромно до застенчивости.*

*Надо напомнить, что дело происходило в начале века, а это было время настоящей революции в физике. Именно тогда закладывались основы великолепного здания современной физики, были открыты новые теории, которые произвели переворот в тогдашней науке.*

*Наш новый учитель начал свои занятия с того, что ввел нас в курс всех этих новых учений. Мы учились в седьмом классе (всего в реальном*



В. И. Кармилов. 1912 год  
(впервые опубликовано в [3])

*училище было семь классов). Перед нами открылся новый увлекательный мир науки, пусть туманный и малопонятный, но вызывающий горячее стремление проникнуть в него и овладеть им. Ожил для нас старый учебник физики, и предмет, считавшийся самым скучным из всех школьных предметов, сразу стал самым интересным. На его уроках всегда была полная тишина – нет дисциплины крепче, чем та, что держится на любви и уважении.*

*Школьная программа стала для нас тесна. Урок не вмещал всех вопросов, которые нас интересовали. И у нас родилась мысль собираться для изучения этих вопросов вне школы. Собственно говоря, это был кружок, но мы называли его «домашний университет». Мы готовили и обсуждали различные доклады по физике, химии, астрономии, биологии. Собирались чаще всего у меня.*

*Конечно, душой всего этого был Владимир Иванович. Он пробудил у ребят живой и горячий интерес к науке. Я твердо решил посвятить ей свою жизнь, поступить в университет, изучить физику и математику, чтобы в дальнейшем применить их к химии».*

Блестяще (с занесением на «золотую доску») окончив реальное училище в 1913 г., Семёнов летом того же года поступил на физико-математический факультет Петербургского университета. Это было вполне осознанное решение. Еще в





опросном листе учеников 7-го класса Самарского реального училища Н. Семёнов значится единственным из всего выпуска, изъявившим желание поступить в Петербургский университет [4]. В архивах сохранились его аттестат и свидетельство, дающие право «*поступить в высшие учебные заведения с соблюдением правил, изложенных в уставах оных, по принадлежности*» [4]. Таким правилом для университетов было знание латинского языка, изучавшегося только в гимназиях. Твёрдое стремление учиться в столичном университете позволило Семёнову (не без помощи Кармилова) преодолеть этот «языковой» барьер: подготовившись за короткий срок, он сдал недостающий экзамен по древнему языку при 1-й мужской Самарской гимназии.

Дружба и взаимопомощь сохранятся у Н. Н. Семёнова и В. И. Кармилова на всю жизнь. Летом 1914 года, в канун Первой мировой войны, они вместе совершили поездку на Алтай

[3], после которой они сфотографировались в Самаре. В военные годы семья Семёнова, по свидетельству его дочери Л. Н. Семёновой, будет жить в Перми у Кармилова [2, с. 208], где тот обоснуется с начала 20-х годов, работая доцентом Пермского государственного университета, а затем и Пермского медицинского института. Здесь развернется его научная деятельность в области магнитологии и магнитотерапии. А в Институте химической физики, организованном Н. Н. Семёновым, будет работать целая династия Кармиловых [5]. «Отец, – сообщила В. И. Вардугину его дочь Людмила Владимировна в содержательном письме от 5 сентября 1983 г., – поддерживал постоянный контакт с Николаем Николаевичем до конца своей жизни. Отношения их были теплыми и дружественными. Папа относился к Николаю Николаевичу с огромной любовью, всегда восхищался им как ученым, человеком, другом».



Н. Н. Семёнов (слева) и В. И. Кармилов.  
Самара, 1914 год [2, 3]

#### **Всесоюзный съезд физиков, 1928 год**

В 1928 г. Н. Н. Семёнов как участник VI Всесоюзного съезда физиков с широким международным представительством приехал в Саратов уже зрелым ученым. За его плечами была двухлетняя работа в вузах Томска – в университете и технологическом институте, откуда он вернулся в Петроград по приглашению А. Ф. Иоффе (у Абрама Федоровича он начал заниматься научной работой еще будучи студентом второго курса); работа под руководством академика А. Ф. Иоффе в Государственном физико-техническом рентгеновском институте и Физико-техническом институте; совместные

исследования с П. Л. Капицей (дружба Семёнова и Капицы нашла художественное отражение в их совместном портрете, написанном художником Б. М. Кустодиевым в 1921 г.). К съезду физиков Семёнов «пришел» и как создатель теорий цепных разветвлённых реакций, горения и взрывов, принесших ему в скором времени мировую славу. На съезде Н. Н. Семёнов представил доклад «Die Theorie der explosiven Gasreaktionen» (название дается по статье [7], в которой Макс Борн подробно осветил ход физического съезда).

Съезд был «передвижным»: проведя 5–9 августа 1928 г. заседания в Москве, его участники добрались на поезде до Нижнего Новгорода, где





провели заседание 10 августа, а затем на пароходе «Алексей Рыков» посетили (опять же с научными выступлениями) Казань (11 августа) и Саратов (15 августа). По пути в Саратов проплыли и мимо тех мест, где Семёнов провел свое детство. В Большой физической аудитории третьего корпуса Саратовского университета, построенного в 1914 г. как Физический институт, состоялось заключительное заседание съезда [8, 9].

Отличительной особенностью съезда физиков 1928 г. являлось участие в нем выдающихся ученых, что дело его особенно ценным в плане знакомства «из первых уст» с современными на то время проблемами физики. Пять участников съезда впоследствии получили Нобелевские премии: в 1934 г. – Поль Дирак («за разработки новых, перспективных форм атомной теории»<sup>6</sup>), в 1936 г. – Петер Дебай («за вклад, который он внес в наши знания о структуре молекул своими исследованиями дипольных моментов, а также дифракции рентгеновских лучей и электронов в газах»), в 1954 г. – Макс Борн («за фундаментальные работы в области квантовой механики и, прежде всего за статистическую интерпретацию волновых функций»), в 1956 г. – Николай Николаевич Семёнов («за исследования механизма химических реакций»), в 1962 г. – Лев Давыдович Ландау («за пионерскую теорию конденсированных сред, прежде всего жидкого гелия»). В 1934 г. Макс Борн был избран иностранным членом Академии наук СССР. Среди докладчиков съезда были и другие видные физики, например Леон Бриллюэн, причисляемый сегодня к основателям физики твердого тела, молодые ученые Дмитрий Дмитриевич Иваненко, изложивший в 1932 г. в журнале «Nature» нашедшую подтверждение гипотезу о структуре атомного ядра (протоны и нейтроны), и Андрей Андреевич Андронов, которому принадлежит пионерский вклад в развитие теории нелинейных колебаний (его доклад назывался «Предельные циклы Пуанкаре и теория колебаний»). Секретарем и докладчиком съезда был Сергей Иванович Вавилов. За «открытие, объяснение и использование эффекта», носящего название эффекта Вавилова–Черенкова, обнаруженного в 1934 г., А. А. Черенкову, И. М. Франку и И. Е. Тамму в 1958 г. была присуждена Нобелевская премия. Можно назвать и другие блестящие имена, украсившие программу съезда физиков 1928 г.

<sup>6</sup> Выдержки из решений о присуждении Нобелевских премий цитируются по книге В. Чолакова «Ученые и открытия» (М.: Мир, 1987. 368 с.).

Организатором и президентом съезда являлся академик Абрам Федорович Иоффе, одним из многочисленных<sup>7</sup> учеников которого был Н. Н. Семёнов. В сборнике «Воспоминания об А. Ф. Иоффе» Семёнов написал о нем такие слова: «Я думаю, что во все времена ни у одного народа не было физика, который бы, подобно Иоффе, вырастил огромное число крупных ученых из своих учеников» [10, с. 9].

Вскоре после съезда физиков, в 1929 г., Н. Н. Семёнов был избран членом-корреспондентом АН СССР, а в 1932 г. – академиком. Степень доктора и звание профессора Семёнов получил только после возвращения в Советском Союзе к «жизни» этих квалификационных регалий: в 1946 г. Н. Н. Семёнову была присуждена ученая степень доктора химических наук, а в 1950 г. он был утвержден в ученое звание профессора. 15 октября 1931 г. на базе руководимого Семёновым физико-химического сектора Ленинградского физико-технического института был образован Институт химической физики, руководство которым Николай Николаевич осуществлял вплоть до своего 90-летия, отмечавшегося в 1986 г.

### Встречи с волжанами

С конца 30-х годов прошлого века Николай Николаевич Семёнов был в курсе дел, которые велись в Саратовском университете в области химической физики, «отцом» которой он являлся. Первым к нему из Саратова стал регулярно приезжать советоваться молодой, только что перешагнувший двадцатипятилетний жизненный рубеж, аспирант химического факультета СГУ Александр Давидович Степухович. В 1938 г. Степухович досрочно защитил кандидатскую диссертацию, а после войны, став в 1946 г. доцентом кафедры теоретической физики физического факультета, организовал и специальную лабораторию химической физики. В 1950 г. состоялся первый выпуск студентов, специализировавшихся по химической физике. «Среди первых выдающихся выпускников, воспитанников Александра Давидовича, – отмечается в [6], – Ф. М. Митенков, академик, Герой Социалистического Труда, Лауреат Ленинской и Государственной премий, и Л. М. Тимонин, профессор, лауреат Ленин-

<sup>7</sup> Из сформированной А. Ф. Иоффе ленинградской научной школы вышло 10 академиков: А. П. Александров, А. И. Алиханов, Л. А. Арцимович, П. Л. Капица (нобелевский лауреат), И. К. Киоин, Ю. Б. Кобзарев, Г. В. Курдюмов, И. В. Курчатov, Л. Д. Ландау, П. П. Лукирский, Н. Н. Семёнов, В. М. Тучкевич, Ю. Б. Харитон.



ской премии, дважды лауреат Государственной премии. Будучи дипломниками Александра Давидовича, они изучали кинетику цепного распада этана, а впоследствии исследовали цепные ядерные превращения, работая в крупнейших научных центрах страны.

В 1956 г. Николай Николаевич Семёнов получил высшее международное научное отличие – Нобелевскую премию в области химии за исследования в области разветвленных цепных химических реакций, проводившиеся им еще в 30-е годы. «Напарником» академика по премии был англичанин Сирил Норманн Хиншелвуд, который «по-джентльменски» совершенно справедливо отдавал пальму первенства в изучении разветвленных цепных реакций именно Н. Н. Семёнову.

Получение Нобелевской премии существенно укрепило официальный статус Николая Николаевича, а также прервало досужие домыслы в его адрес. В дополнение к усложняющимся официальным обязанностям в Академии наук СССР (академик-секретарь, вице-президент) он дважды (в 1962 и 1966 гг.) избирался в Верховный Совет СССР, законодательный орган страны. 12 июня 1966 г. Семёнов стал депутатом Верховного Совета седьмого созыва от Стерлитамакского избирательного округа № 512, куда входили избиратели города Ишимбая, расположенного на реке Белая – самом крупном притоке Камы, и Ишимбайского района. Это нефтеносный район Башкирии, и Николай Николаевич, хорошо знакомый с проблемами переработки нефти, не был для своих избирателей «свадебным генералом». Он неоднократно приезжал в Уфу и Ишимбай, помогал в переоснащении предприятий химической промышленности, строительстве жилья, работе научных организаций Башкирии. В 1974 г. он был в Уфе по случаю 250-летнего юбилея Российской Академии наук (деятельность Башкирского филиала академии была возобновлена в 1967 г.).

Что же касается Саратова, то в лице А. Д. Степуховича и его учеников Н. Н. Семёнов получил талантливых пропагандистов развиваемого им научного направления. Как подчеркивается в [6], профессор А. Д. Степухович «своими многочисленными трудами по исследованию заторможенного и инициированного крекинга углеводородов <...> внёс большой вклад в развитие теории радикально-цепных реакций, лежащей в основании активно развивающейся науки – химической физики. <...> С Институтом химической физики АН СССР и академиком Н. Н. Семёновым свя-

заны отечественные кинетические исследования и, в частности, научные интересы профессора А. Д. Степуховича и его школы, посвящённые исследованию кинетики и механизма цепных химических реакций в газовой и жидкой фазах».

Свою докторскую диссертацию А. Д. Степухович защитил в 1958 г. в Институте химической физики Академии наук СССР. Показательно, что официальными оппонентами при его защите выступили крупные учёные – Г. А. Разуваев, В. В. Воеводский и К. П. Лавровский<sup>8</sup>. И в том же 1958 г. на физическом факультете Саратовского университета была создана первая в стране кафедра химической физики, которую А. Д. Степухович возглавлял в течение последующих двадцати четырех лет. Он определял направления научных исследований как кафедры, так и лаборатории химической физики, по теоретическому и экспериментальному изучению физических основ химической кинетики атомно-молекулярных и радикально-цепных превращений в газофазных и жидкофазных системах.

Н. Н. Семёнов был хорошо знаком с сотрудниками физического и химического факультетов СГУ, которые регулярно приезжали на стажировки в Институт химической физики и на возглавлявшуюся им же кафедру химической кинетики химического факультета Московского университета. Саратовцев у Семёнова всегда ждал радушный прием, приглашали их на торжественные мероприятия.

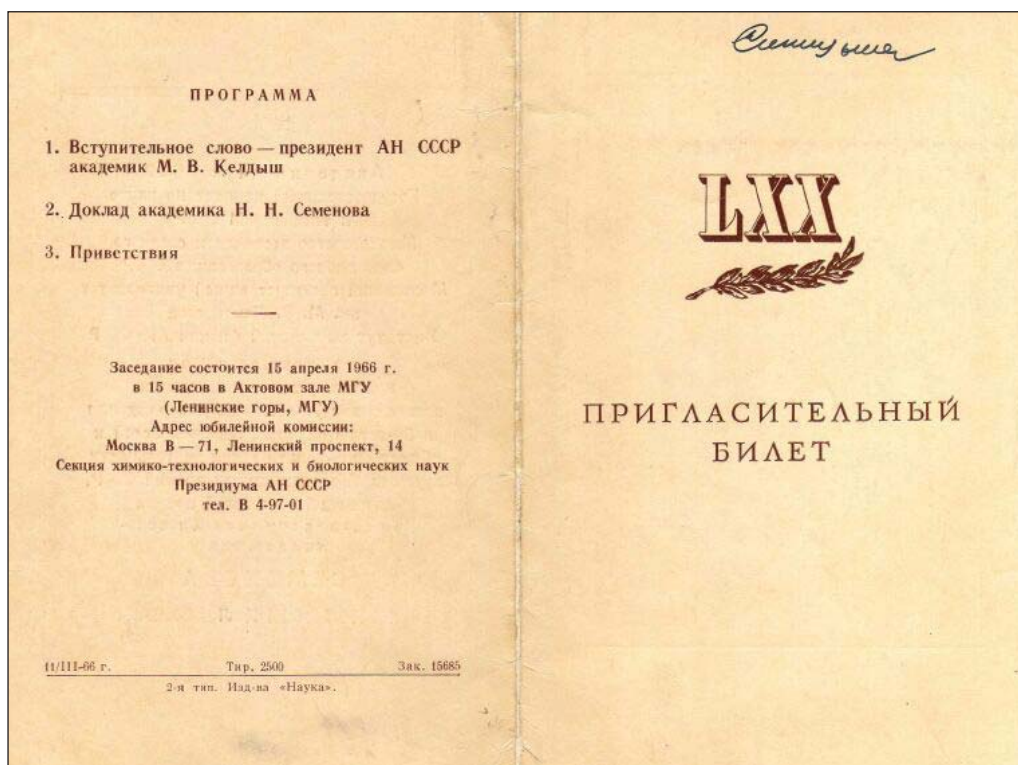
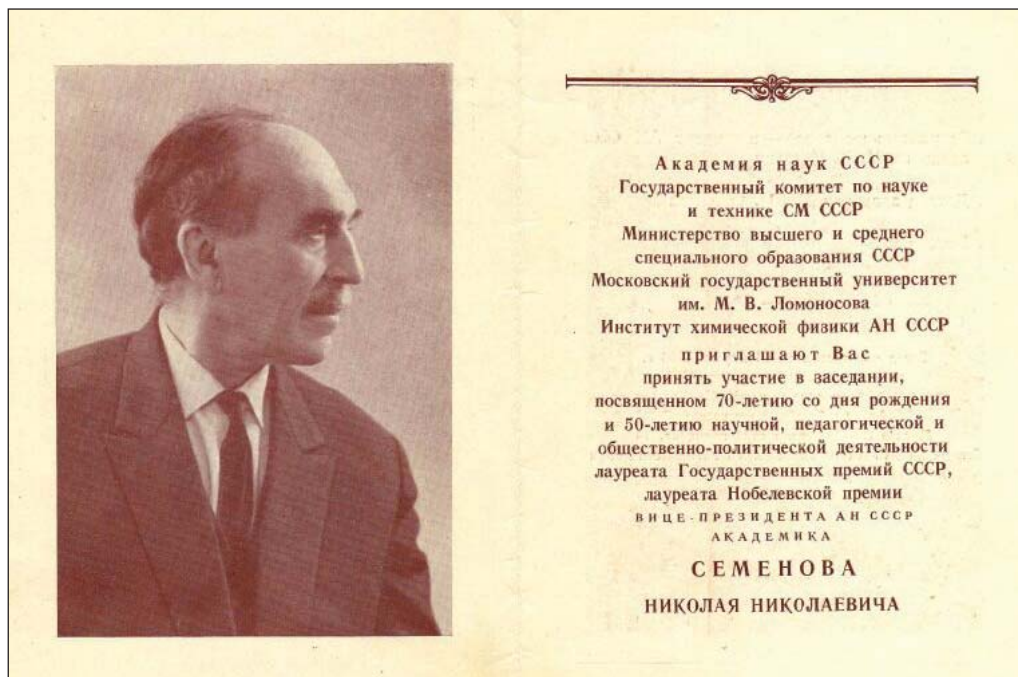
Приезжающих удивляла необыкновенная творческая атмосфера, царившая в Институте химической физики. Так, аспиранты непременно стремились выступить на двухчасовых, регулярно проводимых научных семинарах. «Ларчик открывался просто»: на этих семинарах Семёнов так быстро и глубоко вникал в работу, что своими вопросами и советами помогал определить направления дальнейшей деятельности аспиранта. Поэтому поначалу казавшаяся странной фраза, звучавшая порой в очереди (!) из аспирантов: «Пропустите меня, пожалуйста, а то я совсем не знаю, что мне делать дальше!» – имела для осведомленных и самого стремящегося выступить совершенно определенный смысл.

<sup>8</sup> Для официальных оппонентов А. Д. Степуховича год 1958-й оказался весьма приятным: Григорий Алексеевич Разуваев получил первую в СССР Ленинскую премию по химии и был избран в члены-корреспонденты Академии наук (впоследствии – академик, Герой социалистического труда); Владислав Владиславович Воеводский стал членом-корреспондентом Академии наук (в 1964 г. избран академиком). Константин Петрович Лавровский был членом-корреспондентом Академии наук СССР с 1953 г.



Эту способность Николая Николаевича «на лету» схватывать суть проблемы отмечали многие. Так, Л. Г. Щербакова писала: «Удивительная черта Николая Николаевича как ученого всегда восхищала меня: вобрав сказанную информацию, он шел дальше, его замечания и вопросы могли

составить программу работы на годы вперед. Впоследствии я поняла, почему многие ученые хотели показать Николаю Николаевичу результаты своих исследований, они хорошо знали, что получат объективное доброжелательное мнение и ценные идеи по дальнейшему их развитию» [2, с. 222].



Приглашение на 70-летний юбилей Н. Н. Семёнова, адресованное саратовцам





В октябре 1983 г. сотрудников Саратовского университета ждал сюрприз: академик Н. Н. Семёнов неожиданно приехал в Саратов с небольшой делегацией сотрудников Института химической физики (член-корреспондент (впоследствии – академик) Академии наук СССР Александр Евгеньевич Шилов, кандидат (впоследствии – доктор) химических наук Лидия Григорьевна Щербакова (супруга Н. Н. Семёнова), кандидат технических наук Антонина Федоровна Абашкина, помощник Н. Н. Семёнова Павел Семенович Костиков).

Этот приезд имел интересную предысторию, связанную с написанием саратовским журналистом Владимиром Ильичем Вардугиным повести о Н. Н. Семёнове «Тайна огня», название которой было созвучно с одной из разработанных Семёновым теорий – горения и взрывов. Любезно приглашенный в Москву для бесед с академиком в июне 1982 г. Вардугин затем в течение года собирал дополнительные материалы, связанные в основном с детскими и юношескими годами Семёнова, работал в архивах, просматривал старые газеты, получил воспоминания от сестры

Семёнова – Ксении Николаевны, проживавшей в Краснодаре. В июне 1983 г. он повез показать книгу Семёнову, а при завершении встречи пригласил его (от себя) в Саратов.

Нужно сказать, что Н. Н. Семёнов получал приглашение посетить город еще в 1981 г. от В. К. Гусева, первого секретаря областного комитета партии. Приглашение это было связано с открытием в Саратове памятника Семёнову как дважды Герою Социалистического Труда (таково было положение о героях труда). Семёнов тогда не поехал, считая открытие «памятника себе», мягко говоря, не совсем скромным. А тут неожиданный звонок Вардугину: «Едем!».

Естественно, Владимир Ильич понимал, что этот визит носит не личный, а общественно значимый характер, и поставил в известность о приезде Н. Н. Семёнова руководство города и области. 1 октября делегацию Института химической физики встретили цветами на вокзале, а затем в течение трех дней показывали город, знакомили с исследовательскими институтами, Радищевским художественным музеем, панорамой города со стороны Волги.



Делегация Института химической физики АН СССР и руководство города Саратова. Слева направо: А. В. Россошанская, Н. Б. Еремин, Л. Г. Щербакова, П. С. Костиков, В. И. Вардугин, Ю. А. Мысников, Н. Н. Семёнов, А. Е. Шилов, А. И. Кузьев. Октябрь 1983 г.

3 октября 1983 г. Н. Н. Семёнов и другие члены его «делегации» встретились с преподавателями химического и физического факультетов Саратовского университета.

Главный вопрос, который интересовал Н. Н. Семёнова на этой встрече, – как физики «взаимодействуют» с химиками. Высказал он и свое глубокое сожаление по поводу кончи-





Н. Н. Семёнов на встрече с сотрудниками Саратовского университета. 3 октября 1983 г.

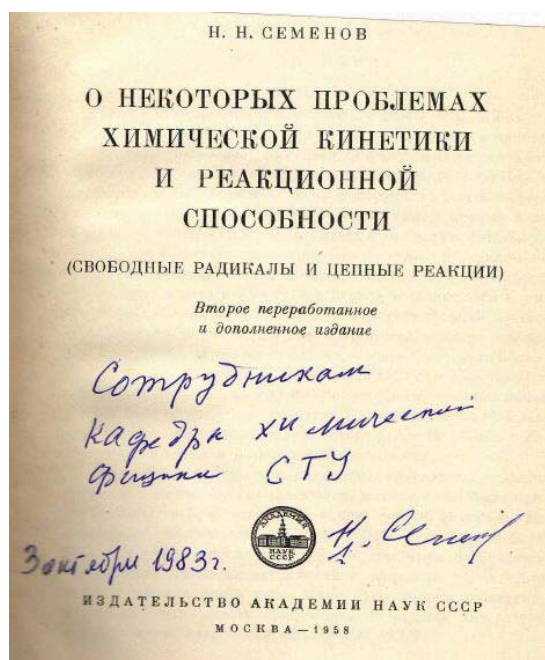
ны (в мае 1982 г.) А. Д. Степуховича. Но их опосредованная «встреча» в Саратове все-таки состоялась: Николаю Николаевичу были переданы увидевшие свет в 1983 г. две части книги А. Д. Степуховича «Лекции по теории цепных реакций». Сам он оставил памятную надпись на одной из своих книг.



Н. Н. Семёнов беседует с доцентом Р. В. Сеницкой. 3 октября 1983 г.

Приезду Н. Н. Семёнова в Саратов Вардугин посвятил последнюю главу своей книги. Повесть была подписана в печать в январе 1986 г., и Вардугин сразу же, когда был отпечатан тираж, отвез несколько экземпляров книги ее герою (Семёнов тогда уже сильно прихварывал). На своем экземпляре Вардугин получил автограф Николая Николаевича: «Дорогому автору. С благодарностью Н. Семёнов». В апреле 1986 г. Владимир

Ильич получил приглашение на торжественное мероприятие, посвященное 90-летию академика Н. Н. Семёнова. А 25 сентября 1986 г. Николая Николаевич не стало...



Автограф Н. Н. Семёнова

Спустя некоторое время защитили докторские диссертации выпускники кафедры химической физики, сотрудники СГУ: в 1992 г. – Марк Давидович Гольдфейн, а в 2005 г. – Николай Владимирович Кожевников.



История книги «Тайна огня» имела свое продолжение. В сентябре 1987 г., то есть уже после смерти Николая Николаевича, в журнале «Наука и жизнь» появилась рецензия на книгу В. И. Вардугина, которая называлась «Голубые глаза, или Еще о биографической прозе». Примеры найденных рецензентами в тексте некоторых несоответствий приводились в качестве иллюстрации того, что автор книги не отразил в своей книге в должной мере как личную жизнь, так и многогранную деятельность своего героя и всей (!) его научной школы. Рецензия завершается фразой: «Голубые глаза хороши (именно такими показались Вардугину глаза прожившего долгую жизнь человека. – Авт.), только мне полюбилися карие». Нужно сказать,

что сам Николай Николаевич (возможно, с высоты своих лет, мудрости и миропонимания) не обратил особого внимания на эти неточности в тексте. Наоборот, он был благодарен автору за то, что тот снял «покров» с его первых лет жизни. А сейчас, спустя 30 лет после выхода книги, нам кажется, что ее автор разглядел *в умных глазах* (курсив наш. – Авт.) своего героя «тайну огня» его души.

...Памятник Н. Н. Семёнову в Саратове открывали в мае 1981 г. в отсутствие здравствовавшего виновника торжества. Но в один из дней пребывания в Саратове Николай Николаевич и Лидия Григорьевна побывали около него. Свидетельством этого является фотография, опубликованная в [3].



Открытие памятника Н. Н. Семёнову 13 мая 1981 г. (фото с сайта СГУ)

### Заключение

Приведем в заключение оценку роли Николая Николаевича Семёнова, которую он играл и продолжает играть в науке, данную одним из наиболее любимых его учеников – академиком Александром Евгеньевичем Шиловым [11]:

«Н. Н. Семёнов традиционно рассматривается как ученый, открывший разветвленные цепные реакции и давший теорию цепных реакций, а также теорию цепного и теплового взрыва. Слов нет, эти достижения Н. Н. Семёнова неоспоримы и сами по себе очень значительны. Мы не должны при этом забывать, что Н. Н. Семёнов фактически предвидел открытие и ядерных цепных реакций. Он сам и его ученики внесли большой вклад в осуществление ядер-

ного проекта в СССР. Однако, как ни велики эти достижения, вклад Н. Н. Семёнов в современную науку значительно шире, и развитие науки в XXI веке, несомненно, будет происходить под знаком Семёновских предвидений.

Еще в начале XX века Н. Н. Семёнов пришел к выводу об огромной роли физики в развитии химии будущего. Его собственные научные открытия и весь ход развития науки XX века подтвердил это предвидение. В основе химических процессов лежат физические законы, управляющие образованием и разрывом связей, и для дальнейшего развития химии необходимо понять эти законы. Появилась новая наука – химическая физика, одним из основных создателей которой был Н. Н. Семёнов. Он



много сделал для внедрения физического мышления в умы химиков. Конечно, традиционное развитие химии по пути создания эмпирических зависимостей продолжалось и в XX веке. Однако химическая физика постепенно становилась и уже стала теоретической основой всей химии и дальнейшее развитие химии немислимо без этой ее теоретической основы.

Во второй половине XX века Н. Н. Семёнов выдвинул как главную перспективу развития химии ее взаимодействие с биологией, которое должно обогатить обе науки. Химическая физика все более охватывает химические процессы в биологических системах, становится теоретической основой науки о жизни. Возникает новая наука, биохимическая физика, которая в XXI веке должна стать одной из основных, если не основной, в понимании молекулярных механизмов процессов, происходящих в живых организмах. Не случайно эта наука возникла именно в России, и ее дальнейшее развитие, несомненно, будет связано с именем Н. Н. Семёнова и именами его учеников. Предвидение Н. Н. Семёнова о необходимости тесного взаимодействия трех наук – физики, химии и биологии (естественно дополненное союзом с математикой) как важнейшего научного направления для будущего существования человечества полностью сбывается в наши дни. Наука о жизни становится важнейшей в последующем развитии естественных наук, и она будет развиваться в XXI веке под знаком Семёновских идей.

Н. Н. Семёнов любил работать с молодежью и придавал этой работе огромное значение. Он руководил кафедрой химической кинетики Московского государственного университета, был одним из основателей Московского физико-технического института. Он создал замечательную «семёновскую школу», которая приобрела мировую славу и добилась выдающихся достижений. Своим учителем Н. Н. Семёнова считали не только те, кто работал с ним рядом, но и очень многие ученые России и других стран, знавшие его труды и слушавшие его выступления, в том числе даже и некоторые нобелевские лауреаты. Наконец, он был интереснейшей личностью, глубоко чувствовал искусство и художественную литературу, интересовался философией. Он любил слушать людей и сам увлеченно рассказывал о событиях своей жизни, научных открытиях, исторических личностях. Сказать, что он умел слушать с неподдельным интересом, значит не сказать ничего. Это умеют многие. Но

так живо включаться в дело, входя во все детали, нетерпеливо ждать нового результата, не давая покоя ученикам, из известных мне людей мог только Н. Н. Семёнов.

Умение предвидеть роль физики в развитии химии XX века, осознать исключительную роль биологии в будущем развитии химии, способность самому погружаться в решение важнейших проблем, воодушевлять учеников и сотрудников – все это характеризует Н. Н. Семёнова как уникальное явление в отечественной и мировой науке».

### Список литературы

1. Семёнов Н. Н. Избранные труды : в 4 т. / отв. ред. А. Е. Шилов, Г. Б. Сергеев. М. : Наука, 2006. Т. 4 : О времени и о себе. 2006. 611 с.
2. Воспоминания об академике Николае Николаевиче Семёнове / отв. ред. А. Е. Шилов. М. : Наука, 1993. 302 с. (Серия «Ученые России. Очерки, воспоминания, материалы»).
3. Вардугин В. И. Тайна огня : Повесть о Н. Н. Семёнове. Саратов : Приволж. кн. изд-во, 1986. 144 с.
4. Максакова О. С. «Я не мыслю другой жизни, как жизнь вместе с наукой». URL: <http://rgantd-samara.ru/activity/articles/6777/>
5. Аникин В. М. Физик-инноватор, земляк, учитель и друг Н. Н. Семёнова Владимир Иванович Кармилов // Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика. 2016. Т. 16, вып. 1. С. 44–54.
6. Гольдфейн М. Д., Карнаухова Л. И., Кожевников Н. В. Профессор Александр Давидович Степухович – организатор научной школы в области химической физики в Саратов // Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика. 2011. Т. 11, вып. 2. С. 85–90.
7. Born M. VI Kongreß der Assoziation der russischen physiker // Die Naturwissenschaften. 1928. Bd. 16, heft 39. September. S. 741–743. DOI: 10/1007/BF01506295.
8. Усанов Д. А. Международные встречи российских физиков в прошлом и настоящем // Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика. 2013. Т. 21, № 3. С. 127–143.
9. Аникин В. М. «Приобретать умение делать физические измерения и исследования» : к 100-летию физического образования и физической науки в Саратове // Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика. 2014. Т. 14, вып. 1. С. 53–58.
10. Семёнов Н. Н. А. Ф. Иоффе и его школа // Воспоминания об А. Ф. Иоффе. Л. : Наука. Ленингр. отд-ние, 1972. С. 5–10.
11. Шилов А. Е. Н. Н. Семёнов и его роль в науке. URL: <http://www.chph.ras.ru/semenov.html>.





## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**Аникин Валерий Михайлович** – Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, физический факультет, декан; кафедра компьютерной физики и метаматериалов на базе Саратовского филиала Института радиотехники и электроники имени В. А. Котельникова Российской Академии Наук, заведующий кафедрой. E-mail: AnikinVM@info.sgu.ru

**Бабков Лев Михайлович** – Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, физический факультет, кафедра теоретической физики, заведующий кафедрой. E-mail: babkov@sgu.ru

**Башкатов Алексей Николаевич** – Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, физический факультет, Научно-образовательный институт оптики и биофотоники, доцент; Томский государственный университет, лаборатория биофотоники, ведущий научный сотрудник. E-mail: a.n.bashkatov@mail.ru

**Белоусов Александр Витальевич** – Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физики ускорителей и радиационной медицины, доцент. E-mail: belousovav@physics.msu.ru

**Бойков Виталий Алексеевич** – Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, физический факультет, кафедра теоретической физики, магистрант. E-mail: babkov@sgu.ru

**Генина Элина Алексеевна** – Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, физический факультет, кафедра оптики и биофотоники, Научно-образовательный институт оптики и биофотоники, доцент; Томский государственный университет, лаборатория биофотоники, ведущий научный сотрудник. E-mail: eagenina@yandex.ru

**Давыдова Надежда Александровна** – Институт физики Национальной академии наук Украины, ведущий научный сотрудник. E-mail: davydova@iop.kiev.ua

**Зарьков Сергей Александрович** – Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, кафедра компьютерной физики и метаматериалов на базе Саратовского филиала Института радиотехники и электроники имени В. А. Котельникова Российской Академии Наук, магистрант. E-mail: sazarkov@mail.ru

**Калачев Алексей Александрович** – Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физики ускорителей и радиационной медицины, аспирант. E-mail: akalachov@mail.ru

**Конюхов Андрей Иванович** – Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, физический факультет, кафедра компьютерной физики и метаматериалов на базе Саратовского филиала Института радиотехники и электроники имени В. А. Котельникова Российской Академии Наук, доцент. E-mail: konyukhovAI@sgu.ru

**Крусанов Григорий Андреевич** – Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физики ускорителей и радиационной медицины, аспирант. E-mail: krusanov@physics.msu.ru

**Латышева Екатерина Викторовна** – Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, факультет нано- и биомедицинских технологий, кафедра физики твердого тела, аспирант. E-mail: ekatushka@list.ru

**Лякин Дмитрий Владимирович** – Институт проблем точной механики и управления Российской Академии Наук, лаборатория проблем когерентно-оптических измерений в точной механике, старший научный сотрудник. E-mail: ldv-77@mail.ru

**Мельников Леонид Аркадьевич** – Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю. А., кафедра приборостроения, заведующий кафедрой. E-mail: lam@sstu.ru

**Пластун Александр Сергеевич** – Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, физический факультет, кафедра компьютерной физики и метаматериалов на базе Саратовского филиала Института радиотехники и электроники имени В. А. Котельникова Российской Академии Наук, аспирант. E-mail: plastun\_alex@mail.ru

**Пономарев Денис Викторович** – Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, факультет нано- и био-медицинских технологий, кафедра физики твердого тела, доцент. E-mail: ronomarev87@mail.ru

**Рябухо Владимир Петрович** – Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, физический факультет, кафедра оптики и биофотоники, профессор; Институт проблем точной механики и управления Российской Академии Наук, лаборатория проблем когерентно-оптических измерений в точной механике, заведующий лабораторией. E-mail: rvp-optics@yandex.ru

**Рябухо Пётр Владимирович** – Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, физический факультет, кафедра оптики и биофотоники, аспирант. E-mail: ryabukhopeter.optics@yandex.ru





**Савонин Сергей Александрович** – Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Образовательно-научный институт наноструктур и биосистем, лаборатория «Материалы специального назначения», научный сотрудник. E-mail: savonin.sa@mail.ru

**Скрипаль Александр Владимирович** – Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, факультет нано- и биомедицинских технологий, кафедра физики твердого тела, профессор. E-mail: skripala\_v@info.sgu.ru

**Тучин Валерий Викторович** – Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, физический факультет, кафедра оптики и биофотоники, заведующий кафедрой; Научно-образовательный институт оптики и биофотоники, директор; Томский государственный университет, междисциплинарная лаборатория биофотоники, научный руководитель; Институт проблем точной механики и управления Российской Академии Наук, лаборатория лазерной диагностики технических и живых систем, заведующий лабораторией. E-mail: tuchin@sgu.ru

**Усанов Дмитрий Александрович** – Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, факультет нано- и биомедицинских технологий, кафедра физики твердого тела, заведующий кафедрой, профессор. E-mail: usanovda@info.sgu.ru

**Успенский Кирилл Евгеньевич** – Поволжский институт управления имени П. А. Столыпина Российской академии народного хозяйства и государственной службы при Президенте РФ, кафедра прикладной информатики и информационных технологий в управлении, доцент. E-mail: babkov@sgu.ru

**Феклистов Владимир Борисович** – Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, факультет нано- и биомедицинских технологий, кафедра физики твердого тела, доцент. E-mail: Feklistovvb@mail.ru

**Черняев Александр Петрович** – Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра физики ускорителей и радиационной медицины, заведующий кафедрой. E-mail: a.p.chernyaev@yandex.ru



## INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

**Anikin Valery Michailovich** – Saratov State University, physics faculty, dean, department of computational physics and metamaterials based in Saratov branch of Kotel'nikov Institute of Radioengineering and Electronics of Russian Academy of Sciences, head. E-mail: AnikinVM@info.sgu.ru

**Babkov Lev Mikhailovich** – Saratov State University, physics faculty, department of theoretical physics, head. E-mail: babkov@sgu.ru

**Bashkatov Aleksey Nikolaevich** – Saratov State University, physics faculty, Research and Educational Institute of Optics and Biophotonics, associate professor; Tomsk State University, laboratory of biophotonics, leading researcher. E-mail: a.n.bashkatov@mail.ru

**Belousov Alexandr Vitalyevich** – M. V. Lomonosov Moscow State University, physics faculty, department of accelerator physics and radiation medicine, associated professor. E-mail: belousovav@physics.msu.ru

**Boykov Vitaly Alexeyevich** – Saratov State University, physics faculty, department of theoretical physics, master student. E-mail: babkov@sgu.ru

**Chernyaev Alexandr Petrovich** – M. V. Lomonosov Moscow State University, physics faculty, department of accelerator physics and radiation medicine, head. E-mail: a.p.chernyaev@yandex.ru

**Davydova Nadezhda Alexandrovna** – Institute of Physics of National Academy of Sciences of Ukraine, leading researcher. E-mail: davydova@iop.kiev.ua

**Feklistov Vladimir Borisovich** – Saratov State University, faculty of nano- and biomedical technologies, department of solid state physics, associate professor. E-mail: Feklistovvb@mail.ru

**Genina Elina Alekseevna** – Saratov State University, physics faculty, department of optics and biophotonics, Research and Educational Institute of Optics and Biophotonics, associate professor; Tomsk State University, laboratory of biophotonics, leading researcher. E-mail: eagenina@optics.sgu.ru

**Kalachev Alexey Alexandrovich** – M. V. Lomonosov Moscow State University, physics faculty, department of accelerator physics and radiation medicine, postgraduate student. E-mail: akalachov@mail.ru

**Konyukhov Andrey Ivanovich** – Saratov State University, physics faculty, department of computational physics and metamaterials based in Saratov branch of Kotel'nikov Institute of Radioengineering and Electronics of Russian Academy of Sciences, associated professor. E-mail: konyukhovAI@sgu.ru

**Krusanov Grigorii Andreevich** – M. V. Lomonosov Moscow State University, physics faculty, department of accelerator physics and radiation medicine, postgraduate student. E-mail: krusanov@physics.msu.ru

**Latysheva Ekaterina Viktorovna** – Saratov State University, faculty of nano- and biomedical technologies, department of solid state physics, postgraduate student. E-mail: ekatushka@list.ru

**Lyakin Dmitry Vladimirovich** – Institute of Precision Mechanics and Control of Russian Academy of Sciences, laboratory of coherent optical measurements in precision mechanics, senior researcher. E-mail: ldv-77@mail.ru

**Melnikov Leonid Arkadievich** – Saratov State Technical University, department of instrumentation, head. E-mail: lam@sstu.ru

**Plastun Aleksandr Sergeevich** – Saratov State University, physics faculty, department of computational physics and metamaterials based in Saratov branch of Kotel'nikov Institute of Radioengineering and Electronics of Russian Academy of Sciences, postgraduate student. E-mail: plastun\_alex@mail.ru

**Ponomarev Denis Viktorovich** – Saratov State University, faculty of nano- and biomedical technologies, department of solid state physics, associate professor. E-mail: ponomarev87@mail.ru

**Ryabukho Vladimir Petrovich** – Saratov State University, physics faculty, department of optics and biophotonics, professor; Institute of Precision Mechanics and Control of Russian Academy of Sciences, laboratory of coherent optical measurements in precision mechanics, head. E-mail: rvp-optics@yandex.ru

**Ryabukho Peter Vladimirovich** – Saratov State University, physics faculty, department of optics and biophotonics, postgraduate student. E-mail: ryabukhopeter.optics@yandex.ru

**Savonin Sergey Alexandrovich** – Saratov State University, Education and Research Institute of Nanostructures and Biosystems, laboratory «Special purpose materials», researcher. E-mail: savonin.sa@mail.ru

**Skripal Alexander Vladimirovich** – Saratov State University, faculty of nano- and biomedical technologies, department of solid state physics, professor. E-mail: skripala\_v@info.sgu.ru

**Tuchin Valeriy Viktorovich** – Saratov State University, physics faculty, department of optics and biophotonics, head; Research and Educational Institute of Optics and Biophotonics, director; Tomsk State University, interdisciplinary laboratory of biophotonics, head; Institute of Precision Mechanics and Control of Russian Academy of Sciences, laboratory of laser diagnostics of technical and living systems, head. E-mail: tuchin@sgu.ru

**Usanov Dmitry Aleksandrovich** – Saratov State University, faculty of nano- and biomedical technologies, department of solid state physics, head. E-mail: usanovda@info.sgu.ru

**Uspenskiy Kirill Evgen'evich** – Volga Institute of Management of Russian Academy of National Economy and Public Service under the President of Russia, department of applied informatics and information technology to manage, associate professor. E-mail: babkov@sgu.ru

**Zar'kov Sergey Aleksandrovich** – Saratov State University, physics faculty, department of computational physics and metamaterials based in Saratov branch of Kotel'nikov Institute of Radioengineering and Electronics of Russian Academy of Sciences, master student. E-mail: sazarkov@mail.ru



**Подписка на II полугодие 2016 года**

Индекс издания по объединенному каталогу

«Пресса России» 36015.

Журнал выходит 4 раза в год.

Цена свободная.

Оформить подписку онлайн можно

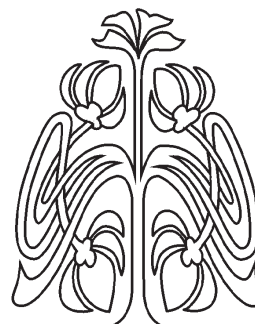
в интернет-каталоге «Пресса по подписке» ([www.akc.ru](http://www.akc.ru)).

По всем вопросам обращаться в редакцию журнала:

410012, Саратов, Астраханская, 83;

тел. (845-2) 51-45-49, 52-26-89; факс (845-2) 27-85-29;

e-mail: [izvestiya@sgu.ru](mailto:izvestiya@sgu.ru)



**ПОДПИСКА**

