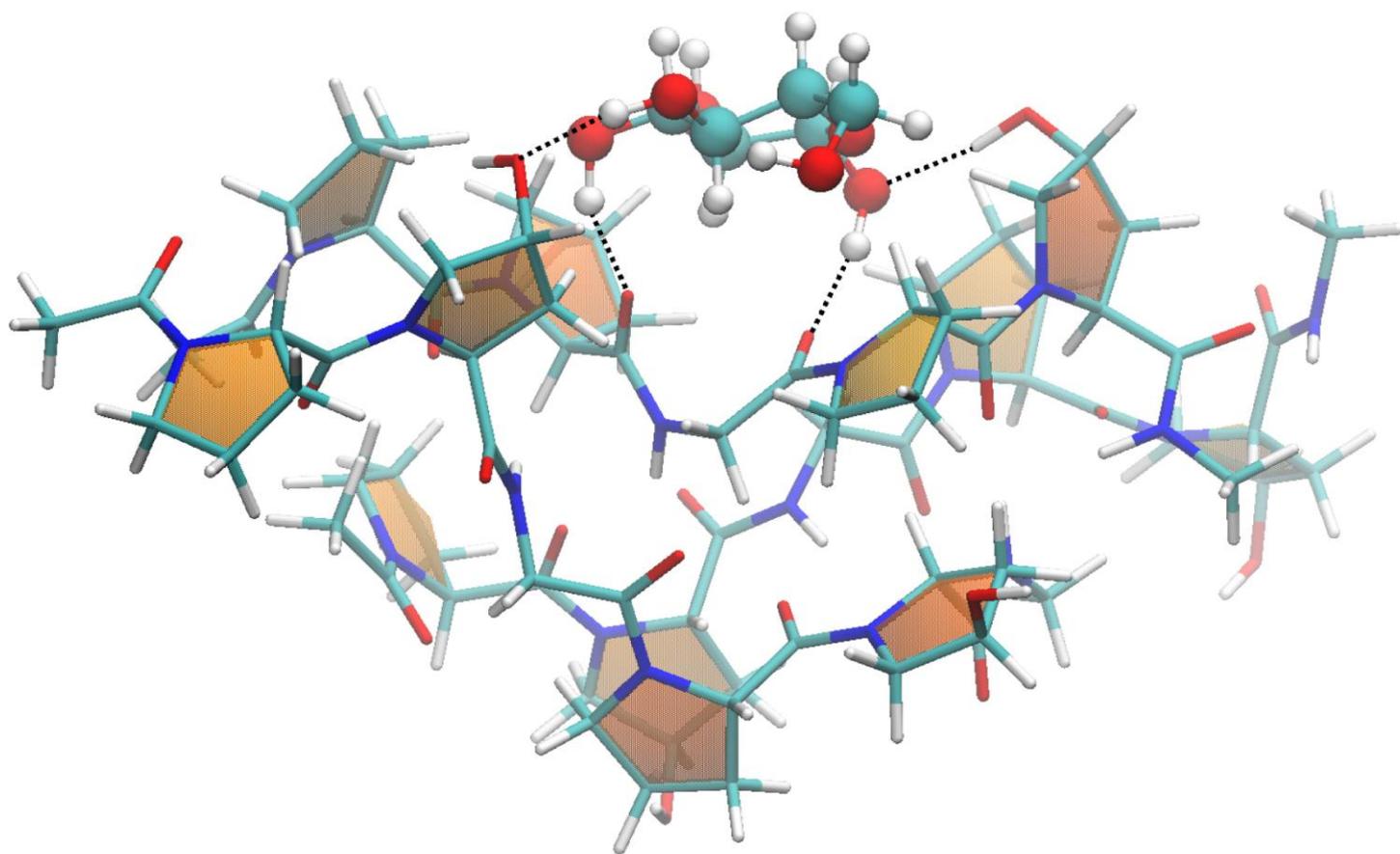


# ПРОБЛЕМЫ ОПТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И БИОФОТОНИКИ

SFM – 2018



Саратов 2018

Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского

# **ПРОБЛЕМЫ ОПТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И БИОФОТОНИКИ SFM-2018**

Материалы 6-го Международного симпозиума и  
22-ой Международной молодежной научной школы  
Saratov Fall Meeting 2018

Под редакцией Г. В. Симоненко, В. В. Тучина

24 – 28 сентября 2018 года

Саратов



Саратов  
НОВЫЙ ВЕТЕР  
2018

**Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM-2018:** материалы Международного симпозиума и Международной молодежной научной школы Saratov Fall Meeting 2018 / под ред. Г. В. Симоненко, В. В. Тучина. – Саратов : Изд - во «Новый ветер», 2018. – 144 с. : ил. ISBN 978-5-98116-235-0

В сборник вошли приглашенные лекции и доклады участников 6-го Международного симпозиума по оптике и биофотонике и 22-ой Международной молодежной научной школы по оптике, лазерной физике и биофотонике, организованных и проведенных в Саратове с 24 по 28 сентября 2018 года.

Для научных работников, аспирантов и студентов старших курсов физических факультетов университетов, специализирующихся в области оптики, лазерной физики, оптических технологий в биофизике и медицине, спектроскопии и оптоэлектроники.

*Международный симпозиум по оптике и биофотонике и Международная научная школа для студентов и молодых ученых по оптике, лазерной физике и биофотонике проведена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 18-02-20120 и №18-32-10035, соответственно)*

УДК 535(068)  
ББК 22.343.43

Научное издание

ПРОБЛЕМЫ ОПТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И БИОФОТОНИКИ  
SFM-2018

Материалы 6-го Международного симпозиума по оптике и биофотонике и 22-й Международной молодежной научной школы по оптике, лазерной физике и биофотонике

Под редакцией Г. В. Симоненко, В. В. Тучина

Оригинал-макет подготовила Н.А. Лакодина

Подписано в печать 01.12.2018. Формат 60×84 1/8. Усл. печ. л. 16,93 (18,78).

Тираж 50. Заказ 12

Издательство «Новый ветер»  
410012, Саратов, Астраханская, 79.

ISBN 978-5-98116-235-0

© Саратовский государственный  
университет, 2018

## СОДЕРЖАНИЕ

<b>ПРЕДИСЛОВИЕ</b>	4
<b>ОПТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ БИОТКАНЕЙ</b>	13
<b>ОПТИЧЕСКАЯ ЦИФРОВАЯ РЕГИСТРАЦИЯ СЕДИМЕНТАЦИИ ЭРИТРОЦИТОВ И ЕЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ФОРМЕ КОЛЛЕКТИВНОГО ПРОЦЕССА</b> В.А. Дубровский, К.Н. Дворецкий, С.В. Марков, Е.П. Карпочева, В.В.Тучин	13
<b>МЕТОД КОМПЬЮТЕРНОГО РАСПОЗНАНИЯ ХРЯЩЕВОЙ ТКАНИ НА МИКРОФОТОГРАФИЯХ ГИСТОЛОГИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ КОСТНОЙ ТКАНИ КРЫС В ОБЛАСТИ ИМПЛАНТАЦИИ СКАФФОЛДОВ</b> И.А. Норкин, И.В. Забенков, И.О. Бугаева, Д.А. Горин, А.Н. Иванов, М.О. Куртукова, П.В. Рябухо, М.С. Савельева, В.Ю. Ульянов, С.В. Кустодов, Д.А. Тяпкина	29
<b>ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЦВЕТОВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПО СПЕКТРАЛЬНЫМ ДАННЫМ ПРИ ФОТООТБЕЛИВАНИИ ГЛИКИРОВАННОГО ДЕНТИНА</b> Н.И. Казадаева, Т.А. Кашина, Л.Е. Долотов, А.Б. Правдин	35
<b>ОПТИЧЕСКОЕ ПРОСВЕТЛЕНИЕ КОЖИ ЧЕЛОВЕКА IN VIVO ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ НЕКОТОРЫХ МОНОСАХАРИДОВ</b> К. В. Березин, К. Н. Дворецкий, М. Л. Чернавина, В.В. Нечаев, А. М. Лихтер, В. В. Смирнов, Е. М. Антонова, О. В. Гречухина, М. В. Карташов, В. В. Тучин	39
<b>ЭФФЕКТ ДЕЙСТВИЯ СВЕТА НА ВИДОВОЙ СОСТАВ МИКРООРГАНИЗМОВ В СИСТЕМЕ ПАРАЗИТ (<i>AULACIDEA HIERACII</i> BOUSCHE, 1834) – СУПЕРПАРАЗИТ (<i>EURYTOMA CYNIPSEA</i> WOHLEMAN, 1836)</b> М.И. Никельшпарг, Е.В. Глинская, В.В. Аникин	46
<b>ФИЗИКА НАНО- И МИКРООБЪЕКТОВ</b>	49
<b>ХРАНЕНИЕ ВОДОРОДА С ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТЬЮ В 2D-МАТРИЦЕ ИЗ ГРАФЕНОВЫХ НАНОБЛИСТЕРОВ</b> О.Е. Глухова, П.В. Барков, М.М. Слепченков	49
<b>РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ МНОГОДИАПАЗОННОЙ МИКРОПОЛОСКОВОЙ ФРАКТАЛЬНОЙ АНТЕННЫ</b> К.А. Саяпин, М.М. Слепченков	52
<b>ПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА ТРЕХСЛОЙНОЙ ГРАФЕН-ГРАФАНОВОЙ СТРУКТУРЫ</b> В.В. Шунаев, М.М. Слепченков, О.Е. Глухова	56
<b>РАЗРАБОТКА ШИРОКОПОЛОСНОГО ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО МИКРОПОЛОСКОВОГО ФАЗОВРАЩАТЕЛЯ</b> В.П. Мещанов, К.А. Саяпин	59
<b>СПЕКТРОСКОПИЯ РАЗЛИЧНЫХ ОБЪЕКТОВ И ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА</b>	64
<b>ВЛИЯНИЕ ГИДРАТАЦИИ НА КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ D-РИБОЗЫ 5-ФОСФАТА</b> К. В. Березин, К.Н. Дворецкий, М.Л. Чернавина, А.В. Новоселова, В.В. Нечаев, Е.М. Антонова, А. М. Лихтер, В.В.Смирнов, О.В. Гречухина, М. В. Карташов	64
<b>ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ ЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ</b> М. Л. Чернавина, В.В.Смирнов, А.М. Лихтер, Е.М. Антонова, О.В. Гречухина, М. В. Карташов, К.В. Березин	67
<b>ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ МЕТОДОВ КР СПЕКТРОСКОПИИ ПРИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ НЕНАСЫЩЕННЫХ ЖИРНЫХ КИСЛОТ В РАСТИТЕЛЬНЫХ МАСЛАХ</b> К. В. Березин, К.Н. Дворецкий, М.Л. Чернавина, А.В. Новоселова, В.В. Нечаев, Е.М. Антонова, А. М. Лихтер, В.В.Смирнов, О.В. Гречухина, М. В. Карташов	73
<b>ЛОГАРИФМИЧЕСКИЕ ПО КОНСТАНТЕ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ ВКЛАДЫ В ТОНКИЙ СДВИГ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ, ИСЧЕЗАЮЩИЕ В ПРЕДЕЛЕ <math>m_2 \rightarrow m_1</math></b> С.В. Чурочкина	79

<b>СУПРАМОЛЕКУЛЯРНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ И ЭНЕРГИЯ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ В ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ СМЕСЯХ НАНОАЛМАЗОВ И ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ</b> И.Л. Пластун, А.Н. Бокарев, А.А.Захаров, А.А.Наумов	84
<b>СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ РЯДА АЗОЛОПИРИМИДИНОВ И АЗОЛОХИНАЗОЛИНОВ</b> М.А. Ивонин, Н.О. Василькова, А.В. Никулин, А.А. Мещерякова, В.В. Сорокин, А.П. Кривенько	89
<b>НЕСТАЦИОНАРНЫЕ ЭЛЛИПТИЧЕСКИ ПОЛЯРИЗОВАННЫЕ НОРМАЛЬНЫЕ МОДЫ ЭЛЕКТРОМАГНИТНО ИНДУЦИРОВАННОЙ ПРОЗРАЧНОСТИ</b> О.М. Паршков	93
<b>ДИСПЕРСИОННЫЕ СВОЙСТВА ЭВАНЕСЦЕНТНЫХ МОД ХАЛЬКОГЕНИДНЫХ СВЕТОВОДОВ</b> С.В. Корсакова, Е.А. Виноградова, Е.А. Романова, В.С.Ширяев	100
<b>РАСЧЕТ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ В АНГАРМОНИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ ПОЛИХЛОР-ЗАМЕЩЕННЫХ ДИБЕНЗОЛ-N-ДИОКСИНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ ДЛЯ АНАЛИЗА КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ</b> В.Ф. Пулин, Е.В. Рыжова, Т.Ю. Суринская	104
<b>МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ ФИЗИКИ</b>	110
<b>ФИЗИКА ЛАЗЕРОВ НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ В САРАТОВСКОМ УНИВЕРСИТЕТЕ</b> В. И. Цой, В. М. Аникин	110
<b>ИДЕИ ОТ ЛУКРЕЦИЯ В ЗАКОНАХ ФИЗИКИ</b> В.И.Цой	112
<b>ИЗОБРАЖЕНИЕ ЛИ ИЗОБРАЖЕНИЕ</b> М.А. Старшов	118
<b>НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫПРОБЛЕМЫ БЕСКОНТАКТНОГО ТРЕНИЯ НЕЙТРАЛЬНАЯ ЧАСТИЦА-ПОВЕРХНОСТЬ</b> С.В. Чурочкина, И.Я. Демин	119
<b>ПРИНЦИПИАЛЬНАЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ СХЕМА ЛАБОРАТОРНОГО МАКЕТ ARS-ТРИГГЕРА</b> Г.Н. Колесов, П.П. Нелюбов, К.А. Гребенюк	124
<b>ЗВУЧАЩЕЕ ЧИСЛО: ОТ ПИФАГОРА ДО ГУБАЙДУЛИНОЙ</b> В.Д. Генин	126
<b>АНГЛИЙСКИЙ ЯЗЫК КАК СРЕДСТВО МЕЖДУНАРОДНОГО НАУЧНОГО ОБЩЕНИЯ</b>	131
<b>ABSTRACTS OF SCIENTIFIC ARTICLES AS THEY ARE AND AS THEY SHOULD BE WRITTEN</b> Dina A. Alexeeva	131
<b>THE NOUN CHAIN CHALLENGE IN TRANSLATION</b> Darya N. Tselovalnikova	132
<b>LEXICO-GRAMMATICAL FEATURES OF A FUNCTIONAL STYLE ON THE EXAMPLE OF CHEMICAL TEXTS</b> Arina O. Shelyugina	135
<b>DEFINITION TO BE UNDERSTOOD</b> S. V. Eremina, A. B. Pravdin	137
<b>SUCCESSFUL ACADEMIC DISCUSSION AT A CONFERENCE</b> Anna Yu. Smirnova	139
<b>DELIVERING A LANGUAGE PROJECT</b> Dina A. Alexeeva, Anna A. Sosnovskaya	142

## ПРЕДИСЛОВИЕ

В 2018 году в рамках Международного симпозиума «Оптика и биофотоника - VI», являющегося частью Saratov Fall Meeting 2018 (SFM'18), прошли 12 продолжающихся конференций и семинаров «Оптические технологии в биофизике и медицине XX», «Лазерная физика и фотоника XX», «Спектроскопия и молекулярное моделирование XIX», «Электромагнетизм микроволн, субмиллиметровых и оптических волн XVIII», «Нанобиофотоника XIV», «Микроскопические и низкокогерентные методы в биомедицинских и других приложениях XI», «Интернет биофотоника XI», «Нелинейная динамика IX», «Низкоразмерные структуры VIII», «Биомедицинская спектроскопия V», «Передовые поляризационные и корреляционные технологии в биомедицине и материаловедении V» и «Компьютерная биофизика и анализ биомедицинских данных V». В этом году первые были организованы конференции «ТГц оптика и биофотоника» и «Перспективные материалы оптики и биофотоники». Одновременно с симпозиумом в рамках SFM'18 была организована XXII Международная школа для студентов и молодых ученых по оптике, лазерной физике и биофотонике, которая включала следующие семинары: «Современная оптика XVII», «Английский язык как средство коммуникации в научном сообществе XVII», «История, методология и философия оптического образования XI», «Телемедицина: возможности, приложения, перспективы XIII» и выставку «Ярмарка инновационных технологий в биофотонике», в которой приняли участие Саратовские компании: ООО НПП «Инжект» и ООО НПП «Наноструктурная Технология Стекла». В этом году совместно с SFM'18 проходила 3-я Международная школа по перспективным методам флуоресцентного имаджинга ADFLIM. В течение всего мероприятия была организована международная выставка, в которой приняли участие компании: ООО «АЗИМУТ ФОТОНИКС», ООО «Промэнерголаб», ООО «БиоЛайн», ООО «АВЕСТА», ООО «Научно-производственное предприятие «Инжект», ООО «ОЭС СПЕЦПОСТАВКА», «БиоВитрум», Becker & Hickl GmbH, Berlin, Germany и Picoquant (Technoinfo) GmbH, Germany.

Для участников мероприятий с краткими курсами лекций выступили известные учёные **Ronald Sroka** из университетской клиники г. Мюнхен, Германия; **Turgut Durduran** из Института фотонных наук, Барселона, Испания и **Анна Ярославская** из Массачусетского университета, Лоуэлл, США. Лекции были посвящены актуальным проблемам биофотоники и применению современных оптических технологий в биомедицине. Курсы лекций были финансово поддержаны международными оптическими обществами SPIE и OSA и изданы в виде учебных пособий для слушателей.

С начала рассылки SFM 2018 Call For Papers на сайте побывало около 3200 человек. За это время ими было просмотрено более 40000 страниц. Всего на сайте SFM зарегистрировано 2505 человек (106 новых участников зарегистрировались в этом году). В 2018 году на сайте SFM побывал 421 зарегистрированный пользователь из более, чем 20 стран. В SFM'18 приняли участие (включая слушателей) более 500 человек из более, чем 30 стран, среди которых: Россия, США, Великобритания, Германия, Франция, Испания, Португалия, Италия, Дания, Финляндия, Польша, Болгария, Белоруссия, Украина, Эстония, Казахстан, Египет, Иран, Израиль, Китай, Индия, Япония, Южная Корея, Австралия и др. Российская часть авторов докладов представлена учеными из ведущих ВУЗов и научно-исследовательских центров Москвы и Московской области, Санкт-Петербурга, Самары, Нижнего Новгорода, Казани, Саратова, Волгограда, Ростова-на-Дону, Орла, Калининграда, Новосибирска, Красноярска, Благовещенска и других. Часть устных презентаций от имени своих научных групп была сделана молодыми учеными, подготовившими к защите свои кандидатские диссертации. Участниками Симпозиума было представлено 21 пленарная лекция, в том числе 2 интернетовских, 33 приглашенных лекции (из них 21 приглашенная интернет-лекция), 127 устных докладов, 285 стендовых и 45 интернет-докладов.

Пленарные лекции по актуальным проблемам фотоники и биофотоники были прочитаны ведущими мировыми экспертами. Проф. **Jürgen Kurths** из Humboldt University и Potsdam Institute for Climate Impact Research (Германия) выступил с лекцией, посвящённой количественной стабильности в детерминированных и стохастических сложных системах. Др. **Анна Ярославская** из University of Massachusetts (Лоувел, США) в своей лекции коснулась проблем оптической дозиметрии экстраоральной фотобиомодуляционной терапии орофарингеального мукозита. Лекция проф. **Turgut Durduran** из The Institute of Photonic Sciences (Барселона, Испания) была посвящена

оптическим методам неинвазивного измерения кровотока. Профессора из University of Houston (Хьюстон, США) **Metin Akay** и Московского государственного университета **Илья Федотов** обсудили вопросы, касающиеся современных оптических и магнито-резонансных методов исследования мозга. Проф. **T. Randall Lee** из University of Houston (Хьюстон, США) и проф. **Николай Г. Хлебцов** из Института биохимии и физиологии растений и микроорганизмов РАН (Саратов) представили лекции об использовании плазмонных и магнитных частиц в биомедицине. Оптическим исследованиям молекулярных и микрореологических механизмов взаимодействия и изменения компонентов крови в микроциркуляторной системе была посвящена лекция доц. Московского государственного университета **Александра В. Приезжева**. Проф. **Екатерина Галанжа** из University of Arkansas for Medical Science (США) остановилась на проблемах *in vivo* цитометрии меланомных опухолевых клеток в кровотоке. Проф. **Ronald Sroka** из Hospital of University of Munich (Мюнхен, Германия) представил лекцию, посвящённую фрагментации камней в урологии. Оптическому обнаружению клинических патологий была посвящена лекция проф. **Francesco S. Pavone** из European Lab. for Non-linear Spectroscopy (Флоренция, Италия). Доц. **Ekaterina Borisova** из Institute of Electronics, Bulgarian Academy of Sciences (София, Болгария) коснулась проблем фотодиагностики стресс-индуцированной желудочно-кишечной неоплазии. Визуализация эмбрионов и эластография биотканей была рассмотрена в лекции Кирилла Ларина из University of Houston (Хьюстон, США). Проф. **Юрий Кистенёв** из Томского государственного университета рассмотрел подходы молекулярной визуализации и машинного обучения для медицинских применений. Оптике биологических тканей и оптическому просветлению была посвящена лекция **Валерия В. Тучина** из Саратовского государственного университета. Проф., **Григорий Н. Гольцман** из Московского государственного педагогического университета (Москва, Россия) выступил с лекцией, посвящённой последним оригинальным разработкам в области сверхпроводящих детекторов терагерцового и инфракрасного излучения на основе NbN. Лекция проф. **Андрея Сапелкина** из Queen Mary University of London (Лондон, Великобритания) была посвящена новым методам визуализации с пространственным разрешением, выходящим за дифракционный предел, за счет спектральной сепарации сигналов. Проф. **Валерий П. Захаров** из Самарского государственного университета в своей лекции остановился на биомедицинских экспериментах в космосе. К.т.н. **Кирилл Зайцев** из ИОФ РАН им. А.М. Прохорова и МГТУ им. Н.Э. Баумана представил пленарный доклад от имени несколько научных групп (К.И. Зайцев, В.Е. Карасик, В.Н. Курлов, В.В. Тучин, И.В. Решетов), посвященный современным проблемам терагерцовой диагностики злокачественных новообразований различной локализации; доклад включал как обзор современного состояния исследований в рассматриваемой области, так и оригинальные результаты коллектива авторов.

Проф. **Максим Скоробогатый** из Polytechnique Montreal (Монреаль, Канада) стал участником пленарной интернет-сессии с лекцией, посвящённой современным проблемам терагерцовой фотоники, в том числе – проблеме высокоскоростных терагерцовых беспроводных коммуникаций и проблеме высокоразрешающей терагерцовой визуализации. Проф. **Ruikang K. Wang** из University of Washington (США) представил интернет-лекцию «Неинвазивное оптическое изображение микроструктуры ткани и микроциркуляции *in vivo*».

Несмотря на бурное развитие информационных технологий, число стендовых докладов постоянно увеличивается, так как основной целью мероприятия является не столько сообщение о полученных результатах (публикация), сколько обсуждение этих результатов с авторитетными специалистами как из России, так и из-за рубежа. Именно такую возможность предоставил Симпозиум молодым ученым и студентам. Среди стендовых докладов, представленных студентами и аспирантами, второй год подряд проводится конкурс, поддержанный программой SPIE FOCUS. На закрытии Симпозиума и Школы были объявлены победители и вручены ценные призы. Среди призёров аспирантов оказались Авдеева Елена из Института биохимии и физиологии растений и микроорганизмов РАН (I место), Плеханов Антон из Приволжского исследовательского медицинского университета, Нижний Новгород (II место) и Лыкина Анастасия из Самарского государственного университета (III место). Студенты-призёры конкурса: Ермолинский Петр (МГУ) (I место), Рыбалова Елена (СГУ) и Кандурова Ксения (Орловский государственный университет) (II место) и Баско Елизавета (СГУ), Устинова Анастасия (Самарский государственный университет) и Михаил Мезенцев (Научно-технологический центр биомедицинской фотоники, Орел) (III место).

Комиссия, в состав которой входили председатели конференций и пленарные лекторы, отметила научную значимость и новизну результатов, а также высокое качество представления материала и ответов на вопросы.

На конференции «Оптические технологии в биофизике и медицине XX» было представлено 10 приглашённых лекций, 11 устных и 87 стендовых докладов. Приглашённые лекции по современным проблемам биофотоники, прозвучавшие на конференции, касались широкого спектра проблем современной биомедицины и качества жизни, в частности, бимодальной спектроскопии тканей, разработки волоконно-оптических зондов для медицины, оптической когерентной томографии патологических биотканей, спектроскопии комбинационного рассеяния кожи. На семинаре прозвучали устные доклады молодых учёных из Гданьского университета (Польша), Университета Оулу (Финляндия), Московского государственного университета, С.-Петербургского национального исследовательского университета информационных технологий, механики и оптики, С.-Петербургского политехнического университета, Самарского национального исследовательского университета, Национального исследовательского Томского политехнического университета и др. Доклады охватывали широкий спектр вопросов, касающихся оптических методов диагностики различных заболеваний и лазерного воздействия на клетки и биоткани. В стендовой секции приняли участие молодые учёные, аспиранты и студенты ведущих ВУЗов, НИИ и клиник России.

Одна из сессий конференции была совмещена с заседанием семинара «Микроскопические и низкокогерентные методы в биомедицинских и других приложениях XI». На семинаре были также представлены 7 стендовых и 2 интернет-доклада.

В программу конференции «Лазерная физика и фотоника XX» вошли 19 устных докладов, 49 стендовых докладов и 8 интернет-докладов. Продолжающийся рост числа интернет- и стендовых докладов отражает высокую активность молодых ученых и студентов, традиционно составляющих основную часть докладчиков указанных секций. Участниками конференции были учёные, аспиранты и магистранты, представляющие университеты и научно-исследовательские институты Москвы, Дубны, Самары, Саратова, Санкт-Петербурга, Волгограда, Новосибирска. Среди соавторов докладов - ученые США, Германии, Монголии, Финляндии, Казахстана. Тематика докладов была весьма разнообразной, что отражает современное состояние и тенденции развития лазерной физики и фотоники. Общим для подавляющего большинства докладов являлось то, что они были посвящены проблемам переднего края лазерной науки. Конференция началась с обсуждения проблем квантовой оптики, где центр тяжести все более сдвигается в сторону разработки аппаратной части будущих квантовых компьютеров (запутанные состояния, кубиты). Широко обсуждались новые квантовые и классические системы для фотоники (микроструктурные волноводы, квантоворазмерные системы). Наряду с системами предельно низких энергий для квантовой информатики, рассматривались физические модели процессов, родственных рождению пар «частица-античастица» из вакуума в мощных лазерных полях, причем полезной модельной средой оказался графен. Новые достижения были отмечены и в сложившихся областях лазерной физики, таких как поляризационная оптика. Тематику докладов по математическому моделированию объединяла разработка численных и аналитических подходов, в равной степени применимых как к задачам лазерной оптики пучков и волноводов, так и к задачам о связанных состояниях и рассеянии в атомных системах. Традиционно для данной конференции заметная часть докладов была посвящена приложениям лазеров в обработке материалов, новых технологиях, спектроскопии и зондировании природных и техногенных систем. Интенсивное обсуждение указанных вопросов продолжалось во время стендовой сессии и мероприятий социальной программы симпозиума.

На конференции «Спектроскопия и молекулярное моделирование XIX» было представлено 24 доклада: 15 устных, 9 стендовых и 1 интернет сообщение. Участники работы секции и авторы докладов - учёные, аспиранты и магистранты, представляющие Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского РАН, Москва, Институт физики НАН Украины, Киев; Самарский национальный исследовательский госуниверситет; Саратовский национальный исследовательский госуниверситет; Саратовский государственный технический университет; Волгоградский госуниверситет; Саратовский государственный медицинский университет, Балтийский федеральный университет им. И. Канта, Астраханский госуниверситет. В докладах были рассмотрены результаты

исследований структуры и свойств соединений, представляющих интересных со стороны фундаментальной науки (физики, химии, биологии) и приложений. Это – вновь синтезированные вещества, наносистемы и др., используемые в современных технологиях, фармацевтике, медицине. В проведенных исследованиях использованы современные квантово-механические методы молекулярного моделирования (метод теории функционала плотности), методы теоретической и экспериментальной оптической спектроскопии.

На 14-ой конференции «Нанобиофотника» были представлены 1 пленарный доклад, 17 устных, 21 стендовый доклад и 1 интернет-сообщение. Секция устных докладов открылась докладами исследователей Института прикладной физики (Inst. Applied Physics, Nat'l Research Council, Florence, Italy), посвященным исследованию интеграции плазмонных частиц в мультифункциональные устройства (Fulvio Ratto), и применению золотых наностержней для фотоакустической тераностике (Lucia Cavigli). Учеными из ИБФРМ РАН были представлены несколько докладов в рамках устной и стендовой сессий, которые были посвящены оптическим свойствам покрытых полидофамином наночастиц золота.

В этом году была проведена очередная конференция «Интернет биофотоника XI». На конференции было представлено 51 интернет-докладов, из них 2 пленарные лекции, 21 приглашенная интернет-лекция и 28 интернет-докладов. Участники из Канады, США, Китая, Португалии, Болгарии, Российской Федерации, Германии, Южной Кореи, Беларуси, Индии, Швейцарии, Израиля, Польши, Франции, Латвии и Ирана размещали свои доклады на веб-сайте конференции, который был доступен в течение конференции и будет доступен для пользователей в течение всего года до следующей конференции. Среди лекторов и докладчиков были известные специалисты в области биомедицинской оптики и рассеяния света, спектроскопии, компьютерного моделирования, нанотехнологий, манипуляций с наночастицами, фотодинамической терапии и т.д.: Luís Oliveira (Institute of Biomedical Sciences Abel Salazar – University of Porto, Порто, Португалия), Jürgen Lademann и Maxim E. Darvin (Charité - Universitätsmedizin Berlin, Department of Dermatology, Venerology and Allergology, Center of Experimental and Applied Cutaneous Physiology, Берлин, Германия), J. Spigulis (University of Latvia, Латвия), Rinat O. Esenaliev (University of Texas Medical Branch, США), Zeev Zalevsky (Bar Ilan University, Израиль), Ekaterina Borisova (Institute of Electronics, Болгария), Małgorzata Jędrzejewska-Szczerska (Gdańsk University of Technology, Польша), Walter Blondel (University of Lorraine, Франция) и др. При этом необходимо отметить растущую год от года активность студентов и аспирантов, составивших значительную часть участников конференции. Темы докладов касались различных областей биофотоники и оптики биотканей, включая спектроскопию терагерцового диапазона, отражательную спектроскопию, фотодинамическую терапию, оптоакустику, оптическую диффузионную томографию, оптическую когерентную томографию, управление оптическими характеристиками биотканей, спектроскопию комбинационного рассеяния, многофотонную микроскопию, микробиологию, транспорт наночастиц и лекарственных препаратов в биотканях, математическое моделирование и т.д., причем многие доклады были сделаны на основе совместных исследований проведенных российскими и зарубежными учеными. Использование специально разработанного программного обеспечения позволило провести on-line дискуссию по большинству представленных докладов. Год от года важность этой части конференции возрастает, благодаря удобству такого способа обмена научной информацией.

На конференции «Низкоразмерные структуры VIII» было представлено 37 докладов, из них 7 устных, 26 стендовых и 4 интернет-доклада. Докладчиками были представители следующих организаций – Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе РАН, Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана, Санкт-Петербургский академический университет, Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Институт биотехнологии и молекулярной медицины (Польша), Институт механизмов жидкостного охлаждения имени Севальского Польской академии наук, Гданьский политехнический университет (Польша), Калифорнийский технологический институт (США), Гданьский университет (Польша), Институт проблем точной механики и управления РАН, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратовский государственный технический университет имени Ю.А. Гагарина. Семинар характеризовался

высокой степени участия молодых ученых и студентов, которые были соавторами большинства устных докладов и докладчиками в стендовой секции. Доклады конференции отражали современное состояние нанотехнологий, применяемых в биомедицине и электронике. На заседании секции обсуждались такие важные научные вопросы, как образование низкоомного омического контакта Pd-Ge-Au с n-GaAs, двумерные коллоидные суспензии во вращающихся электрических полях, полиэлектролитные капсулы, функционализированные наночастицами магнетита для контроля контрастности, точная динамика двухуровневой квантовой системы, формирование и изучение свойств монослоев наночастиц меди на границе раздела фаз «газ-жидкость» и «газ-твёрдое тело», электропроводность и эмиссионные свойства колонного графена, алгоритмы построения полноатомных моделей бесшовных переходов между однослойными углеродными нанотрубками.

На семинаре «Биомедицинская спектроскопия V» было представлено 13 докладов. Устная сессия включала 5 докладов, из которых 1 доклад был представлен приглашенным лектором Евгением Ширшиным (Университет им. Гумбольдта, Берлин, Германия, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Россия). 4 доклада были представлены молодыми учеными из различных высших учебных заведений: Московский государственный университет, Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта, Саратовский государственный технический университет, Самарский государственный университет, Саратовский государственный университет. Стендовые доклады были представлены молодыми учеными и студентами из Орловского, Самарского, Саратовского, Оренбургского, Томского и Московского государственных университетов.

На конференции «Компьютерная биофизика и анализ биомедицинских данных V» было представлено 52 доклада, из них: устных – 10, стендовых – 42. Авторские коллективы докладов представляли 9 городов России (Саратов, Москва, Курск, Пущино, Санкт-Петербург, Самара, Пермь, Волгоград, Магнитогорск), а также США, Италию, Испанию, Иран и Германию. Устная сессия прошла в атмосфере активной дискуссии. Как и в четыре предыдущих года, наблюдается выраженное доминирование двух направлений в рамках конференции, из которых первое - это различные проблемы, связанные с исследованием функций мозга, в том числе - передовые вычислительные методы для обработки данных нейронной активности методом электроэнцефалографии. Второе направление - это различные вопросы изучения и моделирования процессов функционирования сосудистой системы. Повышенный интерес у представителей самых различных направлений вызвали доклад Andrew T. Lopez (США) «Biomechanical analysis of the embryonic mouse heart by OCT and optogenetic control» по применению оптических методов для визуализации биомеханики сердца. Стендовая сессия прошла в обсуждении самых различных тем. В частности, оживленные дискуссии вызвала серия работ по диагностике характера решаемых мозгом задач на основе автоматизированного анализа данных.

В рамках семинара «Передовые поляризационные и корреляционные технологии в биомедицине и материаловедении V» были представлены 18 научных докладов: 10 устных и 8 стендовых. Представленные научные доклады были посвящены современным спектрально-поляризационным и спекл-корреляционным методам зондирования рассеивающих сред, обсуждались возможности и перспективы применения оптических методов в материаловедении и биомедицине. Устные доклады преимущественно были выполнены молодыми учеными и аспирантами.

На семинаре «Нелинейная динамика IX» было представлено 15 докладов: 7 устных и 8 стендовых. Традиционно, подавляющее большинство докладов участников секции было посвящено особенностям динамики распределенных колебательных систем и исследованиям формирования в них пространственных структур. Также ряд представленных работ был связан с применением методов нелинейной динамики к задачам медицины. Все научные доклады, представленные во время семинара, соответствовали высокому научному уровню и неизменно вызывали активную дискуссию между участниками.

На семинаре «Электромагнетизм микроволн, субмиллиметровых и оптических волн XVIII» было представлено 15 докладов, из них устных – 7, стендовых – 7 и 1 интернет-доклад. Среди авторов - представители Саратовского государственного университета, Института точной механики и проблем управления РАН (Саратов), Саратовского филиала ИРЭ РАН им. В.А. Котельникова

(Саратов) и Института химии высокочистых веществ имени Г.Г. Девярых РАН, Нижний Новгород. Семинар характеризовался высокой степенью участия молодых ученых и студентов, которые представляли большую часть устных докладов и были докладчиками в стендовой секции. Тематика докладов, представленных в устной форме, была достаточно широкой и включала результаты как теоретических, так и экспериментальных исследований. Были отражены проблемы наноплазмоники, наноэлектроники и нанофотоники, создания трехмерных фотонных кристаллов и фотонно-кристаллических волноводов, моделирования ТГц усилителей и источников терагерцевого излучения, моделирования вакуумных приборов, в частности ТГц замедляющих систем и синхронизации гиротронов высокой мощности. Стендовые доклады были посвящены усилению ТГц плазмонов, проблеме обратных плазмонов, мета-поверхностям с плазмонами, моделированию ТГц замедляющих систем для ЛБВ, резистивным пленкам как замедляющим структурам в ТГц электронике, моделированию электронного транспорта в вакуумных фотосенсорах, автоэлектронной эмиссии в планарных пленочных структурах и локализации тепловых источников. Интернет доклад был посвящен методам анализа и свойствам плазмон-поляритонов в плоскостных структурах.

Конференция «Терагерцевая оптика и биофотоника» в 2018 году проводилась впервые. На конференции было представлено 9 устных докладов, из них 3 приглашённых. Тематика докладов охватывала фундаментальные и прикладные вопросы терагерцевых технологий, применений терагерцевого излучения в биомедицинских целях, вопросы спектроскопии органических веществ и биологических сред и тканей, спектроскопии воды и водных растворов, а также особенности современной элементной базы и инструментов терагерцевой оптики, в том числе – терагерцевых квантово-каскадных лазеров и методов терагерцевой визуализации с суб-волновым пространственным разрешением. В рамках конференции было сделано четыре приглашенных доклада, три устных и четыре стендовых доклада. В работе конференции приняли участие студенты, аспиранты и сотрудники разных ВУЗов (ИТМО, МИФИ, МГТУ им. Н.Э. Баумана, СГУ им. Н.Г. Чернышевского) и институтов РАН (ИОФ РАН, ИФТТ РАН, ИСВЧПЭ РАН).

В 2018 году впервые была проведена конференция «Новые материалы для оптики и биофотоники». На конференции было представлено 7 устных докладов, из них 2 приглашённых. Тематика докладов охватывала современные разработки в области новых материалов, сочетающих высокие оптические характеристики с высокой механической прочностью, химической инертностью, термической стойкостью и биосовместимостью, что позволяет использовать их для решения широкого спектра задач биологии и медицины. В рамках конференции было сделано семь докладов; среди них два приглашенных и пять устных. В работе конференции приняли участие студенты, аспиранты и сотрудники Imperial Collage of London, ИТМО, МИФИ, МГТУ им. Н.Э. Баумана, СГУ им. Н.Г. Чернышевского, ИОФ РАН, ИФТТ РАН и ИСВЧПЭ РАН.

XXII Международная школа для студентов и молодых ученых по оптике, лазерной физике и биофотонике проходила в г. Саратове с 24 по 28 сентября 2018 года в рамках традиционной конференции «Saratov Fall Meeting 2018». В 2018 году Школа сопровождалась выставкой оптических медицинских измерительных приборов «Ярмарка инновационных технологий в биофотонике» (в рамках секции «Управление в области высоких технологий и региональные инновационные проекты XV» и сопряженной Школы ADFLIM) и образовательными лекториями, семинарами и круглыми столами: «Современная оптика XVII», «Английский язык как средство коммуникации в научном сообществе XVII», «История, методология и философия оптического образования XI» и «Телемедицина: возможности, приложения, перспективы XIII». Студентам, молодым ученым и школьникам была предоставлена возможность прослушать краткие курсы лекций: Рональд Срока (Ronald Sroka) из LIFE-центра при клинике Мюнхенского университета, Германия; Тургут Дурдуран (Turgut Durduran) из Институт фотонных наук, Испания; и Анна Ярославская из Массачусетского университета, Лоуэлл, США. Лекции были посвящены актуальным проблемам биофотоники и применению современных оптических технологий в биомедицине. Лекции вызвали большой интерес и дискуссию участников Школы. Курсы прослушали более 300 участников Школы, в основном студенты, аспиранты и молодые научные сотрудники различных университетов и научных организаций страны. Курсы лекций были частично финансово поддержаны международными оптическими обществами SPIE и OSA и изданы в виде учебных пособий для слушателей.

На семинар «История, методология и философия оптического образования» зарегистрировались 42 докладчика. Было сделано, включая Круглый стол «Человек и свет в естественнонаучной и художественной картине мира» - 33 устных, 3 стендовых и 1 интернет-доклада. Всего – 37 докладов. Как и в 2017, семинар продолжает демонстрировать значительное расширение междисциплинарных связей. В работе семинара принимали активное участие студенты, молодые ученые и профессорско-преподавательский состав 6 факультетов СГУ (в том числе - физического, нано- и биомедицинских технологий, механико-математического, химического, биологического, компьютерных наук и информационных технологий, а также кафедры философии СГТУ), а также студенты СГТУ, МГУ, сотрудники Института критических технологий ОАО «Тантал». В работе семинара участвовали: 8 профессоров, 12 доцентов, 2 молодых ученых, кандидатов наук, 2 аспиранта, 1 магистр, 5 студентов бакалавриата и 7 магистратуры. На двух заседаниях секции с учетом стендовой, общее количество участников составило 48 человек. Заседания сопровождались многочисленными вопросами и оживленной дискуссией.

На секции «Английский язык как средство коммуникации в научном сообществе XVII» из 5 докладов 2 доклада были представлены молодыми учеными, 1 доклад представлен студентом. В семинаре участвовали представители Саратовского государственного университета.

На секции «Телемедицина: возможности, приложения, перспективы XIII» присутствовало 80 человек. Из них 55 студентов, 12 ординаторов, остальные докладчики и преподаватели.

Наибольший интерес у слушателей вызвал семинар-лекторий «Современная оптика XVI», который был организован для студентов-физиков бакалавриата, магистратуры, аспирантов и молодых ученых, специализирующихся в области оптической физики и ее приложений в высоких технологиях и в биомедицине, а также - в значительной степени - для учащихся старших классов школ, лицеев и гимназий со специализированными направлениями подготовки учащихся. О передовых технологиях в исследованиях мозга рассказал профессор Франческо Павоне из Европейской лаборатории нелинейной спектроскопии. Переводил выступление иностранного гостя доцент кафедры оптики и биофотоники А.Б. Правдин. Во второй части лектория выступил молодой научный исследователь из США Эндрю Л. Лопес III с докладом «Проливая свет на биологию и оптогенетику». Лекторий завершило шоу оптических явлений «Восхитительный свет». Световыми метаморфозами зрителей удивлял доцент кафедры оптики и биофотоники И.В. Федосов. На лектории присутствовало более 320 школьников, лицеистов, гимназистов из Саратова и Энгельса.

В SFM'18 приняли участие (включая слушателей) более 800 человек из более чем 30 стран, среди которых: Россия, США, Канада, Великобритания, Германия, Франция, Австрии, Испания, Португалия, Латвии, Италия, Дания, Финляндия, Польша, Болгария, Белоруссии, Украина, Казахстан, Иран, Израиль, Китай, Индия, Южная Корея и др. Российская часть авторов докладов представлена учеными из ведущих ВУЗов и научно-исследовательских центров Москвы и Московской области, Санкт-Петербурга, Самары, Нижнего Новгорода, Казани, Астрахани, Тамбова, Оренбурга, Саратова, Волгограда, Орла, Калининграда, Курска, Магнитогорска, Томска, Новосибирска и других. Часть устных презентаций от имени своих научных групп была сделана молодыми учеными, подготовившими к защите свои кандидатские диссертации. Несмотря на бурное развитие информационных технологий, число стендовых докладов постоянно увеличивается, так как основной целью мероприятия является не столько сообщение о полученных результатах (публикация), сколько обсуждение этих результатов с авторитетными специалистами, как из России, так и из-за рубежа. Именно такую возможность предоставила Школа молодым ученым и студентам. Среди стендовых докладов, представленных студентами и аспирантами, второй год подряд проводится конкурс, поддержанный программой SPIE FOCUS. Цели конкурса – выявление и поощрение активности талантливых молодых ученых, содействие профессиональному росту молодежи, повышение престижа естественнонаучного и технического образования, привлечение молодежи в научно-инновационную деятельность. На закрытии Симпозиума и Школы были объявлены победители и вручены ценные призы. Комиссия, в состав которой входили председатели конференций и пленарные лекторы, отметила научную значимость и новизну результатов, а также высокое качество представления материала и ответов на вопросы. Среди аспирантов победителями были награждены:

1) Авдеева Елена, Института биохимии и физиологии растений и микроорганизмов РАН Саратов, Россия;

2) Плеханов Антон, Приволжский исследовательский медицинский университет, Нижний Новгород, Россия;

3) Лыкина Анастасия, Самарский государственный университет, Россия;

Из студентов:

1) Ермолинский Петр, МГУ, Россия;

2) Рыбалова Елена, СГУ и Кандурова Ксения, Орловский государственный университет, Россия;

3) Баско Елизавета, СГУ; Устинова Анастасия, Самарский государственный университет; Михаил Мезенцев, Научно-технологический центр биомедицинской фотоники, Орел, Россия.

Официальными языками Школы были русский и английский. По окончании школы студентам, аспирантам и молодым ученым, прослушавшим курсы лекций и подготовившим доклады на семинарах школы, выдавались соответствующие сертификаты. Все доклады конференций были представлены на английском языке. Обсуждения и дискуссии проводились на русском и английском языках.

Материалы Симпозиума и Школы будут опубликованы в следующих изданиях:

Спецвыпуск журнала Квантовая электроника: Т. 49, №1, 2019.

Спецвыпуск журнала Journal of Biomedical Photonics and Engineering SFM'18: Biophotonics Technologies, Vol. 4, No. 4, 2018.

Сборник трудов симпозиума SPIE Proceedings: Vol. SFM100 Saratov Fall Meeting 2018: Optical and Nano-Technologies for Biology and Medicine, 2019.

Сборник трудов симпозиума SPIE Proceedings: Vol. SFM200 Saratov Fall Meeting 2018: Laser Physics, Photonic Technologies, and Molecular Modeling, 2019

Сборник трудов симпозиума SPIE Proceedings: Vol. SFM300 Saratov Fall Meeting 2018: Computations and Data Analysis: from Nanoscale Tools to Brain Functions, 2019

Проблемы оптической физики и биофотоники. Сборник трудов SFM-2018: 2018, Саратов, Изд-во "Новый ветер", ISBN 978-5-98116-235-0.

Учитывая важность, перспективность и методическую ценность научной тематики Симпозиума, а также быстрый рост молодых кадров и необходимость их интегрирования в международную науку, решено провести очередной Симпозиум в 2019 году.

Председатель 6-го Международного симпозиума и  
22-й Международной междисциплинарной молодежной научной школы,  
профессор, доктор физико-математических наук

*В. В. Тучин*

Секретарь 6-го Международного симпозиума и  
22-й Международной междисциплинарной молодежной научной школы,  
доцент, доктор физико-математических наук

*Э. А. Генина*

Председатель организационного комитета  
22-й Международной междисциплинарной молодежной научной школы,  
доцент, доктор физико-математических наук

*Г. В. Симоненко*

## ОПТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

### ОПТИЧЕСКАЯ ЦИФРОВАЯ РЕГИСТРАЦИЯ СЕДИМЕНТАЦИИ ЭРИТРОЦИТОВ И ЕЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ФОРМЕ КОЛЛЕКТИВНОГО ПРОЦЕССА

В.А. Дубровский<sup>1</sup>, К.Н. Дворецкий<sup>1</sup>, С.В. Марков<sup>2</sup>, Е.П. Карпочева<sup>3</sup>, В.В.Тучин<sup>2,4</sup>

<sup>1</sup> Саратовский государственный медицинский университет,

<sup>2</sup> Саратовский национальный исследовательский государственный университет,

<sup>3</sup> Саратовский региональный центр переливания крови,

<sup>4</sup> Институт проблем точной механики и управления РАН

С помощью цифровой видеотехники исследуется зависимость скорости седиментации донорской крови от степени ее разведения физраствором в пределах от соотношения 1:400 до 1:1 (цельная кровь). Экспериментально обнаружено существенное возрастание скорости оседания крови при больших уровнях ее разведения, а также, наоборот – при концентрациях эритроцитов, близких к цельной крови. В то же время скорость седиментации крови снижалась в несколько раз при ее разведении в пределах 30÷50%.

Построена теоретическая модель оседания крови для двух случаев: 1) седиментация свободных эритроцитов (сильное разведение крови) и 2) оседание эритроцитарных агрегатов (слабое разведение крови, вплоть до цельной крови). Особенность модели заключается в том, что предложено рассматривать оседание клеток и/или их агрегатов в виде коллективного эффекта, а не в традиционной форме оседания индивидуальных или взаимодействующих друг с другом частиц. При этом оседающий слой крови рассматривается как пористый диск, количество пор которого, их размеры зависят от степени разведения исходного образца крови, а также от наличия или отсутствия эритроцитарных агрегатов, их размеров и свойств. Показано, что данная модель при использовании некоторых эмпирических констант дает удовлетворительное совпадение с экспериментальными закономерностями.

Проведенное исследование представляется полезным для понимания процесса седиментации эритроцитов. Кроме того, оно предполагается к использованию при разработке акусто–оптического метода определения групповой принадлежности крови.

#### ВВЕДЕНИЕ

Явление расслоения крови на клеточную и плазменную фракции, а также зависимость скорости этого процесса от типов заболеваний было обнаружено польским врачом Эдмундом Биернаки в 1894 г. [1]. Однако лишь в 1921 г. это явление нашло применение в медицинских диагностических целях после того, как Альф Вестергрэн предложил способ измерения скорости оседания эритроцитов в цельной крови в вертикально установленной узкой трубке [2]. С тех пор поныне скорость оседания эритроцитов (СОЭ) остается одним из самых надежных, традиционных тестов в клинической лабораторной практике [3]. В то же время нельзя не отметить некоторую неоднозначность этого метода исследования. Так стандартные значения СОЭ «иногда могут наблюдаться в терминальных стадиях заболевания, а при, казалось бы, легких заболеваниях величина СОЭ может быть весьма высокой» [4]. Такая диагностическая неоднозначность метода СОЭ, несмотря на длительное и широкое его применение, обусловлена, как ни странно, недостаточной его проработкой [5]. Эта же причина приводит к ограниченному использованию потенциальных возможностей этого метода диагностики [4]. По нашему мнению, изучение диагностического метода СОЭ и явления седиментации крови в целом ведутся в следующих направлениях:

- 1) клинические исследования – наблюдение пациентов и установление связи величин СОЭ с типом и характером заболеваний [6–9];
- 2) лабораторные исследования – изучение влияния различных биохимических, иммунологических и физических факторов на скорость седиментации эритроцитов и их ассоциатов (экспериментальное моделирование) [4,9–15];
- 3) усовершенствование метода СОЭ [3,16,17]
- 4) физическое и математическое моделирование механизмов, приводящих к явлению оседания клеток и их комплексов [4,13–15,18–23].

Существует несколько подходов к описанию механизмов седиментации крови. Рассмотрим, прежде всего, те работы, которые близки к математическому моделированию оседания крови, индивидуальных эритроцитов, их групп и ассоциатов, а также эксперименты, относящиеся к данной проблеме. Проводимый здесь анализ статей не претендует на полноту, да это и невозможно при

обилии работ этого направления. Его цель – выявить некоторые экспериментальные феномены, которые встречают трудности при их трактовке на основе общепринятых представлений об оседании крови; на основе собственных экспериментальных и теоретических исследований предложить математическую модель седиментации раствора крови в зависимости от концентрации эритроцитов.

Наиболее упрощенным является анализ индивидуального осаждения эритроцитов (RBC – red blood cell) в представлении клеток в форме шара, такой подход основан на использовании закона Стокса [24]:

$$F_{\text{тр}} = 6\pi\eta vr, \quad (1)$$

где  $r$ ,  $v$ ,  $\eta$  – соответственно радиус шара, скорость его движения в жидкости и ее коэффициент вязкости. Формулу (1) принято именовать как формулу Стокса, а силу трения  $F_{\text{тр}}$  – как силу Стокса  $F_s$ .

Во многих работах эритроцит ассоциируют с эквивалентным шаром, причем обычно делают это двояко:

а) либо средний объем эритроцитов с известным радиусом  $r_{\text{RBC}}$  приравнивают к объему некоего шара с радиусом  $r$ , тогда этот радиус  $r$  принимается за радиус эквивалентного «шара–эритроцита»  $r_{\text{эп}}$ ;

б) либо по формуле  $r_{\text{эп}} = 0.71r_{\text{RBC}}$ , которая учитывает пространственную ориентацию оседающего эритроцита [25, 26].

Заметим, что обе оценки дают примерно одинаковый результат:  $r_{\text{эп}} \approx 2.75 \mu\text{м}$ . С учетом (1) легко получить известную формулу для скорости седиментации шара (эквивалентного шарообразного эритроцита) в жидкости  $v$ , помещенной в цилиндр:

$$v = 2r^2 g(\rho_{\text{ш}} - \rho_{\text{ж}}) / 9\eta(1 + 2.4r/R), \quad (2)$$

где  $\rho_{\text{ш}}$  и  $\rho_{\text{ж}}$  – плотности шара и жидкости соответственно,  $g$  – ускорение свободного падения,  $R$  – радиус цилиндра с жидкостью. Скобка в знаменателе (2) учитывает влияние размера (радиуса) цилиндра на скорость оседания шара  $v$  [27]; в случае одиночного эритроцита этим влиянием можно пренебречь, так как  $r = r_{\text{эп}} \ll R$ .

Однако, в цельной крови эритроциты расположены чрезвычайно близко друг к другу – расстояние между соседними эритроцитами меньше размеров самих эритроцитов. Это приводит к необходимости учитывать влияние соседних эритроцитов на процесс седиментации анализируемой клетки [18, 25]. Заметим, что в процессе седиментации эритроцитов формируется встречный поток, который притормаживает движение эритроцитов за счет силы трения [14, 18]. Представляется, что по этой причине при оседании столба цельной или слабо разведенной физраствором крови начальная седиментация происходит медленно [4] – гравитационная сила почти компенсирована интегральной силой сопротивления движению эритроцитов, взаимопроникающая двухфазная система (надосадочная жидкость – седимент) практически находится в балансе.

Считается, что стартом к более интенсивной седиментации крови является формирование в образце «монетных столбиков» и, вслед за тем, эритроцитарных агрегатов [4, 10, 12–14, 18, 20, 22, 25, 28]. Описание седиментации RBC–агрегатов возможно на тех же принципах, что и оседание одиночных эритроцитов (формулы 1, 2). Однако, в отличие от идентичных RBC–шаров, эритроцитарные агрегаты имеют разные размеры, а, следовательно, необходимо вводить распределение агрегатов по размерам (эквивалентных шаров по диаметрам) [25]. Естественно, даже при таком модельном процессе оседание крови не происходит по типу – сначала формирование агрегатов определенных размеров и их распределения по размерам, а затем оседание агрегатов во времени. Эти процессы происходят одновременно, попытка моделирования такой конструкции предпринята в [25]. Однако, авторы [25] отмечают острую необходимость экспериментальной проверки сделанных теоретических построений.

Помимо «микроскопического» подхода к анализу седиментации крови, когда рассматривается оседание эритроцитов индивидуально или с учетом эритроцитарного окружения, или с учетом явления RBC–агрегации, существует иной механизм оседания крови, основанный на

«сетевой» модели строения образцов крови – модели Балаховского С.Д. [29]. В образцах крови им была обнаружена трехмерная клеточная сеть, состоящая из разветвляющихся «монетных столбиков». Тогда седиментация крови может рассматриваться как «проседание петель» этих сетей и их сближение друг с другом, а не седиментация отдельных клеток и их ассоциатов [4]. Отметим, что модель Балаховского С.Д. предполагает возможность коллективной седиментации крови: «проседание» одной петли сетей может стимулировать «проседание» других, связанных с первой. И, наконец, представляется важным отметить, что в рамках модели Балаховского С.Д., встречный поток проходит сквозь отверстия в сети.

Краткий обзор статей показывает, что ряд явлений обнаруженных экспериментаторами с трудом поддаются трактовке в рамках общепринятых моделей седиментации крови, например:

–при седиментации крови в капилляре «...столбик красной крови отрывается от мениска, разделяющего кровь и воздух, не сразу, а после латентного периода, продолжительностью в ряде случаев в десятки минут» [4];

–авторы [15,30–32] обнаружили, что в процессе седиментации крови наблюдаются кратковременные периоды (осцилляции) ускорения и замедления движения границы «плазма – эритроцитарная масса».

Во многих работах отмечается наличие пор, сквозь которые проходят потоки жидкости навстречу седиментации клеток. Естественно, эти потоки приводят к торможению клеток. В то же время, при математическом моделировании процесса такие поры вводятся неявно, а косвенно. Подобные потоки реализуются и в модели структуры крови Балаховского С.Д. Однако, нам не удалось найти работы по математическому моделированию седиментации крови в рамках этой модели.

Отметим еще одну особенность рассмотренных работ. В подавляющем большинстве они направлены на исследование процесса седиментации цельной или слабо разведенной физраствором крови. Их основная цель – изучение особенностей СОЭ как диагностического метода. Однако, явление седиментации эритроцитов и их ассоциатов (а возможно и других объектов биологического и небиологического происхождения) может использоваться и по другим направлениям, в частности для разработки акусто–оптического метода определения групповой принадлежности образцов крови [33–38]. В этих работах степень разведения крови в физрастворе составляла величину порядка 1:100 и даже больше (до 1:600). В [15] зависимость смещения границы «раствор плазмы – эритроцитарная масса» от времени наблюдения оседания крови измерялась, начиная от цельной крови и вплоть до концентраций крови в физрастворе 33%. При этом по мере разбавления крови скорость седиментации снижалась, хотя для заданной концентрации крови она слабо зависела от времени. А как будет вести себя кровь при столь сильных разведениях как в [33–38]? Будет ли СОЭ продолжать снижаться с увеличением степени разведения крови?

В целом, можно утверждать, что все известные нам математические модели оседания эритроцитов и их ассоциатов основаны на принципах микроскопии – анализ движения одиночного эритроцита или агрегата с использованием закона Стокса с учетом или без учета влияния окружающих клеток, ассоциатов. Цель настоящей работы – попытаться построить макроскопическую модель седиментации крови, когда анализируется не индивидуальное оседание эритроцита или RBC–агрегатов, а седиментация квазисплошного слоя крови, заполненного свободными эритроцитами и/или их агрегатами. В экспериментальном отношении целью работы является поиск зависимости скорости седиментации крови от степени ее разведения до уровней, используемых в [33–38]. Кроме того, эксперимент может выявить те эмпирические константы, которые, как правило, необходимы для построения или проверки теоретической модели.

## СЕДИМЕНТАЦИЯ ЭРИТРОЦИТОВ – ЭКСПЕРИМЕНТ

### 2.1. Условия и техника проведения эксперимента

Эксперименты по регистрации процесса седиментации раствора крови проводились на установке, изображенной на рис.1. Размеры внутренней полости прямоугольной кюветы 10x10x45мм. Степень разведения цельной донорской крови физраствором варьировалась: 1:400; 1:200; 1:100; 1:20; 1:10; 1:5; 3:10,1:2; 3:5; 4:5,1:1 (цельная кровь). Легко видеть, что с учетом размеров идентичных кювет выполнение лишь одной серии экспериментов с вышеперечисленными уровнями разведения крови требовало порядка 150 мл донорской крови. Поэтому, для получения столь значительного суммарного объема крови ее образцы разных доноров смешивались, однако,

все смешиваемые пробы были одного типа системы АВ0. Стоит заметить, что общее количество подобных экспериментальных серий составило 8, а длительность каждой из них, как это будет показано ниже, измерялось часами. В отличие от [15], где в цельную кровь добавлялся физраствор, здесь – наоборот: в физраствор добавлялась небольшая порция донорской крови, а затем взвесь перемешивалась с помощью микродозатора.

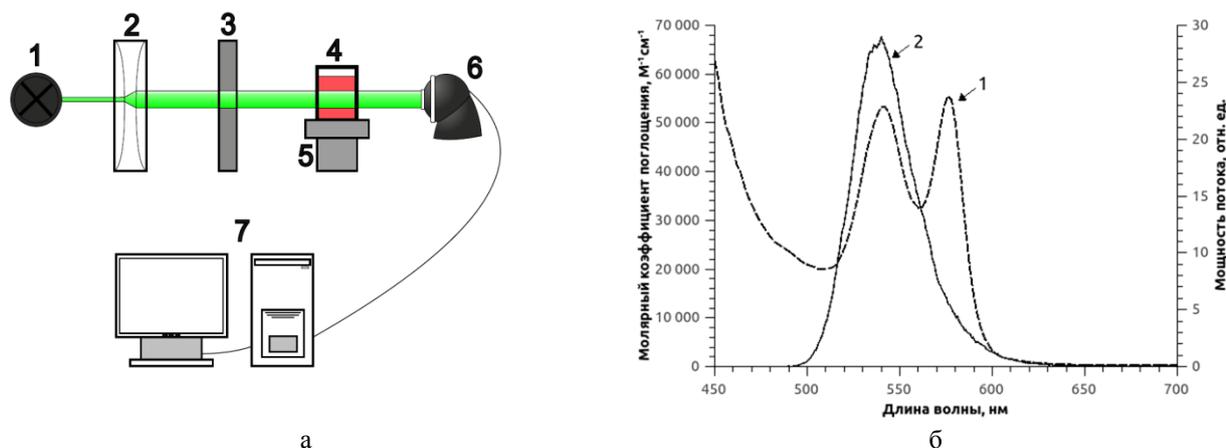


Рис. 1. Схема экспериментальной установки (а) и спектры зондирующего излучения и биообъекта (б): а) 1–источник света (светодиод), 2– телескопическая система линз, 3–светофильтр, 4–кювета с исследуемым раствором, 5–столик для крепления кювет, 6–цифровая камера, 7–компьютер; б) 1–спектр поглощения гемоглобина (левая ось ординат), 2–спектр излучения светодиода (правая ось ординат).

Естественно, вначале, в течение до 20–30 мин (в зависимости от степени разведения крови), взвесь находилась в турбулентном состоянии и лишь затем происходило равномерное оседание крови. Заметим, что здесь и далее мы стараемся избегать фраз «седиментация эритроцитов», используем «седиментация крови». Это обусловлено тем, что в экспериментах степень разведения крови варьируется в широких пределах, включая пробы с высоким содержанием эритроцитов, а, следовательно, с присутствием эритроцитарных агрегатов. Поэтому, на наш взгляд, выражение «седиментация эритроцитов» правильно использовать в случаях сильного разведения крови, когда вероятность образования эритроцитарных агрегатов мала (как будет показано экспериментально, такое пороговое разведение крови примерно составляет  $c \leq 30\%$ ).

Биообъект зондировался коллимированным излучением светодиода типа LXHL–G1S, спектр которого соответствовал спектру поглощения гемоглобина в зеленой области (рис.1б). Режим питания светодиода: напряжение 3 В, сила тока 0,3 А. Подбор спектра зондирующего светового излучения был продиктован необходимостью повышения контрастности фотоизображения границы «раствор плазмы – взвесь эритроцитов», что способствует повышению точности регистрации седиментации крови.

После прохождения сквозь образец, зондирующий луч попадал на полихромную web–камеру Logitech Quick Cam. Полученные цифровые фотокадры (файлы) подвергались разложению на RGB компоненты, причем анализировалась лишь G (зелёная) составляющая. Выбор G компоненты фотоизображения сопряжен со спектром поглощения света гемоглобином в зеленой области и, естественно, со спектром зондирующего излучения светодиода (рис.1б).

Техника эксперимента заключалась в следующем. Серия из 4–х кювет с разной степенью разведения крови устанавливалась на столик для крепления кювет; образцы одновременно просвечивались зондирующим лучом, а фотоизображение в виде ролика регистрировалось с помощью видеокamеры (рис.2). Одномоментная регистрация нескольких образцов растворов крови без их технического перемещения диктовалась необходимостью избежать нежелательного встряхивания образцов в ходе эксперимента. После проведения данной серии опытов, подобный эксперимент повторялся, но для кювет с иным процентным содержанием крови в физрастворе. Опыты в виде серий проводились с образцами  $A_{\beta}$  или  $B_{\alpha}$  типами крови.

## 2.2. Экспериментальные результаты.

Оседание крови при разных степенях ее разведения демонстрируют фотоизображения на рис. 2. Как отмечалось выше, опыты подобные рис. 2 проводились неоднократно. При этом от опыта к опыту абсолютные величины скоростей седиментации для данной концентрации крови в

физрастворе могли несколько варьироваться, однако, представленные на рис. 2 закономерности неизменно повторялись. Из рис. 2 следует, что максимальные значения скорости седиментации крови соответствуют образцам либо сильно разбавленным (1:400), либо практически цельной крови (1:1). Минимум скорости СОЭ приходится на 30% разведение крови.

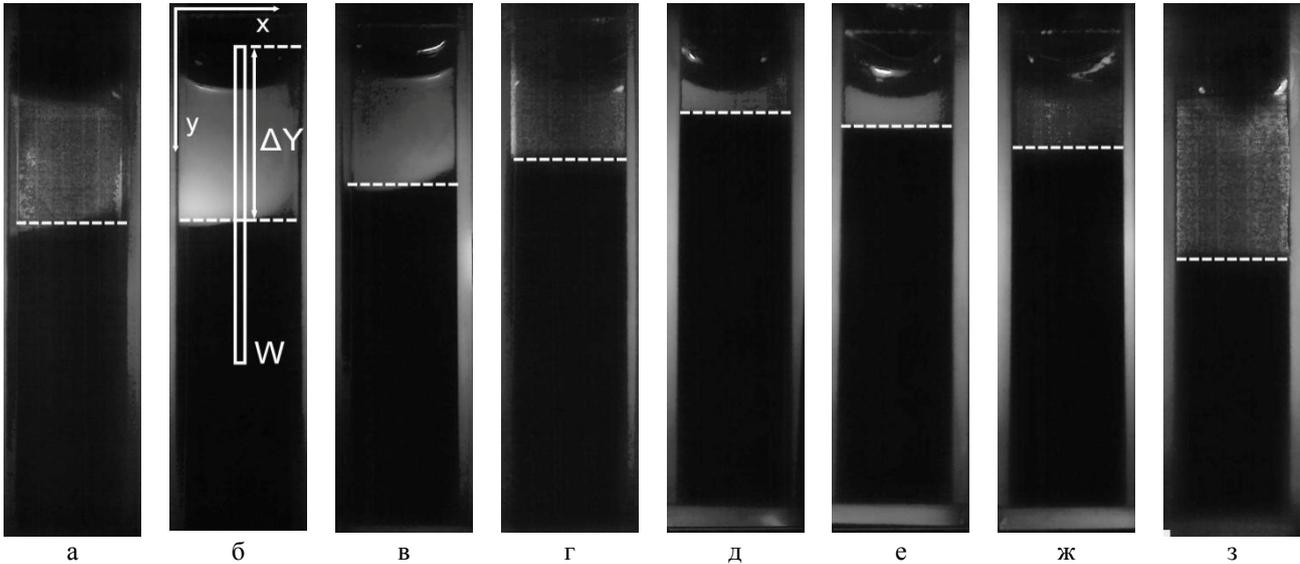


Рис.2. Фото кювет с образцами крови, разведенной физраствором в соотношении: а) 1:400; б) 1:200; в) 1:100; г) 1:10; д) 3:10; е) 3:5; ж) 4:5; з) 1:1. Фотоизображения соответствуют седиментации крови на 120-ой мин. На рис.2б показано: прямоугольная рамка  $W$  – область обработки фотоизображения для нахождения границы «раствор плазмы –эритроцитарная взвесь»; величина  $\Delta Y$  – смещение границы «раствор плазмы –эритроцитарная взвесь» к данному моменту времени.

Фотоизображения, подобные рис. 2, обрабатывались компьютерным образом: в рамках зоны  $W$  проводилось попиксельное (вдоль оси  $X$ ) усреднение величины яркости изображения  $B$  (brightness) для каждой строки с координатой вдоль оси  $Y$ . В результате определялась зависимость величины средней по строкам яркости  $B_{cp}$  засветки кюветы с раствором донорской крови от координаты  $Y$  (рис. 3) в различные моменты времени в процессе седиментации эритроцитов.

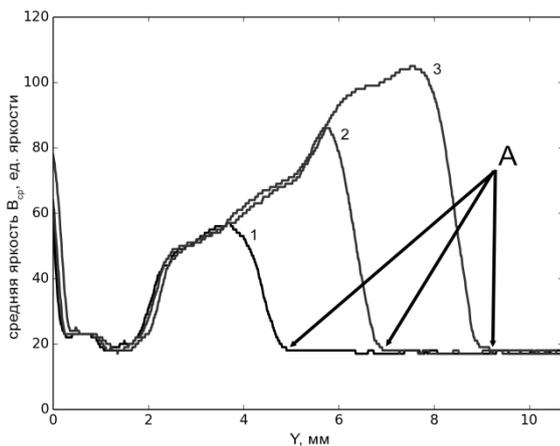


Рис.3. Зависимость средней яркости фотоизображения  $B_{cp}$  по пикселям строки вдоль оси  $X$  от координаты этой строки по оси  $Y$  (рис.2). Кривые 1,2 и 3 соответствуют моментам времени 47, 71 и 100 минут для образца с разведением крови 1:100. А – резкий спад средней яркости  $B_{cp}$ , соответствует границе «раствор плазмы – взвесь эритроцитов» для данного момента времени.

Положение резкого спада (знак А) величины средней яркости  $B_{cp}$  соответствует координате  $Y$  уровня границы «раствор плазмы – взвесь эритроцитов» в данный момент времени. Такой подход позволял довольно точно определять координату границы «раствор плазмы – эритроцитарная масса», а, следовательно, скорость RBC–седиментации.

Скорость оседания крови определялась на основе кинетических кривых (рис. 4). Заметим, что смещение  $\Delta Y$  отложено вниз по оси ординат, то есть в направлении седиментации крови. Для каждого момента времени скорость оседания эритроцитов определялась как  $\Delta Y/\Delta t$ . Заметим, что некоторая хаотичность в поведении кривых  $Y(t)$  на рис. 4а при малых временах наблюдения (20–30 мин) обусловлена турбулентностью движения эритроцитов как следствие перемешивания крови в физрастворе. Однако, в дальнейшем (при больших временах) зависимость  $Y(t)$  в широких пределах

носит практически линейный характер, следовательно, граница «раствор плазмы – взвесь эритроцитов» движется с постоянной скоростью. Исключение составляет случай цельной крови: при определенных смещениях  $\Delta Y$  граница «раствор плазмы – эритроцитарная масса» достигает таких глубин по оси  $Y$  (рис.2), где плотность взвеси крови и ее вязкость за счет высоких концентраций эритроцитов становятся значительными. Тогда зависимость скорости седиментации крови от времени претерпевает «насыщение» – кривая 8 рис. 4 (б).

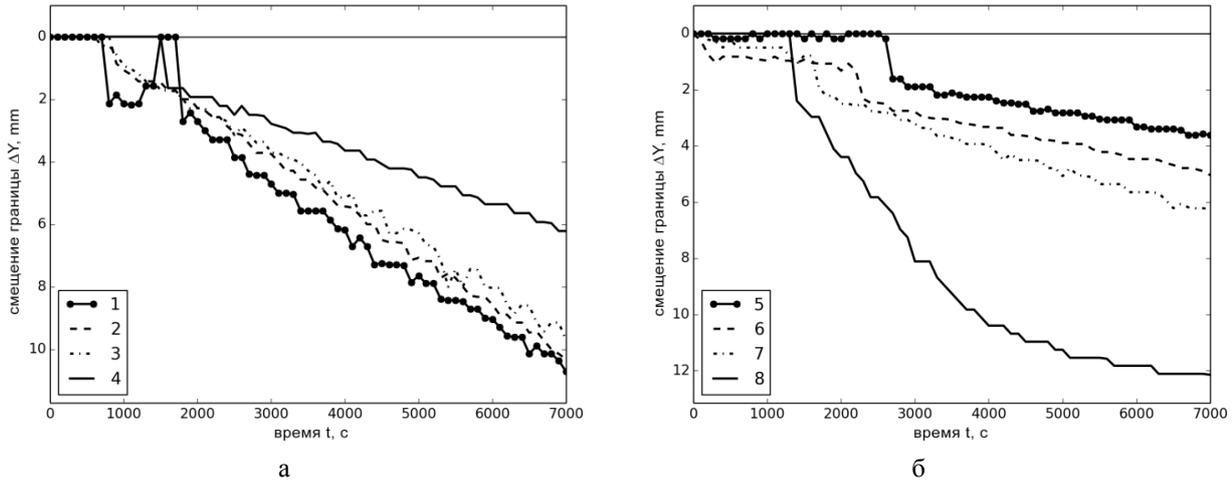


Рис. 4. Зависимость смещения (седиментации) уровня границы «раствор плазмы – взвесь эритроцитов»  $\Delta Y$  от времени наблюдения седиментации крови для различных ее концентраций во взвеси. Графики соответствуют степеням разведения крови в физрастворе: (а) 1 – 1:400, 2 – 1:200, 3 – 1:100, 4 – 1:10; (б) 5 – 30:100, 6 – 60:100, 7 – 80:100, 8 – 100:100.

Рис. 4 (б) показывает, что при больших концентрациях эритроцитов (слабое разведение крови) процесс седиментации стартует не с самого начала регистрации ( $t=0$ ), а с некоторым запаздыванием. Причем этот временной сдвиг тем меньше, чем больше концентрация эритроцитов в растворе крови. Это явление отмечалось в разделе 1 [4]. По-видимому, это явление обусловлено тем, что для формирования эритроцитарных агрегатов, стимулирующих седиментации крови, необходимо время. Представляется естественным – это время тем меньше, чем концентрация эритроцитов больше. Подобное отсутствует при сильных разведениях крови, так как вероятность образования эритроцитарных агрегатов чрезвычайно мала.

Обработка фотоизображений (рис. 2) и кинетических кривых (рис. 4) позволила определить зависимость скорости оседания крови от степени ее разведения (рис. 5).

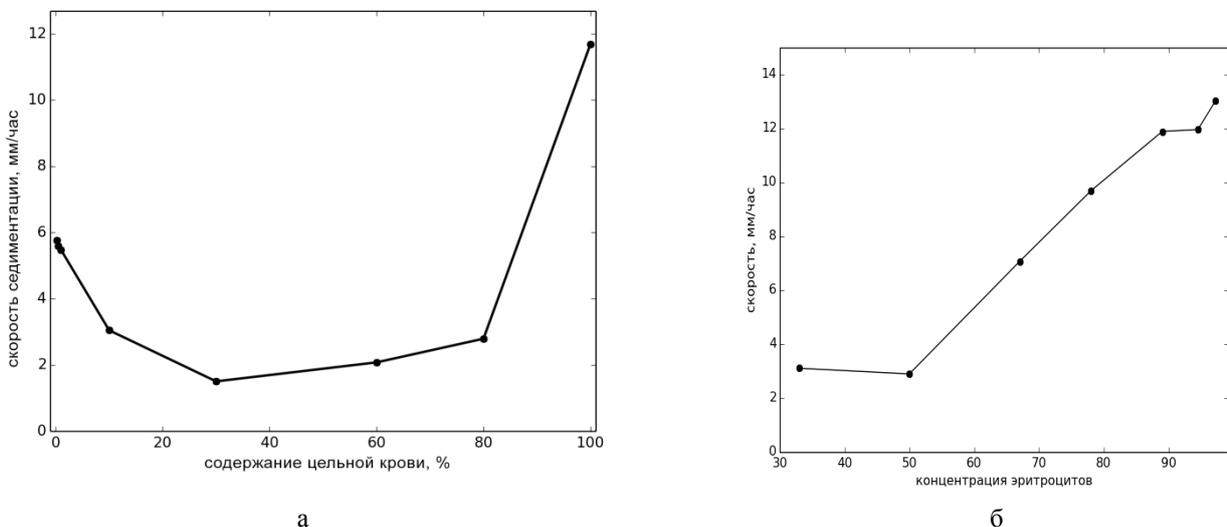


Рис.5. Зависимость скорости седиментации крови от степени ее разведения физраствором  $v(c)$ : а) оригинальные экспериментальные результаты; б) зависимость  $v(c)$  качественно построенная по результатам работы [15].

Из рис. 5 (а) видно, что для больших разведений крови ( $0 \leq c \leq 30\%$ ), в отличие от малых ( $30 \leq c \leq 100\%$ ), скорость седиментации крови возрастает с уменьшением концентрации эритроцитов, что соответствует рис. 4 и фото на рис. 2. При этом интересно отметить, что скорость седиментации эритроцитов стремится к значениям скорости седиментации одиночных эритроцитов.

С другой стороны, эксперименты показывают, что при больших концентрациях эритроцитов в растворе крови ( $30 \leq c \leq 100\%$ ) скорость оседания крови возрастает с увеличением ее концентрации  $c$  (рис. 5 (а)). Подобная зависимость на этом участке концентраций  $c$  была рассчитана на основе результатов работы [15] (рис. 5 (б)). Представляет интерес найденное в [15] увеличение скорости седиментации крови при переходе от концентрации эритроцитов 50% к концентрации 33% (этот эффект нашел свое отражение на рис. 5 (б)).

Заметим, что сопоставление результатов в диапазоне концентраций  $30 \leq c \leq 100\%$ , представленных на рис. 5 (а) и (б) не совсем корректно, хотя бы потому, что образцы крови были разными, техника экспериментов была различной и, главное – результаты настоящей работы были получены в прямоугольной кювете, а результаты [15] – в капилляре. В [14] отмечалось что «картина седиментации крови в узких капиллярах отличается от подобной в прямоугольной кювете». Однако, в целом вырисовывается общая закономерность – скорость оседания крови принимает минимальные значения в диапазоне концентраций эритроцитов во взвесах  $\sim 30 \div 50\%$  и повышается при больших разведениях крови или, наоборот, при приближении взвеси к состоянию цельной крови.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ СЕДИМЕНТАЦИИ КРОВИ ПРИ РАЗЛИЧНОЙ СТЕПЕНИ ЕЕ РАЗВЕДЕНИЯ ФИЗРАСТВОРОМ

### 3.1. Общие принципы построения модели

Из рис. 5 следует, что характер зависимости скорости седиментации эритроцитов в растворах крови принципиально отличен для слабых и сильных разведений. Видно, что минимум скорости оседания раствора крови приходится на концентрацию эритроцитов в области  $30 \div 50\%$  от цельной крови. Оценки показывают, что в этой области среднестатистическое межклеточное расстояние  $l$  оказывается соизмеримым с диаметром эритроцита  $d_{\text{эп}}$  ( $l \approx d_{\text{эп}}$ ). Действительно, при  $c_0 = 5 \cdot 10^6 \text{ мм}^{-3}$  ( $c_0$  – концентрация эритроцитов в цельной, не разбавленной крови) и концентрации 30 % величина  $l$  составляет  $4 \div 5$  мкм. Напомним, что модель эритроцита в форме шара имеет диаметр порядка  $\approx 5.5$  мкм. Естественно, при больших разведениях крови эритроцитарную взвесь можно рассматривать практически как совокупность индивидуальных, свободных эритроцитов, где вероятность их агрегации весьма мала. Так при разведении крови 1:400 (рис. 5)  $l$  составляет около 40 мкм, то есть  $l > d_{\text{эп}}$ .

С другой стороны, при малых разведениях крови расстояние между «эритроцитами – шарами» оказывается меньше его диаметра ( $l < d_{\text{эп}}$ ): для цельной, не разбавленной крови ( $c_0$ ) расстояние  $l$  составляет лишь  $\sim 0.4$  мкм. В этом случае вероятность агрегации эритроцитов весьма велика. Вот почему при моделировании седиментации крови при разных степенях ее разведения крови целесообразно построить два варианта модели – для сильно разбавленных образцов крови (без учета процесса агрегации эритроцитов – раздел 3.2) и слабо разбавленных образцов, где эффект агрегации значителен – раздел 3.3.

В основу модели положим принцип коллективной седиментации эритроцитов и/или агрегатов. Выделим на поверхности цилиндрического столба жидкости некоторый узкий диск высотой  $h$ , радиусом  $R$  и площадью его поверхности  $S = \pi R^2$ , содержащий множество эритроцитов/агрегатов.

Радиус диска принимает максимальное значение, если  $R = R_0$ , где  $R_0$  – радиус цилиндрического сосуда;  $h \ll R \approx R_0$ . В отличие от традиционного «микроскопического подхода», когда анализируют седиментацию одиночных, индивидуальных эритроцитов, будем рассматривать оседание эритроцитов в виде седиментации «эритроцитарного диска» (макроскопический подход). Такой диск назовем эквивалентным. Авторы осознают некоторую некорректность: кювета в эксперименте была прямоугольной (раздел 2.1), а в модели процесса седиментации эритроцитов принимается цилиндрическая кювета. Это обусловлено тем, что экспериментальное исследование седиментации крови в цилиндрическом сосуде фотометрическим методом затруднительно – цилиндр будет представлять собою линзу, что приведет к искажению цифровых фотоизображений.

Полагаем, что для данной концентрации эритроцитов/агрегатов все эритроциты слоя  $h$  движутся вдоль оси  $Y$  (рис. 2) с одной скоростью, равной скорости движения диска  $v$  (рис. 4). Отметим, что диск не является сплошным, имеются отверстия диаметром  $d_{отв}$  (радиусом  $r_{отв}=d_{отв}/2$ ), символизирующие среднее межклеточное расстояние  $l$ . Важно заметить, что сквозь отверстия (поры) в диске встречно проходит некоторое количество жидкости – раствор плазмы в случае отсутствия агрегатов (раздел 3.2). Если же эквивалентный диск содержит множество эритроцитарных агрегатов, то сквозь отверстия между ними встречно движется тот же раствор, но с небольшим количеством эритроцитов, не вошедших в состав эритроцитарных агрегатов (раздел 3.3). При таком подходе задача описания седиментации частиц (эритроцитов/агрегатов) во взвеси крови сводится к нахождению параметров эквивалентного пористого диска, который оседал бы с той же скоростью  $v$ . Среди этих параметров – величины  $h$ ,  $d_{отв}$ ,  $N_{отв}$  – количество отверстий в диске, плотность диска –  $\rho_d$ , скорость седиментации диска (эритроцитов/агрегатов)  $v$  и, главное, связь этих параметров с исходной концентрацией эритроцитов во взвеси крови  $c$ .

### 3.2. Моделирование седиментации эритроцитов в сильно разбавленной крови – модель коллективного движения клеток

Рассмотрим оседание эритроцитов (сильно разбавленная кровь). При оценке плотности такого диска  $\rho_d$  следует учитывать не только плотность эритроцитов  $\rho_{эр}$  и их количество в диске  $N$ , но и плотность  $\rho_ж$  и количество жидкости (раствор плазмы), находящейся в отверстиях (порах) диска с общим его объемом  $V_d=\pi R^2 h$ . Таким образом, нами рассматривается некий квазисплошной эквивалентный диск, плотность которого  $\rho_d$  имеет «промежуточное» значение между плотностью жидкости  $\rho_ж$  и плотностью эритроцита  $\rho_{эр}$ :

$$\rho_d = \rho_ж + 4Nr_{эр}^3(\rho_{эр} - \rho_ж) / 3hR^2, \quad (3)$$

где  $r_{эр}$  – радиус эквивалентного «сферического» эритроцита ( $r_{эр} \approx 2.75$  мкм).

На эквивалентный диск, движущийся вдоль оси  $Y$ , действуют силы: вес диска  $Mg$ , сила Архимеда  $F_{Арх}$  и силы трения  $F'_{тр}$  и  $F''_{тр}$ , так что

$$M_d a = Mg - F_{Арх} - F'_{тр,эр} - F''_{тр,эр} \quad (4)$$

где  $M_d$  – масса эквивалентного диска,  $a$ ,  $g$  – ускорение движения диска и свободного падения тела соответственно. Здесь  $F'_{тр,эр}$  – сила трения для эффективного диска, омываемого жидкостью [26], но без учета той части встречного потока, которая проходит сквозь отверстия в диске («трубки тока»):

$$F'_{тр,эр} = 16\eta_ж v R, \quad (5)$$

Сила  $F''_{тр,эр}$  – сила трения жидкости о боковые стенки «трубок тока» (поры):

$$F''_{тр,эр} = k_1 N_{отв} \eta_ж S_{отв,бок} (dv/dr_{отв}) = k_1 N_{отв} \eta_ж 2\pi r_{отв} h (dv/dr_{отв}), \quad (6)$$

где  $F''_{тр,эр}$  – сила трения, действующая на боковые внутренние поверхности трубок тока (следовательно, на седиментирующий диск в целом) со стороны пристеночных слоев жидкости движущихся против направления седиментации крови. Параметр  $\eta_ж$  – коэффициент вязкости жидкости, протекающей сквозь поры в диске (раствор плазмы крови);  $S_{отв,бок} = 2\pi r_{отв} h$  – площадь боковой поверхности трубки тока;  $dv/dr_{отв}$  – градиент скорости потока жидкости вблизи стенки трубки тока (канал поры);  $k_1$  – поправочный коэффициент, учитывающий отличие отверстий (пор) в диске от цилиндра (величина  $k_1$  определяется из эксперимента). Известно, что распределение скорости течения слоев жидкости в поперечном сечении трубки тока носит квадратичный характер с максимумом скорости на оси цилиндрической трубки и практически нулевой скоростью вблизи ее стенки. Однако, для простоты оценок полагаем, что распределение скорости в сечении трубки тока является линейным, симметричным относительно оси трубки с максимумом скорости в ее центре  $v_{max}$ . Тогда:

$$dv/dr_{\text{отв}}=v_{\text{max}}/r_{\text{отв}}=2v/r_{\text{отв}}, \quad (7)$$

где  $v$  – средняя скорость течения жидкости в трубке тока ( $v = v_{\text{max}}/2$ ), для простоты полагаем ее равной скорости седиментации диска.

Подставляя (5), (6), (7), а также силу Архимеда  $F_{\text{Арх}}$  в (4) получаем:

$$M_d a = gV_d(\rho_d - \rho_j) - 16\eta_j R v - k_I N_{\text{отв}} \eta_j 4\pi h v \quad (8)$$

Силы сопротивления ( $F'_{\text{тр.эр}}$  и  $F''_{\text{тр.эр}}$ ) в (8) зависят от скорости  $v$ . Поэтому, по мере возрастания скорости движения эквивалентного диска, силы сопротивления нарастают, наступает момент баланса сил в (8), тогда ускорение  $a$  обращается в нуль ( $a=0$ ), а скорость седиментации диска определяется как:

$$v = \pi g R^2 h (\rho_d - \rho_j) / [4\eta_j (4R + k_I \pi N_{\text{отв}} h)] \quad (9)$$

Движение эквивалентного диска становится равномерным, о чем также свидетельствует экспериментальные графики на рис. 4. Подставляя (3) в (9) и используя  $h = 2r_{\text{эр}}$ , а также связь числа эритроцитов в диске  $N$  с их концентрацией  $c = N/V_d$ , получаем:

$$v = \pi^2 g R r_{\text{эр}}^4 c (\rho_{\text{эр}} - \rho_j) / [6\eta_j (1 + k_I \pi r_{\text{эр}} N_{\text{отв}} / 2R)] \quad (10)$$

Выше отмечалось, что количество отверстий в дисковой модели монослоя крови  $N_{\text{отв}}$  зависит от концентрации эритроцитов  $c$ . Эта зависимость  $N_{\text{отв}}(c)$ , а также коэффициент  $k_I$  подбирались эмпирически: для каждого значения концентрации  $c$  из эксперимента находилась соответствующее значение скорости  $v$ . Подстановка  $v$  в (10) позволяла получить зависимость  $N_{\text{отв}}(c)$ , а  $k_I$  подбиралась из соображений наилучшего совпадения рассматриваемой модели седиментации крови с экспериментом. Оценки показывают, что:

$$N_{\text{отв}}(c) = f(c) = a \cdot c^b \quad (a = 0.0325, b = 1.23) \quad (11)$$

С учетом (11) перепишем (10) в виде:

$$v = \pi^2 g R r_{\text{эр}}^4 c (\rho_{\text{эр}} - \rho_j) / [6\eta_j (1 + 9 \cdot 10^{-5} \cdot c^{1.2})]. \quad (12)$$

Расчеты по формуле (12) демонстрируют (рис. 6) удовлетворительное согласие модели с экспериментальными результатами в пределах концентраций  $\sim 0 \div 1.5 \cdot 10^6 \text{ мм}^{-3}$  (степень разведения крови до  $30 \div 40\%$ ).

Интересно отметить, что, при уменьшении концентрации эритроцитов во взвеси, скорость седиментации крови возрастая, устремляется к значениям скоростей оседания одиночных эритроцитов соответствующих размеров (рис. 6) как в эксперименте, так и при моделировании седиментации раствора крови.

При больших концентрациях эритроцитов ( $c > 1.5 \cdot 10^6 \text{ мм}^{-3}$ ) расхождение модели (пунктирная линия) с экспериментом обусловлено процессом агрегации эритроцитов, которая в данной версии модели не учитывалась (будет рассмотрена в разделе 3.3). Для нахождения зависимости скорости седиментации крови от концентрации эритроцитов (рис. 6) по формуле (12) использовались либо известные данные, либо некоторые параметры, заимствованные из эксперимента:  $\rho_{\text{эр}} \approx 1,092 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$  [19];  $\rho_j \approx 10^3 \text{ кг/м}^3$ ;  $R \approx R_0 \approx 5 \text{ мм}$ ; степень разведения цельной крови 1:400, 1:200, 1:100, 1:10; 30:100, 60:100, 80:100, 100:100; вязкость раствора плазмы практически равна вязкости «растворителя» (физраствор)  $\eta_j = \eta_0 = 1.01 \cdot 10^{-3} \text{ Пас}$  (вода при  $20^\circ\text{C}$ ).

Формула (11) позволяет оценить количество отверстий в диске и его зависимость от концентрации  $N_{\text{отв}}(c)$  (рис. 7 (а))

$$N_{\text{отв}}(c) = [1.8 \cdot 10^{-4} R / (k_I \pi r_{\text{эр}})] \cdot c^{1.2} \quad (13)$$

Оценим радиус отверстия  $r_{отв}$ , его зависимость от концентрации  $c$ . Для рассматриваемого монослоя (диска) площадь, занимаемая жидкостью, составляет:

$$S_{жидк} = S_{диск} - S_{эрит} = \pi(R^2 - Nr_{эр}^2), \quad (13a)$$

где  $S_{эрит}$  – сумма максимальных площадей поперечных сечений «эритроцитов–сфер». Поделим найденную площадь монослоя  $S_{жидк}$  на число отверстий модели  $N_{отв}$ , результат будет означать максимальную площадь, приходящуюся на одно отверстие (пору) в монослое модели.

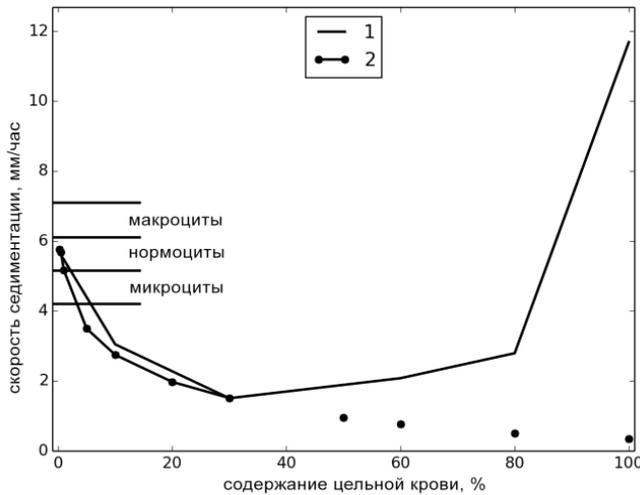


Рис.6. Зависимость скорости оседания крови от ее концентрации в растворе: 1– результаты экспериментов; 2 – моделирование для сильно (сплошная кривая – в пренебрежении процессом агрегации эритроцитов) и слабо (точки – без учета агрегации эритроцитов) разбавленных взвесей крови.

Тогда можно записать:

$$\pi(R^2 - Nr_{эр}^2)/N_{отв} = k_2\pi r_{отв}^2, \quad (14)$$

где  $k_2$  – коэффициент пропорциональности. Откуда радиус отверстия  $r_{отв}$  равен:

$$r_{отв} = R[(1 - 2\pi cr_{эр}^3)/k_2 N_{отв}]^{1/2}. \quad (15)$$

Подставим (13) в (15):

$$r_{отв} = R[(1 - 2\pi cr_{эр}^3)/(1.8 \cdot 10^{-4} R/(k_1 \pi r_{эр})) c^{1.2}]^{1/2}. \quad (16)$$

Результаты расчета  $r_{отв}$  по формуле (16) приведены на рис. 7 (б).

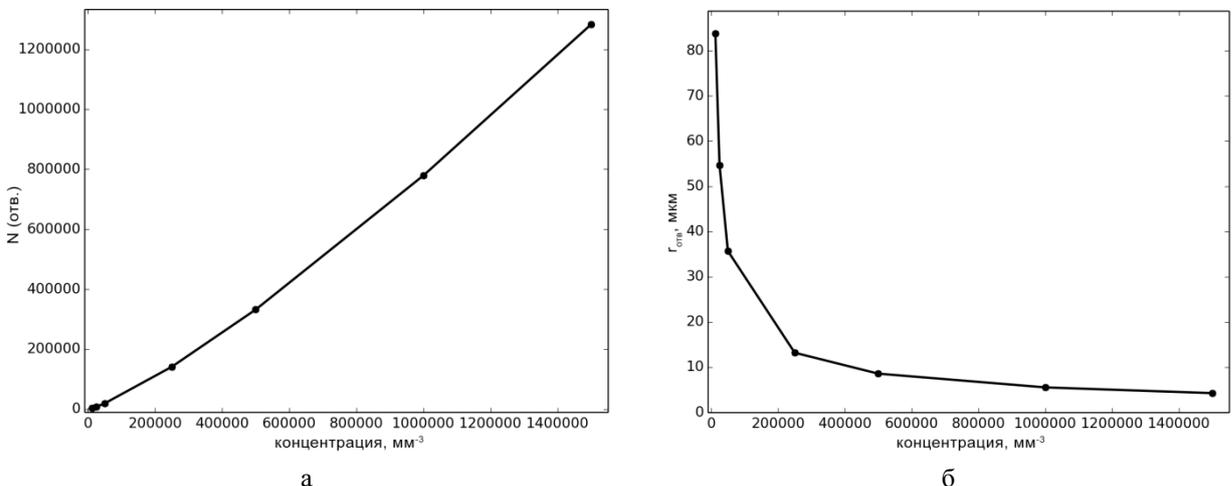


Рис.7. Количество отверстий  $N_{отв}$  (а) и величины их радиусов  $r_{отв}$  (б) в зависимости от концентрации эритроцитов  $c$ .

По сравнению с рис. 6, данный рис. 7 построен в пределах концентраций эритроцитов ( $0 < c < 1500000 \text{ мм}^{-3}$ ), для которых рассматриваемая версия дисковой модели седиментации крови приемлема. Из рис. 7 следует довольно прозрачный вывод – увеличение концентрации эритроцитов  $c$  приводит к росту числа отверстий в эквивалентном диске  $N_{\text{отв}}$  и одновременному снижению величины их радиуса  $r_{\text{отв}}$ .

### 3.3. Моделирование седиментации эритроцитарных агрегатов – модель их коллективного движения

Основное отличие рассматриваемой здесь задачи от задачи раздела 3.2 заключается в том, что в данном случае анализируемый слой взвеси толщиной  $h$  заполнен как эритроцитами, так и их агрегатами. Действительно, как указано в разделе 3.2, при разведениях крови физиологическим раствором в соотношениях 1:100 и более межклеточное расстояние  $l$  значительно превышает эффективный размер (диаметр  $d_{\text{эп}} = 2r_{\text{эп}}$ ) «сферического» эритроцита ( $l > d_{\text{эп}}$ ). Поэтому можно полагать, что вероятность образования эритроцитарных агрегатов мала, а среда может рассматриваться как взвесь свободных эритроцитов, что и реализовано в разделе 3.2.

Однако, при концентрациях эритроцитов близких к концентрациям RBC–клеток в цельной крови ситуация меняется на обратную ( $l < d_{\text{эп}}$ ), здесь вероятность агрегации эритроцитов весьма значительна. В этом случае слой  $h$  заполнен не только эритроцитами, но и их агрегатами разных форм и размеров. Моделирование седиментации такого полидисперсного слоя весьма затруднительно. Поэтому для простоты будем рассматривать слой крови, содержащий монодисперсную взвесь агрегатов, причем их размеры зависят от индивидуальных свойств образцов крови, концентрации эритроцитов в пробе  $c$ , а также количества эритроцитов  $q$ , входящих в агрегат (при нормальной СОЭ  $q \approx 12$ ). Последнее следует из [39]: из «высокомолекулярных белков или высокомолекулярных веществ другой природы (декстрины) образуются межэритроцитарные "мостики", которые как бы складывают эритроциты и <...> ведут к образованию агрегатов, включающих в себя от 8 до 15 клеток, если СОЭ в пределах нормальных величин, и до десятков, сотен тысяч клеток, если СОЭ сильно увеличена». Связь размеров эритроцитарных агрегатов и других параметров крови с величиной СОЭ также рассматривается в [40–42].

Будем полагать, что в процессе седиментации слоя свободные, не вошедшие в состав агрегатов эритроциты способны двигаться в противоположном направлении сквозь трубки тока, увлекаемые встречным по отношению к направлению седиментации потоком.

Если в разделе 3.2 рассматривались эквивалентные «сферические» эритроциты, то и здесь полагаем, что эритроцитарные агрегаты имеют форму сферы соответствующего размера (диаметр  $D_{\text{ар}}=2r_{\text{ар}}$ ). Здесь практически все параметры имеют индексы «ар», что указывает на рассмотрение седиментации крови с учетом явления агрегации эритроцитов. Некоторое представление о количестве эритроцитов в агрегате и его форме дает рис. 8.

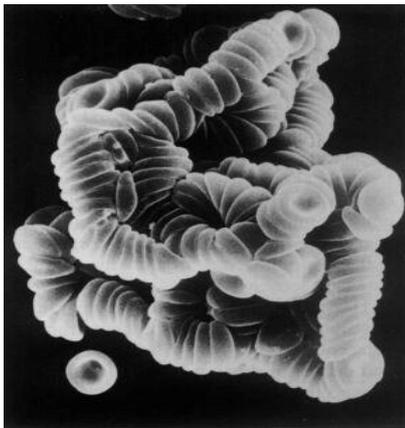


Рис. 8. Эритроцитарный агрегат, наблюдаемый с помощью сканирующего электронного микроскопа [43].

Как и в разделе 3.2 в основу модели положим принцип коллективной седиментации, но не эритроцитов, а их агрегатов с размерами:

$$D_{\text{ар}}=d_{\text{эп}} (q)^{1/3}. \quad (17)$$

По аналогии с разделом 3.2 плотность диска содержащего в основном эритроцитарные агрегаты по–прежнему может быть определена по формуле (3). Однако заметим, что теперь при расчете плотности диска  $\rho_d$  в (3) учитывается общее количество эритроцитов  $N$ , а не только «агрегированных» эритроцитов. Это обусловлено тем, что масса диска (его вес) определяется общим числом эритроцитов, без учета места положения эритроцитов: являются ли они свободными или связанными в агрегате. В то же время следует заметить, что в процессе седиментации диска, содержащего агрегаты, свободные эритроциты увлекаются встречным потоком жидкости вверх сквозь поры диска. При этом будем полагать, что потери числа свободных эритроцитов диска компенсируются вновь поступившими в диск из нижележащих слоев подобных дисков. В то же время, движение свободных эритроцитов сквозь поры диска влияет на величину коэффициента вязкости жидкости, что будет учтено в расчетах.

Как и в разделе 3.2 на эквивалентный диск, движущийся вдоль оси  $Y$  (рис. 2), действуют силы: вес диска  $M_d g$ , сила Архимеда  $F_{Арх}$  и силы трения  $F'_{тр.аг}$  и  $F''_{тр.аг}$ , так что:

$$M_d a = M_d g - F_{Арх} - F'_{тр.аг} - F''_{тр.аг}, \quad (18)$$

где  $F'_{тр.аг}$  – сила трения для эффективного диска, содержащего свободные эритроциты и RBC–агрегаты, омываемого жидкостью [26], но без учета той части потока, которая проходит сквозь отверстия в диске («трубки тока»):

$$F'_{тр.аг} = 16\eta'_{ж} \nu R. \quad (19)$$

Отличие  $\eta'_{ж}$  от  $\eta_{ж}$  (раздел 3.2) заключается в том, что здесь  $\eta'_{ж}$  соответствует раствору плазмы крови, содержащему некоторое количество свободных эритроцитов, не вошедших в состав агрегатов. Сила  $F''_{тр.аг}$  – сила трения жидкости о стенки «трубок тока» (поры) в эффективном диске с эритроцитарными агрегатами:

$$F''_{тр.аг} = N_{отв} \eta'_{ж} S_{отв.бок} (dv/dr_{отв.аг}) = N_{отв} \eta'_{ж} 2\pi r_{отв.аг} h (dv/dr_{отв.аг}), \quad (20)$$

где  $N_{отв}$  – количество отверстий (пор, трубок тока) в модели слоя крови,  $r_{отв.аг}$  – радиус отверстия в диске,  $S_{отв.бок} = 2\pi r_{отв.аг} h$  – площадь боковой поверхности трубки тока, а  $dv/dr_{отв.аг}$  – градиент скорости потока жидкости вблизи стенки трубки тока (канал поры) для слоя, содержащего в том числе агрегаты. Для этого слоя в (7) следует ввести переобозначения:

$$dv/dr_{отв.аг} = 2\nu/r_{отв.аг} \quad (21)$$

С учетом (19), (20), (21) по аналогии с (8) получим:

$$M_d a = g V_d (\rho_d - \rho_{ж}) - 16\eta'_{ж} R \nu - N_{отв} \eta'_{ж} 4\pi h \nu. \quad (22)$$

Фото, демонстрирующие седиментацию крови при слабых ее разведениях физраствором, представлены на рис. 2 (д– з). На рис. 2 (д– з) и рис. 4 (б) видно, что с увеличением концентрации эритроцитов (вплоть до концентрации, характерной для цельной крови) возрастает скорость оседания крови. Из рис. 4 (б) также видно, что слои взвеси крови с исходными концентрациями эритроцитов от 30% до 100% седиментируют практически равномерно. Тогда ускорение  $a$  в (22) можно положить равным нулю ( $a=0$ ), а скорость седиментации диска определится как:

$$\nu = \pi g R^2 h (\rho_d - \rho_{ж}) / 4\eta'_{ж} (4R + \pi N_{отв} h). \quad (23)$$

Для монослоя толщиной, равной диаметру агрегата  $h = 2r_{аг}$ , формулу (23) можно переписать:

$$\nu = \pi g R^2 r_{аг} (\rho_d - \rho_{ж}) / 4\eta'_{ж} (4R + \pi N_{отв} r_{аг}). \quad (24)$$

Воспользуемся (3), тогда с учетом соотношения  $r_{аг} = (q)^{1/3} r_{эп}$  формула (24) преобразуется к виду:

$$v = \pi g r_{\text{эр}}^3 N (\rho_{\text{эр}} - \rho_{\text{ж}}) / 12 \eta'_{\text{ж}} (R + \pi N_{\text{отв}}(q))^{1/3} r_{\text{эр}}. \quad (25)$$

Выше отмечалось, что не все эритроциты монослоя входят в состав агрегатов, часть их движется сквозь поры слоев (трубки тока) в противоположном направлении относительно направления седиментации крови. Количество таких свободных эритроцитов  $c'$  зависит от их исходной концентрации  $c$ , а также от числа эритроцитов связанных в агрегатах, так что  $c' = c - qc_{\text{аг}}$ . Здесь  $qc_{\text{аг}}$  – общее количество эритроцитов, вошедших в общее число агрегатов в объеме диска.

Напомним, что в случае сильного разведения крови (раздел 3.2) полагалось, что свободные эритроциты в монослое пространственно фиксированы – они отсутствуют во встречном потоке жидкости сквозь «трубки тока» (поры, отверстия в диске). Тогда  $\eta_{\text{ж}}$  – вязкость раствора плазмы. В данном случае, при больших исходных концентрациях эритроцитов сквозь отверстия в диске вместе с раствором плазмы движутся те эритроциты, которые не вошли в состав агрегатов. Тогда вязкость порции раствора крови, проходящей сквозь поры монослоя, будет зависеть от концентрации свободных эритроцитов и будет равна  $\eta'_{\text{ж}} = \eta_{\text{ж}} \exp(k_0 c') = \eta_{\text{ж}} \exp(k_0 (c - qc_{\text{аг}}))$  [33,37,38], где  $k_0$  – коэффициент, подбираемый для наилучшего согласования экспоненциальной зависимости коэффициента вязкости крови от ее RBC-концентрации. В этой зависимости  $\eta_0$  – вязкость крови при  $c = 0$ , то есть здесь  $\eta_0 = \eta_{\text{ж}}$ . В [33,37,38] коэффициент  $k_0$  оказался равным  $k_0 \approx 3,4805 \cdot 10^{-7} \text{ мм}^3$ . С учетом изложенного перепишем (25):

$$v = \pi g N r_{\text{эр}}^3 (\rho_{\text{эр}} - \rho_{\text{ж}}) / [12 \eta_{\text{ж}} \cdot \exp(k_0 (c - qc_{\text{аг}})) \cdot (R + \pi N_{\text{отв}}(q))^{1/3} r_{\text{эр}}] \quad (26)$$

или

$$v = \pi^2 g r_{\text{эр}}^4 R(q)^{1/3} c (\rho_{\text{эр}} - \rho_{\text{ж}}) / [12 \eta_{\text{ж}} \exp(k_0 (c - qc_{\text{аг}})) \cdot (1 + \pi N_{\text{отв}}(q))^{1/3} r_{\text{эр}} / R]. \quad (27)$$

Для проведения расчетов скорости седиментации крови при малых степенях ее разведения  $v$  (27) найдем количество отверстий (пор) в модели  $N_{\text{отв}}$ , а также их средний радиус  $r_{\text{отв}}$ .

$$S_{\text{жидк}} = S_{\text{диск}} - S_{\text{аг}} = \pi (R^2 - N_{\text{аг}} r_{\text{аг}}^2), \quad (28)$$

где  $N_{\text{аг}}$  – количество агрегатов в монослое крови. Откуда количество отверстий в дисковой модели:

$$N_{\text{отв}} = (R^2 - N_{\text{аг}} r_{\text{аг}}^2) / r_{\text{отв}}^2, \quad (29)$$

Из (29) с учетом  $r_{\text{аг}} = (q)^{1/3} r_{\text{эр}}$  следует:

$$r_{\text{отв}} = ((R^2 - N_{\text{аг}}(q)^{2/3} r_{\text{эр}}^2) / (N_{\text{отв}}))^{1/2}. \quad (30)$$

Из (29) и (30) можно определить  $N_{\text{отв}}$  и  $r_{\text{отв}}$ , если найдем  $N_{\text{аг}}$ . С этой целью разумно полагать, что:

- 1) количество моодисперсных агрегатов (концентрация  $c_{\text{аг}}$ ) в рассматриваемом монослое возрастает с увеличением концентрации эритроцитов  $c$ ;
- 2) концентрация агрегатов  $c_{\text{аг}}$  максимальна при стремлении концентрации эритроцитов  $c$  к их концентрации  $c_0$  для цельной крови ( $c < c_0$  и  $c \rightarrow c_0$ );
- 3) концентрация агрегатов  $c_{\text{аг}}$  стремится к нулю при стремлении концентрации эритроцитов  $c$  к нулю ( $c < c_0$  и  $c \rightarrow 0$ ).

Одним из возможных вариантов функции, удовлетворяющим таким условиям, является сигмоида вида:

$$\sigma(c) = 1 / [1 + \exp(-(c - c_0) / c)]. \quad (31)$$

Тогда концентрация агрегатов  $c_{\text{аг}}$  может быть определена как

$$c_{\text{аг}} = 2c \cdot \sigma(c)/q, \quad (32)$$

объединяя (31) и (32), получим:

$$c_{\text{аг}} = [2c/q] / [1 + \exp(-(c-c_0)/c)]. \quad (33)$$

Функция (33) удовлетворяет вышеприведенным требованиям:

- если  $c \rightarrow 0$ , то концентрация агрегатов  $c_{\text{аг}} \rightarrow 0$ ;
- если  $c \rightarrow c_0$ , то  $c_{\text{аг}} \rightarrow (c/q) = \text{max}$ .

С помощью (33) можно найти  $N_{\text{отв}}$ :

$$N_{\text{отв}} = 2\pi R^2 r_{\text{аг}} c_{\text{аг}} = 2\pi R^2 q^{1/3} r_{\text{эп}} \cdot [2c/q] / [1 + \exp(-(c-c_0)/c)]. \quad (34)$$

Подставляя формулы (33) и (34) в (27), можно определить зависимость скорости оседания слоя крови, содержащего агрегаты и свободные эритроциты  $v(c)$ , от концентрации эритроцитов в пробе (рис. 8).

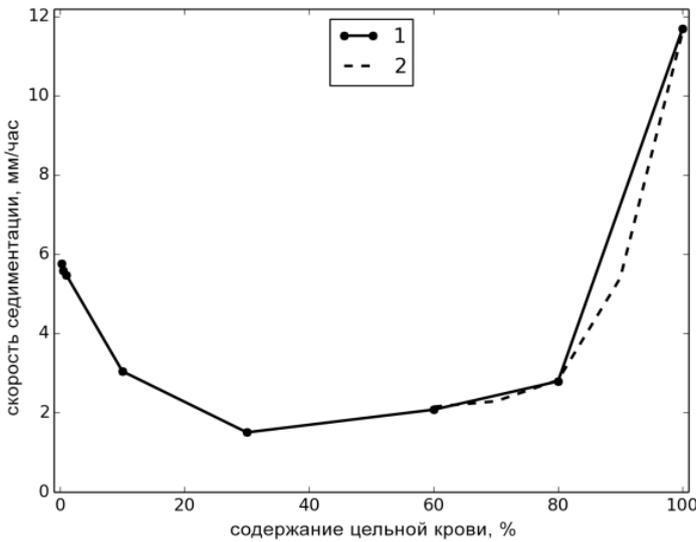


Рис.9. 1 – результаты эксперимента, 2 – моделирование с учетом агрегации при слабом разведении образцов крови. Для цельной крови полагалось, что концентрация эритроцитов  $c_0 = 5 \cdot 10^6 \text{ мм}^{-3}$ .

Радиус отверстий  $r_{\text{отв}}$  можно рассчитать по формуле (30) с учетом (33) и (34), а также соотношения  $N_{\text{аг}} = 2\pi R^2 (q)^{1/3} r_{\text{эп}} c_{\text{аг}}$ . Зависимости  $N_{\text{отв}}$  и  $r_{\text{отв}}$  от концентрации  $c$  приведены на рис. 10.

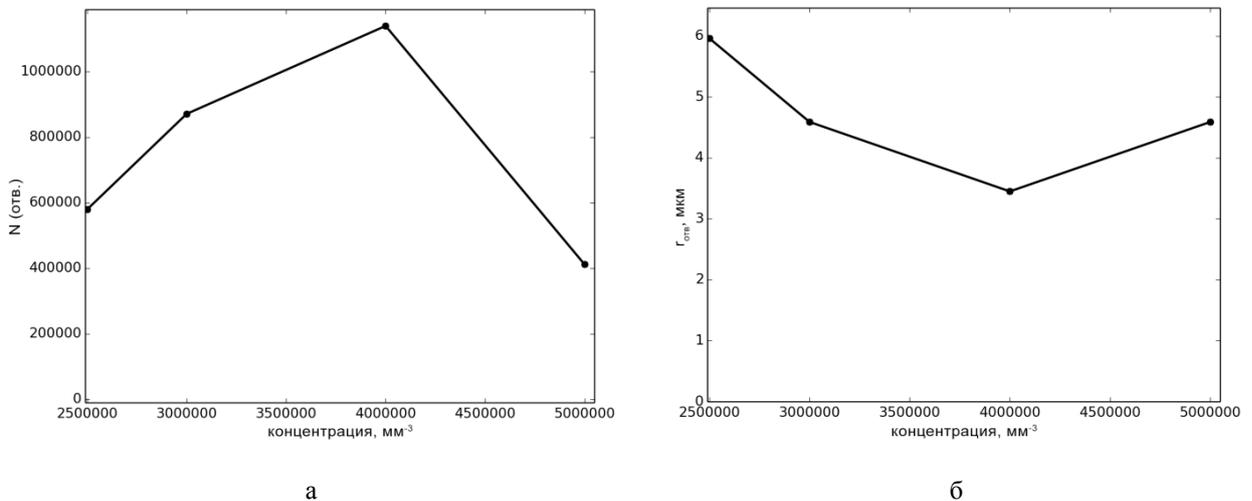


Рис. 10. Зависимость количества отверстий в дисковой модели  $N_{\text{отв}}$  (а) и их радиус  $r_{\text{отв}}$  (б) от концентрации эритроцитов  $c$ .

Из рис. 10 видно, что с ростом концентрации эритроцитов, вплоть до  $4 \cdot 10^6 \text{ мм}^{-3}$ , количество отверстий  $N_{\text{отв}}$  в дисковой модели эритроцитарного монослоя возрастает (рис. 4 (а)), а их радиус  $r_{\text{отв}}$ , естественно, падает (рис. 4 (б)). Однако, в диапазоне концентраций  $4 \cdot 10^6 \leq c \leq 5 \cdot 10^6$  зависимость этих параметров обратная, что обусловлено интенсивным процессом агрегации эритроцитов.

Результаты экспериментов и моделирования седиментации крови в обобщенном виде (рис. 6 и 9) представлены на рис. 11. Здесь же для сравнения приведены данные качественно полученные по экспериментальным результатам работы [15].

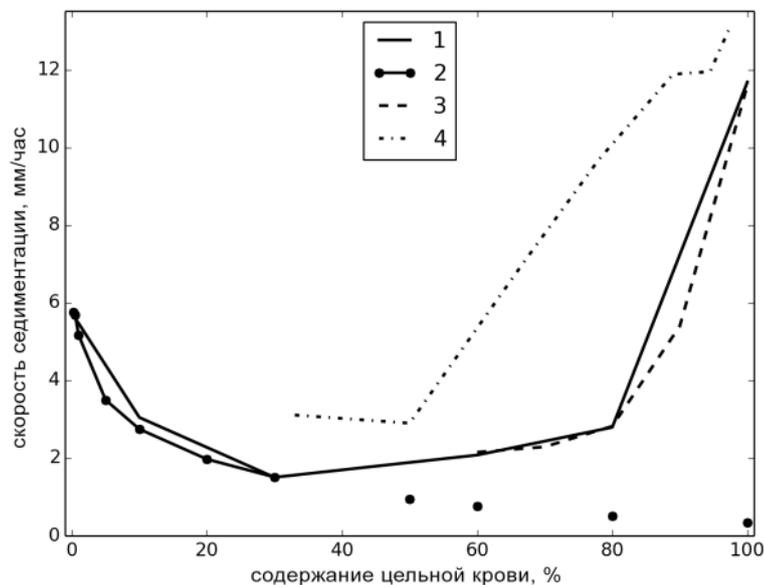


Рис. 11. Зависимость скорости оседания крови от концентрации эритроцитов: 1 – оригинальные экспериментальные результаты; 2 – моделирование без учета агрегации при сильном разведении образцов крови; 3 – моделирование с учетом агрегации при слабом разведении образцов крови; 4 – зависимость  $v(c)$  качественно рассчитанная по экспериментальным результатам работы [15].

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Экспериментально определена зависимость скорости седиментации раствора крови от концентрации эритроцитов. Показано, что скорость седиментации существенно, в несколько раз возрастает при сильном или, наоборот, при слабом разведении цельной крови. При этом минимум скорости оседания крови лежит в диапазоне концентраций  $30 \div 50$  % от цельной. Предложено объяснение экспериментально выявленной закономерности – повышение скорости седиментации крови в вышеупомянутых случаях связано с увеличением межклеточного расстояния и, следовательно, с уменьшением силы трения, оказываемой встречным потоком раствора плазмы на движение эритроцитов и/или их агрегатов. Заметим, что увеличение межклеточного расстояния в случае сильно разбавленной крови или почти цельной происходит по-разному: в первом случае имеет место автоматическое снижение концентрации эритроцитов, а во втором – за счет эффекта агрегации.

Цифровая фоторегистрация кинетики седиментации крови для разных уровней ее разведения физраствором позволила обнаружить ранее отмеченную особенность [4] (раздел 1) – процесс седиментации крови стартует не сразу, а после некоторого интервала времени – в нашем случае вплоть до  $\sim 30$  мин. Причем увеличение концентрации эритроцитов сокращает время запаздывания седиментации. Возможное объяснение эффекта – формирование агрегатов требует время: чем больше концентрация эритроцитов, тем выше вероятность образования агрегатов, а время их формирования уменьшается.

Предложенная математическая модель седиментации крови в виде оседания эквивалентного эритроцитарного диска в определенной степени подобна отмеченной в разделе 1 «сетевой» модели строения образцов крови – модели Балаховского С.Д.. Как и в модели Балаховского С.Д. встречный поток проходит сквозь отверстия (поры) в эквивалентном диске (в «сети»). Предложенная дисковая модель рассмотрена в двух вариантах:

Первый вариант – для сильно разбавленных образцов крови, когда узлами «сети» являются эритроциты (или «сети» отсутствуют вовсе, а седиментируют индивидуальные, свободные эритроциты).

Второй вариант – слабо разбавленные пробы крови – эквивалентный диск содержит эритроцитарные агрегаты, а встречный поток представляет собой раствор плазмы с некоторым количеством эритроцитов, не вошедших в состав агрегатов.

Оба варианта теоретической модели седиментации крови нашли удовлетворительное согласие с экспериментальными результатами.

Помимо общего научного интереса настоящее исследование предполагается к использованию для разработки акусто–оптического инструментального метода определения групповой принадлежности крови.

*Авторы выражают признательность проф. МГУ, д. б. н. Воейкову В. Л. за стимулирование интереса к данной тематике, а также за предоставление литературы, необходимой для выполнения работы.*

*В.В.Тучин выражает благодарность гранту Правительства Российской Федерации 14. Z50.31.0044 за поддержку.*

#### Литература

1. Biernacki E. //Z. f. physiolog. Chem. 1894. Bd.19. S. 179
2. Westergren A. //Acta Med. Scand. 1921.V. 54. P. 247–281
3. Hashemi Reza, Majidi Alireza, Motamed Hassan et al. // Emergency 2015. V.3. №2. P. 50–53
4. Воейков В. Л. // Успехи физиологических наук 1998. Т. 29. № 4. С. 55–73
5. Zlonis M. //Clin Lab Med. 1993. V. 13. P. 787–800
6. Mehrun Nisa, Samina Zaman, // Proceeding S.Z.P.G.M.I. 2003. V. 17. №2. P. 71–73
7. Siemons Liseth, ten Klooster Peter M, Vonkeman Harald E et al. // BMC Musculoskeletal Disorders 2014. V. 15 P.368
8. Shahzad Farhana, Tawwab Shahzad, Abbas Afia // J Ayub Med Coll Abbottabad 2009. V.21. P.3
9. Rührenstroth–Bauer G., Schedler K., Scherer R. et al. // J. Clin. Chem. Clin. Biochem.1990. V. 28. P. 845–850
10. Talstad I., Haugen H. F. // Scand J Clin Lab Invest. 1979. V.39. № 6. P. 519–24
11. Shi Xing, Lin Guang // Numerical Mathematics: Theory, Methods and Applications 2014. V. 7. № 4. P. 512–523
12. Hung W.T., Collings A.F. // Phys. Med. Biol. 1994. V. 39. P. 1855–1873
13. Fabry T.L. // Blood. 1987. V.70. №5. P. 1572–1578
14. Voeikov V.L., Goncharenko A.I., Goncharenko S.A. et al. Gas microbubbles in fresh native blood and their significance for ESR measurements, The 3rd European Medical and Biological Engineering Conference November 20 – 25, 2005, EMBEC'05 Prague, Czech Republic, IFMBE Proc. 2005 11(1) ISSN: 1727–1983
15. Воейков В.Л., Буравлева Е.В., Кондаков С.Э. // Вестн. Моск. Ун–та. СЕР. 2. Химия. 2012. Т. 53. № 6. С. 413–16
16. Новые лабораторные технологии для определения скорости оседания эритроцитов, [http://www.advsum.com/catalog/encyclopedia\\_technologies/laboratory/1528/](http://www.advsum.com/catalog/encyclopedia_technologies/laboratory/1528/)
17. Смоляр К. А. О методах определения скорости оседания эритроцитов и аспектах интерпретации результатов, <http://www.veterinars.com/dokladu/o-metodah-opredeleniya-skorosti-oseda.html>, Опубликовано 01.05.2016
18. Ismailov Rovshan M. , Shevchuk Nikolai A. and Khusanov Higmat // BioMedical Engineering OnLine. 2005.V.4. № 24. P. 4–24
19. Bürger Raimund, Wendland Wolfgang L. // Journal of Engineering Mathematics 2001. V. 41. № 2. P. 101–116
20. Лосев Е. С. // Биофизика 1992. Т. 37. № 6. С. 32 - 34
21. Pribush A., Meyerstein D., Meyerstein N.// Colloids and Surfaces B: Biointerfaces 2010. V.75. P. 214–223
22. Fenech Marianne, Garcia Damien, Meiselman Herbert J. et al. // Annals of Biomedical Engineering 2009. V. 37. № 11. P. 2299–2309
23. Дубровский В.А., Дворецкий К.Н., Марков С.В. Оптическая цифровая регистрация седиментации эритроцитов и ее моделирование в форме коллективного процесса //Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM–2017. Под ред. Г.В. Симоненко, В.В. Тучин. Саратов: Изд – во «Новый ветер», 2017, стр. 20–28.
24. Stokes G.G. Mathematical and Physical Papers, Cambridge: AT, The University Press, 1980.
25. Oka Syoten // Biorheology 1985. V. 22. P.315–321
26. Lamb H. // Hydrodynamics, , 6<sup>th</sup> Edition, Cambridge, 1945, P.604–605.
27. Ladenburg R. // Ann. Phys. 1907. V. 22. P.287
28. Normatov T.D., Khusanov I.N. // Nauka 2001. V.5. P. 35–38
29. Балаховский С.Д. Реакция оседания эритроцитов. М.–Л.: ГИЗ. 1928. 149 с.
30. Kuo C.D., Bai J.J., Chang I.T. et al. //J. Biomech. Eng. 1988. V. 110. № 4. P. 392–395
31. Воейков В.Л., Дмитриев А.Ю., Пирогов А.В. О биофизических механизмах реакции оседания эритроцитов. //Четвертый Международный Пушинский симпозиум “Связь биологических и физико–химических процессов с космическими и гелио–геофизическими факторами”. Тезисы докладов. Пушино. 1996. С. 129–130.
32. Воейков В.Л., Гурфинкель Ю.И., Дмитриев А.Ю. и др. // Доклады РАН. 1996. Т. 359. № 5. С.1–5.
33. Дубровский В.А., Дворецкий К.Н., Балаев А.Э. // Акустический журнал 2004. Т.50. №2. С. 184–192
34. Дубровский В.А., Долмашкин А.А. // Медицинская техника 2012. №2. С. 24–30
35. Дубровский В.А., Забенков И.В., Торбин С.О. // Медицинская техника 2013. №3. С. 14–17
36. Doubrovski V.A., Ganilova Yu.A., Zabenkov I.V. // J. Biomed. Opt., 2014. V. 19. № 3. P. 12
37. Doubrovski V.A., Dvoretzki K.N. // Ultrasound in Medicine & Biology 2000. V.26. № 4. P.655–659
38. Дворецкий К.Н., Увеличение разрешающей способности фотометрического метода регистрации агглютинации эритроцитов человека in vitro, канд. дисс. физ–мат. наук, специальность – 03.00.02. (биофизика), 2004.
39. Алексеенко И.Ф. // КОНСПЕКТ ВРАЧА, выпуск № 19 (379), <https://studfiles.net/preview/535508>,

40. Svetina Erythrocyte Sedimentation Rate (ESR) <https://www.pum.edu.pl/sql>  
41. Bishop J.J., Nance P.R., Popel A.S. et al. // Am. J. Physiol. Heart Circ. Physiol. 2004. V. 286. № 1. P.113–133  
42. Boynard M., Lelievre J.C. // Biorheology. 1990. V.27. № 1. P.39–46  
43. Muralidharan E., Tateishi N., Maeda N. // Biomedica et biophysica acta 1994. V. 1194. № 2. P. 255–263

## МЕТОД КОМПЬЮТЕРНОГО РАСПОЗНАНИЯ ХРЯЩЕВОЙ ТКАНИ НА МИКРОФОТОГРАФИЯХ ГИСТОЛОГИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ КОСТНОЙ ТКАНИ КРЫС В ОБЛАСТИ ИМПЛАНТАЦИИ СКАФФОЛДОВ

И.А. Норкин<sup>1</sup>, И.В. Забенков<sup>3</sup>, И.О. Бугаева<sup>2</sup>, Д.А. Горин<sup>4</sup>, А.Н. Иванов<sup>1</sup>, М.О. Куртукова<sup>3</sup>, П.В. Рябухо<sup>2</sup>,  
М.С. Савельева<sup>2</sup>, В.Ю. Ульянов<sup>1</sup>, С.В. Кустодов<sup>2</sup>, Д.А. Тяпкина<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Научно исследовательский институт травматологии, ортопедии и нейрохирургии,

<sup>2</sup> Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского,

<sup>3</sup> Саратовский государственный медицинский университет имени В.И. Разумовского,

<sup>4</sup> Сколковский институт науки и технологий

Для морфологического исследования по стандартной методике готовили поперечные срезы диафиза бедренной кости в области имплантации скаффолдов толщиной 5-7 мкм, окрашенные гематоксилином и эозином («Биовитрум», Россия). Исследование препаратов зоны имплантации осуществлялось в проходящем свете с помощью цифрового микровизора mVizo-103 (ОАО «ЛМО», Россия). С помощью программного инструментария OpenCV была разработана методика автоматизированного анализа микрофотографий позволяющая распознавать области хрящевой ткани, расположенные по периферии от кортикальной пластинки и в костномозговой полости. В автоматизированном режиме были определены величины площадей распознанных регионов. Полученные значения сравнивались с величинами, полученными путём «ручного» оконтуривания фрагментов микроизображений занятых хрящевой тканью.

### ВВЕДЕНИЕ

Одной из актуальных проблем медицины на сегодняшний день является стимуляция регенерации поражённых участков тканей, посредством применения специальных технологий тканевой инженерии, заключающихся во внедрении матриц в поврежденный участок [1].

Матрицы, или скаффолды, представляют собой трехмерные каркасы, пронизанные порами, которые имплантируются непосредственно в область дефекта [DoA.V. et al., 2015]. Данные имплантаты должны обладать биосовместимостью для возможности васкуляризации и заселения клеточными элементами [1]. Важно, чтобы сроки биодеградации имплантатов в организме были сопоставимы со сроками восстановления поврежденного участка.

При создании скаффолдов используют обширный спектр материалов, имеющих как природное, так и искусственное происхождение [2]. Однако большее предпочтение отдаётся именно синтетическим веществам из-за их эффективности и полифункциональности, в частности – поликапролактону (ПКЛ). Клетки на подобных ПКЛ-матрицах обладают высоким уровнем пролиферации и адгезией, а так же продукты при биодеградации таких скаффолдов не оказывают никакого токсического воздействия на организм [3]. Скаффолд-технологии активно используются при замещении дефектов костной ткани. Поэтому для данных целей ПКЛ-матрицы минерализуют неорганическими веществами, например, ватеритом ( $\text{CaCO}_3$ ), что открывает новые перспективы в регенерации костной ткани, так как  $\text{CaCO}_3$  не только стимулирует пролиферацию клеток, но и может участвовать в адресной доставке предварительно адсорбированных биологически активных веществ, высвобождая их при переходе в кальцит [4].

Внедрение в практическую медицину данного метода регенерации тканей требует тщательных доклинических исследований, одним из важных этапов которых представляет имплантация в костную ткань ПКЛ-матриц, минерализованных ватеритом, для проверки остеоиндуктивных свойств скаффолдов. Одной из частных практических задач при этом является оценка интенсивности процесса остеогенеза, а именно интенсивности формирования костных балок, с помощью расчета их площади в микрофотографиях.

Целью эксперимента являлось оценка процесса регенерации костной ткани при замещении дефекта бедренной кости у белых крыс скаффолдом из поликапролактона (ПКЛ) и ватерита ( $\text{CaCO}_3$ ) с помощью подсчета площади костных балок.

## ХОД ЭКСПЕРИМЕНТА

Экспериментальные исследования выполнены на 10 белых нелинейных крысах-самцах массой 200-260 г. Для имплантации использовали матрицы на основе поликапролактона (ПКЛ), изготовленные методом электроформования. Для имплантации животным опытной группы использовались скаффолды, минерализованные ватеритом ( $\text{CaCO}_3$ ) по методике, описанной в работе [4].

Работа проводилась в соответствии с Конвенцией по защите животных, используемых в экспериментах и для других научных целей (принятой Советом Европы в 1986 году), Хельсинкской декларации по вопросам медицинской этики и Международным рекомендациям по проведению медико-биологических исследований с использованием лабораторных животных (1989), приказом МЗ РФ № 267 от 19.06.2003 «Об утверждении правил лабораторной практики». Исследование проводилось в соответствии с рекомендациями Этического комитета Саратовского государственного медицинского университета им. В.И. Разумовского (Протокол № 6 от 6.02.2018).

С целью достижения наркоза экспериментальным животным за 5 минут до проведения оперативного вмешательства внутримышечно вводились комбинация телазола («ZoetisInc», США) в дозе 0,1 мл/кг и ксилазина («Interchemie», Нидерланды) в дозе 1 мг/кг. Для имплантации матриц проводился разрез предварительно депилированной и обработанной антисептиком кожи латеральной поверхности бедра длиной порядка 2,5 см. Тупым и острым способом выполнялся доступ к бедренной кости. С помощью алмазного диска и электродрели в диафизе бедренной кости формировался дефект в виде линейного продольного пропила длиной 5-7 мм (Рисунок 1а), шириной 1-2 мм и глубиной до костномозговой полости (порядка 2-3 мм). В соответствии с формой сформированного дефекта имплантировался скаффолд в виде пластинки 5x2x2 мм (Рисунок 1б). Рана ушивалась послойно наглухо с использованием нерассасывающейся монофиламентной нити Resorpen 3-0 USP («RESORBA Medical GmbH», Германия).

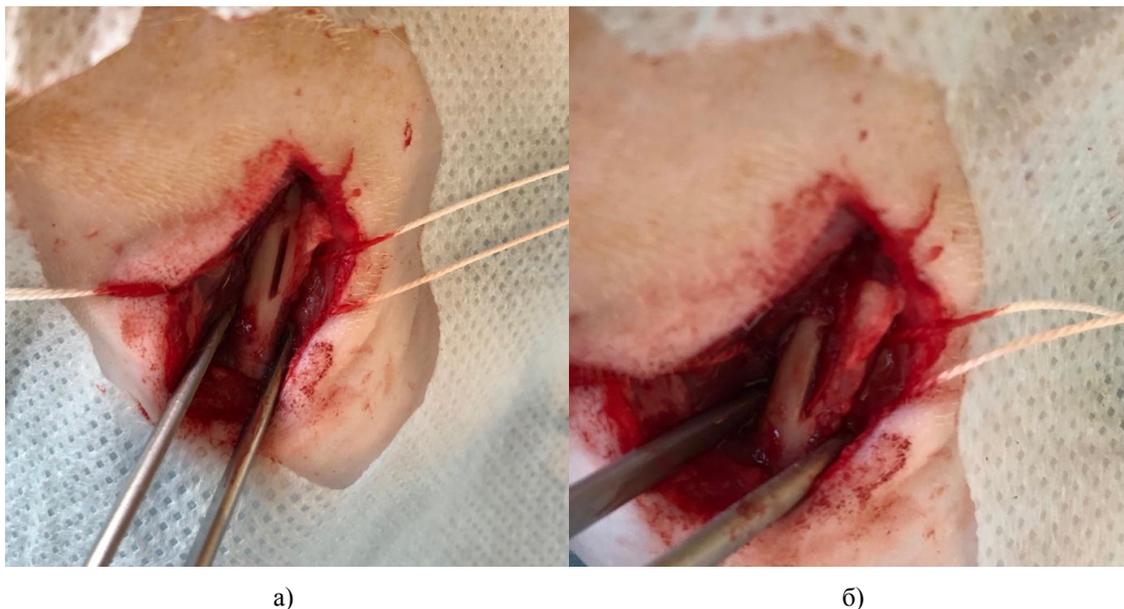


Рис. 1. Продольный пропил бедренной кости крысы – (а), имплантация образца матрицы PCL+CaCO<sub>3</sub> в область пропила – (б)

Через 28 дней животные были выведены из эксперимента путем передозировки препаратов наркоза. Бедренная кость с имплантированным образцом извлекалась, отделялась от мышц и связочного аппарата (Рисунок 2), после чего фиксировалась в 10% растворе нейтрального формалина (ООО «Биовитрум», Россия). Для морфологического исследования образцы бедренной кости подвергались деминерализации электролитным декальцинирующим раствором («ЭргоПродакшн», Россия) в течение суток. После этого для изготовления препаратов вырезался участок бедренной кости, содержащий зону имплантации, длиной около 5 мм. Образцы обезвоживали в спиртах восходящей крепости, после чего заливали в парафин. Срезы толщиной 5-7 мкм окрашивались гематоксилином Майера (ООО «Биовитрум», Россия) и эозином (ООО «Биовитрум», Россия).

Анализ препаратов проводили с помощью медицинского микровизора проходящего света mVizo-103 (ОАО «ЛОМО», Россия). При этом использовались объективы с увеличением x5, x20 и

камера разрешением 640x768 пикселей. Область зрения, при этом, составляла 1,9661 и 0,1361 мм<sup>2</sup> соответственно.



Рис. 2. Образец извлечённой бедренной кости крысы с имплантированным образцом матрицы PCL+CaCO<sub>3</sub>

### КОМПЬЮТЕРНЫЙ АНАЛИЗ МИКРОФОТОГРАФИЙ

С целью разработки алгоритма автоматического определения площади хрящевой ткани, была использована одна микрофотография образца бедренной кости крысы с имплантированным образцом матрицы PCL+CaCO<sub>3</sub>, полученная с x20 объективом. Для разработки программы использовалась библиотека искусственного зрения OpenCV. В основу алгоритма легли следующие факторы:

- 1) распознавание клеточных ядер хрящевых клеток;
- 2) информация о минимальном и максимальном расстоянии между ядрами соседних клеток;
- 3) ограничение минимально допустимого числа соседствующих клеток.

Рассмотрим процедуру определения площади хрящевой ткани подробнее.

На первом этапе изображение микропрепарата преобразовывалось из цветного RGB формата в чёрно-белое с 256 степенями яркости. Затем, с целью избавления от шума, производилось гауссово сглаживание с размером окна 5x5 пикселей (рисунок 3а). Как видно на изображении, клетки хрящевой ткани в большинстве имеют чётко выраженные ядра тёмного цвета по сравнению с более светлым остальным внутриклеточным и межклеточным пространством, а также тканью, в которой остеогенез практически завершился (выделено пунктиром).

В связи с этим, следующим этапом стала инверсная бинаризация полученного на предыдущем шаге изображения. При этом, всем пикселям с яркостью выше пороговой –  $V_{\text{порог}}$  присваивалось значение  $B = 0$ , а в противном случае – значение  $B = 255$ . Пороговый уровень яркости для данного образца был подобран вручную и составил  $V_{\text{порог}}=150$ . В результате данной операции было получено двухцветное чёрно-белое изображение, представленное на рисунке 3б. Из сравнения оригинального и бинаризованного изображений видно, что на втором ядра клеток приобрели белый цвет.

Поскольку дальнейшему анализу подвергались белые объекты, а чёрный цвет играет роль фона, то присутствие на полученном бинаризованном изображении большого числа чёрных артефактов размером в несколько пикселей затруднило последующие этапы обработки. Устранить данные микрообъекты позволило использование морфологического закрывающего (closing) фильтра с маской круглой формы размером 5x5 пикселей. На рисунке 4 представлены фрагменты бинаризованного изображения до (рисунок 4а) и после применения закрывающего фильтра (рисунок 4б).

После удаления мелких чёрных элементов проводилось распознавание контуров белых объектов с помощью алгоритма описанного в работе [5]. В результате данной операции были найдены контуры ядер хрящевых клеток. Однако, вместе с ними оказались распознаны контуры клеточных мембран и других белых артефактов различной формы и размера (рисунок 5а), которые

решено было исключить из дальнейшего анализа. Фильтрация контуров проводилась в соответствии со следующими признаками:

- 1) Размер клеточного ядра (площадь контура) должен быть в диапазоне от 20 до 1500 пикселей.
- 2) Степень округлости контура, выраженная формулой  $M = P^2/S$ , должна быть не больше 60, где  $P$  – длина контура, а  $S$  – его площадь.
- 3) Средняя яркость внутри контура, рассчитанная на основе оригинального изображения в градациях серого, должна быть не выше 140.

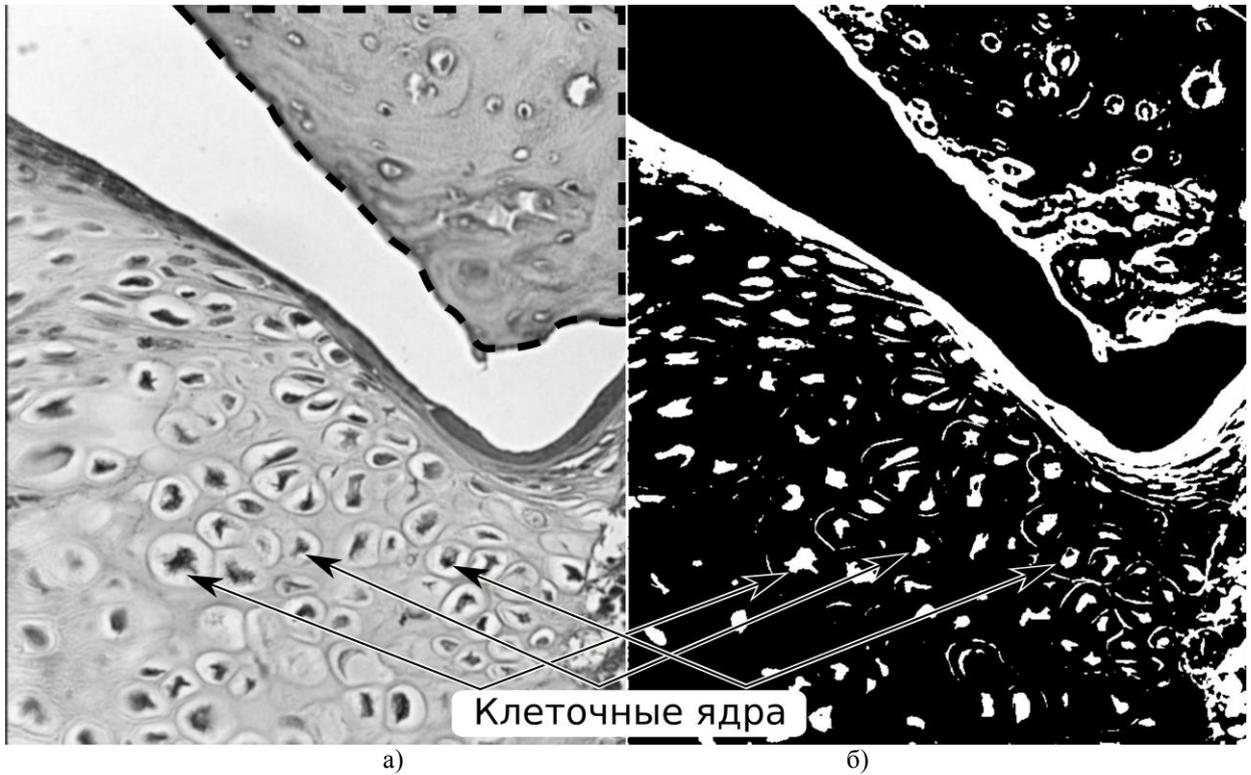


Рис. 3. Фотография микропрепарата бедренной кости крысы с имплантированным образцом матрицы PCL+CaCO<sub>3</sub>. Преобразованное к градациям серого оригинальное изображение после гауссовой фильтрации – (а); инверсно-бинаризованное изображение – (б).

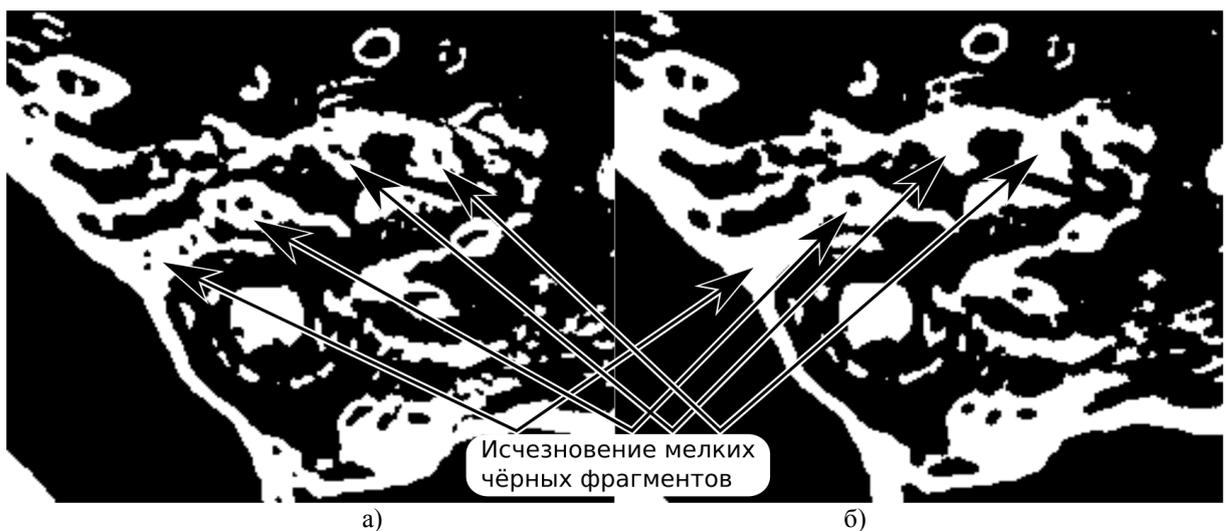


Рис. 4. Фрагменты бинаризованных изображений микропрепарата бедренной кости крысы с имплантированным образцом матрицы PCL+CaCO<sub>3</sub> до – (а) и после применения морфологического закрывающего фильтра – (б).

С помощью размерного признака были отфильтрованы контуры соответствующие как слишком мелким, так и слишком большим белым артефактам и объектам, не соответствующим клеточным ядрам. С помощью второго – отсеивались сплюснутые контуры и контуры сложной

формы, большинство из которых соответствовало мембранам клеток. И наконец, с помощью фильтрации по средней внутриконтурной яркости были отсеяны контуры, охватывающие относительно светлые участки. В результате данных фильтраций было исключено большинство «лишних» контуров, не соответствовавших клеточным ядрам (рисунок 5б).

На следующем этапе проводилось исключение контуров, находящихся друг от друга на расстоянии меньшем, чем минимально возможное межклеточное расстояние –  $d$ . При этом, среди нескольких таких контуров оставлялся тот, который имел наибольшую площадь. Параметр  $d$  был определён путём ручного перебора межъядерных расстояний по одной микрофотографии и составил 20 пикселей.

Поскольку нас интересует площадь, занимаемая хрящевой тканью состоящей из группы клеток, то последним этапом фильтрации контуров стала их группировка со следующими условиями:

1) Расстояние между соседними контурами (клеточными ядрами) в группе должно не превышать 120 пикселей (было определено путем ручного перебора соседних межклеточных расстояний и выбора максимального из них)

2) Минимальное число контуров (клеток) в группе не должно быть меньше 7. Данный минимальный размер группы был найден путём последовательного прогона алгоритма с различными значениями данного параметра и визуальной оценки правильности результата.

Результатом последних стадий фильтрации стало окончательное формирование групп контуров соответствующих клеточным ядрам. На рисунке 6 центры данных контуров помечены чёрно-белыми кружками.

После определения всех клеточных ядер, предстояло найти площадь фигуры, в которую они входят. Для этого была использована следующая процедура. Во-первых, на отдельном чёрном холсте программно были нарисованы белые линии, соединяющие центры таких соседствующих клеточных ядер, между которыми расстояние не превышало 120 пикселей. Затем, с помощью процедуры распознавания контуров [Satoshi Suzuki] были найдены все контуры получившихся объектов. Максимальный из полученных контуров оказался искомой фигурой и охватывал все предварительно распознанные клеточные ядра. На рисунке 7 представлена фотография исследуемого микропрепарата, где серой тонкой линией обведена область, занимаемая хрящевой тканью, найденная вручную, а толстой чёрной линией – аналогичная область, найденная программно с использованием описанного выше алгоритма.

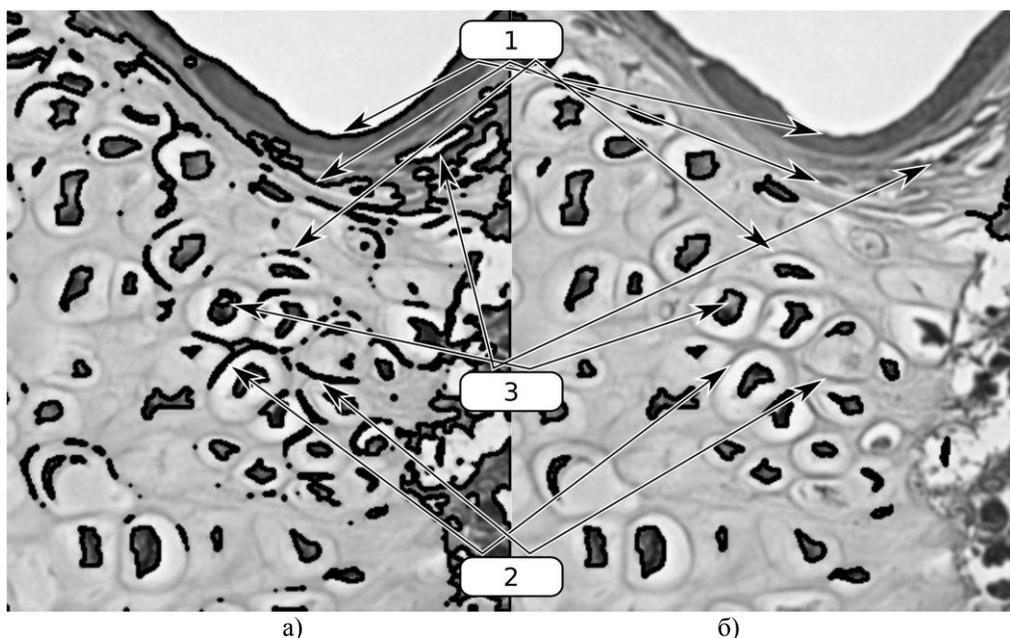


Рис. 5. Фрагменты изображений микропрепарата бедренной кости крысы с имплантированным образцом матрицы PCL+CaCO<sub>3</sub> со всеми контурами – (а) и с контурами, оставшимися после применения серии фильтров – (б). Цифрами обозначены контуры удалённые различными типами фильтров: 1 – отсеивание по размеру, 2 – отсеивание по форме, 3 – фильтрация по средней яркости внутри контура

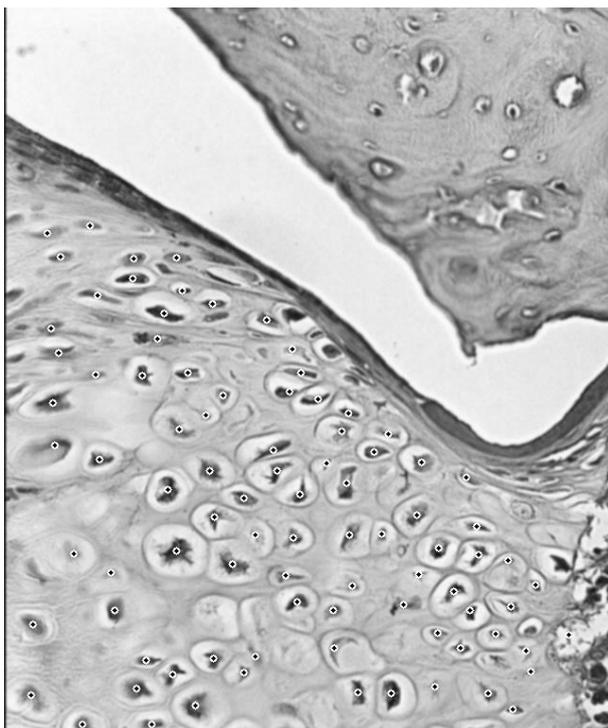


Рис. 6. Фотография микропрепарата бедренной кости крысы с имплантированным образцом матрицы PCL+CaCO<sub>3</sub>. Кругами обозначены центры клеточных ядер автоматически определённых с помощью рассматриваемого алгоритма

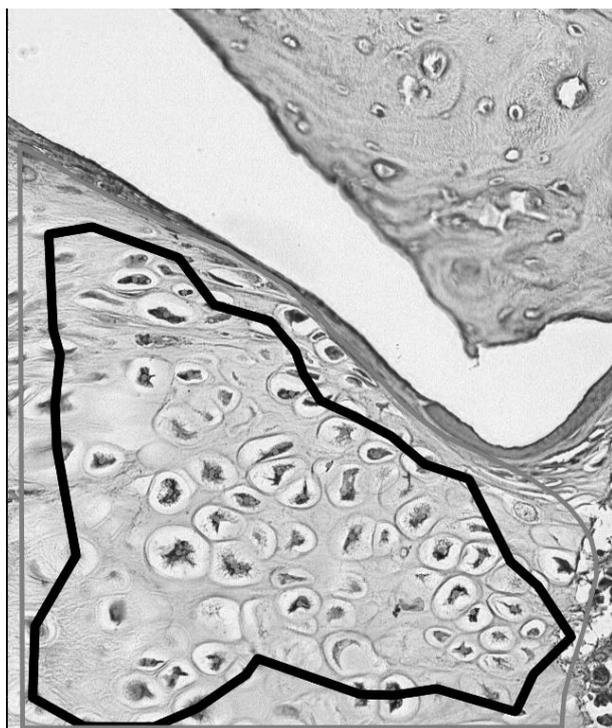


Рис. 7. Фотография микропрепарата бедренной кости крысы с имплантированным образцом матрицы PCL+CaCO<sub>3</sub>. Серая линия нарисована вручную и охватывает зону, занимаемую хрящевой тканью. Чёрная линия охватывает аналогичную область и найдена программно с помощью описанного алгоритма

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Разработанный алгоритм распознавания хрящевой ткани и нахождения её площади был протестирован на 9-ти микрофотографиях одного образца бедренной кости крысы с имплантированным образцом матрицы PCL+CaCO<sub>3</sub>. Кроме того, с целью оценки качества работы описанного выше алгоритма для каждой из фотографий производилась независимая ручная отрисовка соответствующих контуров с последующим программным нахождением их площадей. Результаты определения площадей хрящевой ткани программным и ручным методами представлены в таблице 1. По данным таблицы 1 видно, что 8 из 9 значений площадей определённых программно меньше аналогичных площадей определённых вручную. Только в 1 случае площадь хрящевой ткани определённая программно оказалась больше области определённой вручную. В целом относительная погрешность между ручным и программным методами колеблется в диапазоне от -34,1 до 17,3 %.

Площади хрящевой ткани на микрофотографиях образцов бедренной кости крысы с имплантированным образцом матрицы PCL+CaCO<sub>3</sub> найденные «вручную» и программно

Номер микрофотографии №	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Площадь найденная «вручную», мм <sup>2</sup>	0,0707	0,0908	0,0830	0,0618	0,0897	0,0806	0,1354	0,0885	0,1094
Программно найденная площадь, мм <sup>2</sup>	0,0516	0,0775	0,0974	0,0494	0,0591	0,0630	0,1124	0,0630	0,1016
Относительная погрешность, %	-27,1	-14,6	17,3	-20,1	34,1	-21,8	-17,0	-28,9	-7,2
Диапазон относительной погрешности, %	-34,1 – 17,3								

Предложенный в настоящей работе алгоритм, разумеется, не является окончательным и предполагает дальнейшие возможные улучшения, среди которых можно выделить следующие:

1) Учёт и распознавание мембран клеток

2) Достижение, по возможности, большей инвариантности параметров распознавания по отношению к яркости освещения микропрепарата, его способу окраски, а также коэффициента увеличения оптической системы микроскопа.

Однако данные улучшения являются делом последующей работы.

#### Литература

1. Новочадов В.В. // Вестник Волгоград. гос. ун-та. 2013. Т. 1. №5. С. 19-28
2. Иванов А.Н., Норкин И.А., Пучиньян Д.М. // Цитология 2014. Т.56. № 8. С. 543-548
3. Mkhabela V., Ray S.S. // International Journal of Biological Macromolecules 2015. V.79. P. 186–192
4. Saveleva M.S., Ivanov A.N., Kurtukova M.O. et al. // Materials Science & Engineering C – Materials for biological applications 2018. V. 85. P. 57–67
5. Satoshi Suzuki et al. // Computer Vision, Graphics, and Image Processing 1985. V.30. № 1. P. 32-46
6. Do A.V., Khorsand B., Geary S.M. et al. // Adv. Healthcare Mater 2015. V. 4. P.1742–1762
7. Saveljeva M.S., Ivanov A.N., Kurtukova M.O. et al. // Materials Science & Engineering C. Part C. 2018. V. 10. P. 1-12

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЦВЕТОВЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПО СПЕКТРАЛЬНЫМ ДАННЫМ ПРИ ФОТООТБЕЛИВАНИИ ГЛИКИРОВАННОГО ДЕНТИНА

Н.И. Казадаева, Т.А. Кашина, Л.Е. Долотов, А.Б. Правдин

*Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского*

Проведена оценка изменения цвета дентина гликированных зубов при фотоотбеливании по цветовым координатам, рассчитанным по спектральным данным и цифровым фотографиям в лабораторных условиях.

### ВВЕДЕНИЕ

Корректное определение цвета зубов является одним из важных составляющих современной эстетической стоматологии. Цвет является основным параметром при оценке результата проведенного отбеливания. В настоящее время методики для определения цвета зубов делятся на две большие группы: визуальные и аппаратные [1,2,3].

Визуальные методы являются субъективными методами восприятия цвета зубов. Данные методы основаны на сравнении цвета зубов с эталонными шкалами оттенков. Экономическая доступность и простота в использовании являются главными преимуществами данной методики [4,5]. Процедура подбора цвета достаточно сложна и требует наличие необходимых условий и благоприятной окружающей обстановки. На визуальные методы определения цвета влияет большое количество факторов, таких как: световосприятие, острота зрения, опыт и возраст специалиста, принимаемые лекарственные средства, условия освещения, полупрозрачность и структура поверхности зуба [1,2,3]. Аппаратурные методы позволяют уменьшить вероятность возникновения ошибок при определении цвета зубов и делают этот процесс более прогнозируемым, при этом исключая субъективное цветовое восприятие [2]. Такие методы в настоящее время начинают

получать все большее распространение. По способу измерения аппаратурные методы делятся на спектральные, колориметрические и основанные на цифровой фотографии [1,2,3,6].

В данной работе проводилась оценка изменения цвета дентина гликированных зубов при фотоотбеливании по цветовым координатам, рассчитанным по спектральным данным и цифровым фотографиям в лабораторных условиях.

**МЕТОДЫ И МАТЕРИАЛЫ**

Эксперимент был проведен на 4 образцах зубов человека, удаленных по ортодонтическим показаниям. Зубы были промыты в воде, очищены от зубного налета и распилены корундовой дисковой пилой в продольном направлении от коронки к корням. Образцы были помещены в 10% раствор глюкозы на 7 суток. Далее образцы были подвергнуты нагреву в воздушном термостате при температуре 90°C в течение 2 часов. В течение месяца образцы хранились в дистиллированной воде в холодильнике. Затем образцы были подвержены процедуре фотоотбеливания в общей сложности по 6 часов каждый.

В ходе эксперимента были получены спектральные данные и цифровые фотографии до гликирования, после гликирования, спустя 1 час, 3 часа и 6 часов отбеливания. Спектральные данные были получены: при помощи спектрального анализатора Lesa-7-med с волоконно-оптическим вводом с галогеновой лампой в качестве источника излучения для спектров отражения, и с азотным лазером ЛГИ-505 в качестве источника возбуждающего излучения для спектров флуоресценции; а также при помощи спектрофлуориметра Perkin Elmer LS-55.

Для определения цветовых характеристик по спектральным данным были использованы методы, опробированные нами в [7] работе, данные методы были изложены в работах [8, 9, 10].

Первая методика для расчета цветовых координат в системе XYZ по спектрам отражения [8]:

$$\begin{aligned}
 X &= \sum_{380nm}^{780nm} R_d(\lambda_i) \bar{x}(\lambda_i) I_C(\lambda_i) \Delta\lambda, \\
 Y &= \sum_{380nm}^{780nm} R_d(\lambda_i) \bar{y}(\lambda_i) I_C(\lambda_i) \Delta\lambda, \\
 Z &= \sum_{380nm}^{780nm} R_d(\lambda_i) \bar{z}(\lambda_i) I_C(\lambda_i) \Delta\lambda,
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

где  $\bar{x}(\lambda_i)$ ,  $\bar{y}(\lambda_i)$ ,  $\bar{z}(\lambda_i)$  – удельные цветовые координаты на длине волны  $\lambda_i$ ,  $\Delta\lambda = 5$  нм,  $I_C(\lambda_i)$  – интенсивность источника белого цвета С при длине волны  $\lambda_i$ . Спектральные зависимости произведений  $\bar{x}(\lambda_i)I_C(\lambda_i)$ ,  $\bar{y}(\lambda_i)I_C(\lambda_i)$ ,  $\bar{z}(\lambda_i)I_C(\lambda_i)$  представлены в работе [8].

Вторая методика для расчета цветовых координат по спектрам отражения [9]:

$$\begin{aligned}
 X &= k_C \sum_{380nm}^{780nm} I_{RC}(\lambda_i) \bar{x}(\lambda_i) \Delta\lambda, \\
 Y &= k_C \sum_{380nm}^{780nm} I_{RC}(\lambda_i) \bar{y}(\lambda_i) \Delta\lambda, \\
 Z &= k_C \sum_{380nm}^{780nm} I_{RC}(\lambda_i) \bar{z}(\lambda_i) \Delta\lambda,
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

где интенсивность диффузно отраженного света:

$$I_{RC} = I_C \times R_d(\lambda_i).
 \tag{3}$$

Для множителя  $k_C$  справедливо соотношение:

$$k_C = \frac{100}{\sum_{380nm}^{780nm} I_{RC}(\lambda_i) \bar{y}(\lambda_i) \Delta\lambda} \quad (4)$$

Для расчёта цветовых координат по спектрам флуоресценции использовалась методика [9]:

$$X = k_C \sum_{380nm}^{780nm} I_{Fl}(\lambda_i) \bar{x}(\lambda_i) \Delta\lambda,$$

$$Y = k_C \sum_{380nm}^{780nm} I_{Fl}(\lambda_i) \bar{y}(\lambda_i) \Delta\lambda,$$
(5)

$$Z = k_C \sum_{380nm}^{780nm} I_{Fl}(\lambda_i) \bar{z}(\lambda_i) \Delta\lambda,$$

где  $I_{Fl}(\lambda_i)$  – интенсивность автофлуоресценции дентина, и множитель  $k_C$ :

$$k_C = \frac{100}{\sum_{380nm}^{780nm} I_{Fl}(\lambda_i) \bar{y}(\lambda_i) \Delta\lambda} \quad (6)$$

Значения удельных цветовых координат  $\bar{x}(\lambda_i)$ ,  $\bar{y}(\lambda_i)$ ,  $\bar{z}(\lambda_i)$  были взяты из работы [10]. Полученные данные были переведены из цветового пространства XYZ в Lab.

Наряду с регистрацией спектров проводилась цифровая фотосъемка образцов фотокамерой «Nikon D80». Изображения были сохранены в формате RAW и переведены из цветового пространства RGB в Lab.

При помощи полученных цветовых координат, можно определить цветовое различие  $\Delta E$ , которое обеспечивает количественное представление цветовой разницы [1]:

$$\Delta E_{ij} = \sqrt{(L_i - L_j)^2 + (a_i - a_j)^2 + (b_i - b_j)^2} \quad (7)$$

Для характеристики относительных изменений поглощающих свойств дентина использовалась величина  $\Delta OP$  – эффективная оптическая плотность, характеризующая влияние эффектов внутреннего фильтра на величину сигнала автофлуоресценции, и которая в нашем случае ( $\Delta OD_{420}$ ) определяет количество исчезнувшего при отбеливании желтого хромофора.

#### РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В таблице 1 представлено цветовое различие образцов зубов в зависимости от метода расчета цветовых координат в ходе эксперимента, где:

$\Delta E_1$ - цветовое различие, рассчитанное по данным, полученным до гликирования и после гликирования образца,

$\Delta E_2$  - цветовое различие, рассчитанное по данным, полученным после гликирования и через 1 час отбеливания образца,

$\Delta E_3$ - цветовое различие, рассчитанное по данным, полученным после гликирования и через 3 часа отбеливания,

$\Delta E_4$ - цветовое различие, рассчитанное по данным, полученным после гликирования и через 6 часов отбеливания,

(1), (2), (5) - нумерация формул, используемых для расчета XYZ.

Фотографический метод можно считать наиболее приближенным к зрительному восприятию дентина, поэтому мы выбрали его эталонным методом для определения цветовых характеристик. Общие тенденции в изменении хроматических составляющих, полученных при помощи большинства методов, использующих расчет по спектральным данным, можно сопоставить с данными полученными при обработке цифровых фотографий. Методика определения цветовых

характеристик по спектрам отражения, полученным на спектроанализаторе LESA-7-med дает наиболее адекватное соотношение цветовых характеристик образцов дентина с разным уровнем пигментации с результатами, рассчитанным по фотографиям.

Таблица 1.

Цветовое различие образцов в зависимости от метода расчета цветовых координат

Методы	Lesas Флуор-я (5)	Lesas Отраж-е (1)	Lesas Отраж-е (2)	PerkinEl. Флуор-я (5)	PerkinEl. Отраж-е (1)	PerkinEl. Отраж-е (2)	Цифр. фото	
Образец 1	$\Delta E_1$	15,743	46,24	10,75	28,50	121,42	44,68	6,1
	$\Delta E_2$	10,84	10,99	4,16	20,24	22,84	0,29	4,92
	$\Delta E_3$	14,32	18,37	6,51	34,65	49,34	0,24	6,19
	$\Delta E_4$	16,92	31,43	9,26	39,16	69,85	0,77	13,38
Образец 2	$\Delta E_1$	20	71,82	11,85	16,07	137,79	51,53	6,85
	$\Delta E_2$	17,25	9,04	4,435	5,31	41,82	0,07	2,54
	$\Delta E_3$	24,68	25,11	8,04	17,76	71,83	0,007	4,24
	$\Delta E_4$	30,06	20,17	11,00	21,61	114,00	0,007	6,69
Образец 3	$\Delta E_1$	24,87	21,05	9,85	50,30	114,22	39,37	10,10
	$\Delta E_2$	18,14	6,68	5,97	24,48	23,85	6,05	6,28
	$\Delta E_3$	27,50	11,11	9,04	34,67	48,26	3,66	7,28
	$\Delta E_4$	41,83	37,61	13,17	63,81	86,20	5,59	12,04
Образец 4	$\Delta E_1$	13,59	54,80	18,57	28,46	121,04	48,90	18,90
	$\Delta E_2$	25,59	24,11	12,34	16,94	48,73	9,49	14,53
	$\Delta E_3$	36,89	83,87	18,31	22,20	36,65	1,42	18,07
	$\Delta E_4$	56,07	81,013	22,75	35,60	70,79	1,35	20,25

На рис.1 приведена зависимость относительной эффективной оптической плотности  $\Delta OD$  при  $\lambda=420\text{nm}$  от времени отбеливания. По графику прослеживается увеличение количества желто-коричневого хромофора в дентине при гликировании зубов, а также уменьшение количества как приобретенного, так и первоначального хромофора при отбеливании. Изменение цвета, наблюдаемое по графику зависимости эффективной оптической плотности от времени отбеливания (рис.1) имеет такую же тенденцию, что и изменение цвета по цветовому различию и по цветовым характеристикам.

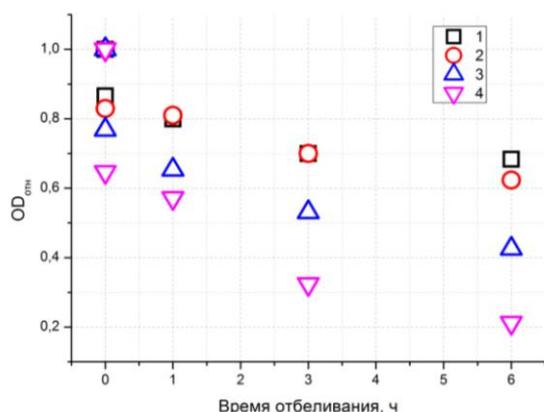


Рис. 1. Относительная эффективная оптическая плотность образцов в ходе эксперимента.

1 - образец 1, 2 - образец 2, 3 – образец 3, 4 - образец 4;

Время отбеливания: 0 - до гликирования, 0 - после гликирования; 1- спустя 1 час отбеливания; 3 - спустя 3 часа отбеливания; 6 – спустя 6 часов отбеливания

Таким образом, на основании измерений, полученных спектрофотометрическими методами, можно сделать вывод, что методика зондовой регистрации спектров отражения дентина (с поправкой на яркость) относительно белого эталона позволяет адекватно (в сравнении с фотометрическими методами определения цвета) воспроизводить тенденции цветовых характеристик пигментированного дентина.

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С целью выбора оптимальной методики контроля цветности зуба, во время молекулярного фотоотбеливания, были проведены измерения спектров флуоресценции и отражения четырех

образцов дентина на флуоресцентном спектрометре «PerkinElmer LS 55» и спектральном анализаторе LESA -7-med, по этим данным были рассчитаны цветовые характеристики различными методами, а так же была проведена оценка цвета по цифровой фотографии в качестве эталона (что широко применяется в эстетической стоматологии при реставрации).

Анализ значений цветовых характеристик, рассчитанных по зарегистрированным спектрам отражения и флуоресценции, позволяет рекомендовать зондовую методику регистрации спектров отражения (с поправкой на яркость) с использованием широкополосного галогенового источника света для контроля изменения уровня желтой пигментации при молекулярном фотоотбеливании гликированных зубов в лабораторных условиях.

#### Литература

1. Igel C. // Dental Materials Journal 2016. V. 35. № 1. P. 63–69
2. Chu S.J., Trushkowsky R.D., Paravina R.D. // J. Dent. 2010. V.38. № 2. P. 2-16
3. Al Saleh Samar, Labban Manal, AlHariri Morouj et al. // Journal of dentistry 40s. 2012. P. 82–87
4. Бурак Ж.М. Некоторые особенности определения цвета зубов в работе врача-стоматолога // Фундаментальная наука в современной медицине 2014: материалы сателл.-конф. молодых ученых, под ред. А.В. Сикорского, О.К. Кулаги, А.В. Стахейко, Т.В. Тереховой. Минск: БГМУ, 2014. С. 24 – 30
5. Nakhaei Mohammadreza, Ghanbarzadeh Jalil, Keyvanloo Shirin et al.// The Journal of Contemporary Dental Practice 2013. V.14. № 1. P. 100-103
6. Полифертова С.Ю. // Современные научные исследования и инновации 2016. № 10. С. 1 - 12
7. Казадаева Н.И., Долотов Л.Е., Правдин А.Б. Использование спектрофотометрических методик при лабораторной оценке цветности дентина // Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM-2017: материалы Международного симпозиума и Международной молодежной научной школы Saratov Fall Meeting 2017 / под ред. Г. В. Симоненко, В. В. Тучина. – Саратов: «Новый ветер», 2017. С. 35-39.
8. Синичкин Ю.П., Долотов Л.Е., Зимняков Д.А. и др. Специальный практикум по оптической биофизике. С71. In vivo отражательная и флуоресцентная спектроскопия кожи человека // Учеб. пособие для студентов вузов / Ю.П. Синичкин, Л.Е. Долотов, Д.А. Зимняков и др. Саратов: Изд-во Сарат. ун-та, 2003. 159 с.
9. Горбунова Е.В., Чертов А.Н. Колориметрия источников излучения // Учебное пособие. СПб: Университет ИТМО, 2015. 126 с.
10. Гуревич М.М. Цвет и его измерение // М.: Изд-во Академии наук СССР, 1950. 268 с.

### ОПТИЧЕСКОЕ ПРОСВЕТЛЕНИЕ КОЖИ ЧЕЛОВЕКА IN VIVO ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ НЕКОТОРЫХ МОНОСАХАРИДОВ

К. В. Березин<sup>1</sup>, К. Н. Дворецкий<sup>2</sup>, М. Л. Чернавина<sup>1</sup>, В.В. Нечаев<sup>3</sup>, А. М. Лихтер<sup>4</sup>,  
В. В. Смирнов<sup>4</sup>, Е. М. Антонова<sup>5</sup>, О. В. Гречухина<sup>6</sup>, М. В. Карташов<sup>6</sup>, В. В. Тучин<sup>1,7,8</sup>

<sup>1</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет

<sup>2</sup>Саратовский государственный медицинский университет

<sup>3</sup>Саратовский государственный технический университет

<sup>4</sup>Астраханский государственный университет

<sup>5</sup>Астраханский Медицинский Университет

<sup>6</sup>Каспийский институт морского и речного транспорта

<sup>7</sup>Институт проблем точной механики и управления РАН

<sup>8</sup>Национальный исследовательский томский государственный университет

С помощью метода ОКТ получены результаты оптического иммерсионного просветления кожи человека in vivo рядом водных растворов иммерсионных агентов (моносахаров рибозы, глюкоза, фруктозы, а также трехатомного спирта – глицерола). Для оценки эффективности оптического просветления определялись значения скорости изменения коэффициента рассеяния света, полученные с помощью усреднённого А-скана ОКТ сигнала на участке дермы глубиной от 350 до 700 мкм. Установлена хорошая корреляция между скоростью изменения коэффициента рассеяния света и величиной потенциала оптического просветления. В результате комплексного молекулярного моделирования методами классической молекулярной динамики и квантовой химии взаимодействия ряда иммерсионных просветляющих агентов с миметическим пептидом коллагена (GPH)<sub>3</sub> установлены корреляции между эффективностью оптического просветления и такой характеристикой, как энергия межмолекулярного взаимодействия просветляющих агентов с фрагментом пептида коллагена.

#### ВВЕДЕНИЕ

Использование современных методов фотомедицины и биомедицинской оптики для диагностики и терапии заболеваний сопряжено с трудностями, которые возникают из-за того, что кожа и многие другие биоткани обладают сильным рассеянием света в видимой и ближней инфракрасной области. Это рассеяние возникает за счет неоднородностей показателей преломления

на границах различных макромолекулярных структур, в основном на коллагеновых волокнах, которые преимущественно ответственны за рассеяние света в коже [1]. Эти трудности преодолеваются путем введения в ткань биосовместимых молекулярных агентов, которые в той или иной степени способствуют ее оптическому просветлению [2-5]. Экспериментальным *in vivo* и *in vitro* исследованиям просветления различных типов биотканей посвящено довольно много работ [6-12], что говорит об актуальности проблемы. В работе [13] методами ОКТ оценено синергетическое действие иммерсионного агента (ПЭГ-400), двух химических усилителей проникновения (триазина и 1,2-пропандиола) и физического массажа на эффективность оптического просветления кожи крысы *in vivo*. В работе [14] предложена математическая модель распространения света в биотканях. Разработка, основанная на ОКТ, технологии неинвазивного определения локальной молекулярной диффузии иммерсионных агентов описаны в [15]. В работе [16] рассмотрено влияние модельного сахарного диабета на оптическое просветления кожи лабораторных мышей. В работе [17] путем визуализации с помощью второй оптической гармоники (SHG-imaging) исследовался механизм оптического просветления кожи при использовании глицерина в качестве просветляющего агента. Тем не менее механизмы оптического просветления на молекулярном уровне до сих пор однозначно не определены, а изучению молекулярных процессов, ответственных за оптическое просветление кожи, посвящены единичные работы [1,18,19]. В работе [20] представлены результаты исследований дегидратирующих свойств просветляющих агентов и отмечается, что дегидратация – это только один из возможных механизмов, приводящих к просветлению биотканей. Проведение исследований в этой области открывает путь к пониманию сути процессов оптического просветления на молекулярном уровне, что в свою очередь позволит применять новые эффективные просветляющие агенты с заданными свойствами.

Данная работа является продолжением изучения авторами молекулярного механизма оптического просветления биотканей. В работе [21] методом классической молекулярной динамики проведено исследование взаимодействия иммерсионного агента глицерина с миметическим пептидом коллагена ((GPH)<sub>9</sub>)<sub>3</sub> и фрагментом микрофибриллы 5((GPH)<sub>12</sub>)<sub>3</sub>. Проанализировано изменение геометрических параметров  $\alpha$ -цепей коллагена при различных концентрациях водного раствора глицерина. Показано, что эти изменения не линейно зависят от концентрации и имеют максимум, что хорошо коррелирует с экспериментальными данными по эффективности оптического просветления кожи человека. Высказано предположение о причине снижения эффективности оптического просветления кожи при высоких концентрациях иммерсионного агента.

В работах [22-24] методами классической молекулярной динамики, молекулярного докинга и квантовой химии (PM6 и DFT/B3LYP) проведены исследования взаимодействия шести просветляющих биологические ткани иммерсионных агентов (1,2 и 1,3-пропандиол, этиленгликоль, глицерол, ксилитол и сорбитол) с миметическими пептидом коллагена (GPH)<sub>3</sub>. Установлены корреляции между потенциалом оптического просветления и такими параметрами межмолекулярных взаимодействий, как время нахождения агентов в водородосвязанном состоянии, относительная вероятность образования двойных водородных связей и энергия образования комплексов. Используя установленную корреляцию, предсказано численное значение потенциала оптического просветления молекулы декстрозы для кожи крысы, которое хорошо согласуется с экспериментальными данными. Дано объяснение незначительного изменения потенциала оптического просветления при переходе от моносахаридов к дисахаридам. Предложен молекулярный механизм последиффузионной стадии оптического просветления биотканей.

В рамках настоящей работы проводится дальнейшее изучение корреляции между эффективностью оптического просветления биологической ткани и энергией образования комплексов между просветляющими иммерсионными агентами с миметическими пептидом коллагена. В качестве иммерсионных агентов использовались ряд моносахаров: рибоза, глюкоза и фруктоза.

#### **МЕТОДИКА И РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА**

Для исследования оптического просветления кожи в работе использовались водные растворы (60%) следующих иммерсионных агентов: ряда моносахаров (рибоза, глюкоза и фруктоза), а также, для сравнения, трехатомный спирт - глицерол. Оптическая когерентная томография (ОКТ) использовалась для оценки влияния просветляющих свойств иммерсионных

жидкостей на кожу в экспериментах *in vivo*. Визуализация проводилась с помощью оптического когерентного томографа Thorlabs OCP930SR (Thorlabs, США) со следующими параметрами: центральная длина волны излучения  $930 \pm 5$  нм, аксиальное и латеральное разрешение 6.2 и 9.6 мкм соответственно (на воздухе), длина области сканирования 2 мм.

Измерения проводились на участке кожи с внутренней стороны предплечья. Запись сканов с исследуемой области проводилась до воздействия иммерсионных агентов, затем с интервалом в 1 минуту во время действия агентов на протяжении 40 минут. В измерениях участвовало 4 добровольца, было проведено по 5 экспериментов для каждого иммерсионного агента.

На основе модели однократного рассеяния [25-26] по наклону ОКТ-сканов оценивался коэффициент ослабления  $\mu_t$  [27]. В соответствии с моделью однократного рассеяния мощность регистрируемого ОКТ-сигнала  $R(z)$  пропорциональна  $\exp(-\mu_t z)$  [28]. Поскольку в исследуемом спектральном диапазоне коэффициент поглощения  $\mu_a$  кожи много меньше коэффициента рассеяния  $\mu_s$  [1], то коэффициент ослабления  $\mu_t = \mu_s + \mu_a$  можно считать приблизительно равным коэффициенту рассеяния, поэтому величина  $R(z)$  может быть аппроксимирована выражением:  $R(z) = A \exp(-\mu_s z) + B$ , где  $A$  – коэффициент пропорциональности, равный  $P_0 \cdot a(z)$ ;  $P_0$  – оптическая мощность в пучке, падающем на поверхность биоткани;  $a(z)$  определяется локальной способностью биоткани рассеивать свет назад, которая зависит от локальной вариации показателя преломления;  $B$  – фоновый сигнал. Подбор коэффициентов в приведенном выше выражении для аппроксимации экспериментальной кривой позволяет оценить усреднённый по глубине (эффективный) коэффициент рассеяния света образцом ткани.

На рис.1 представлены анализируемые области ОКТ изображения, а также усреднённый А-скан ОКТ-сигнала дермального слоя кожи человека *in vivo* (через 5 минут после нанесения на поверхность 60% раствора рибозы) и аппроксимирующая кривая, построенная с использованием модели однократного рассеяния. ОКТ-сигналы усреднялись по А-скану на всей области сканирования. Значения коэффициента рассеяния определялись на участке усреднённого А-скана на глубине от 350 до 700 мкм.

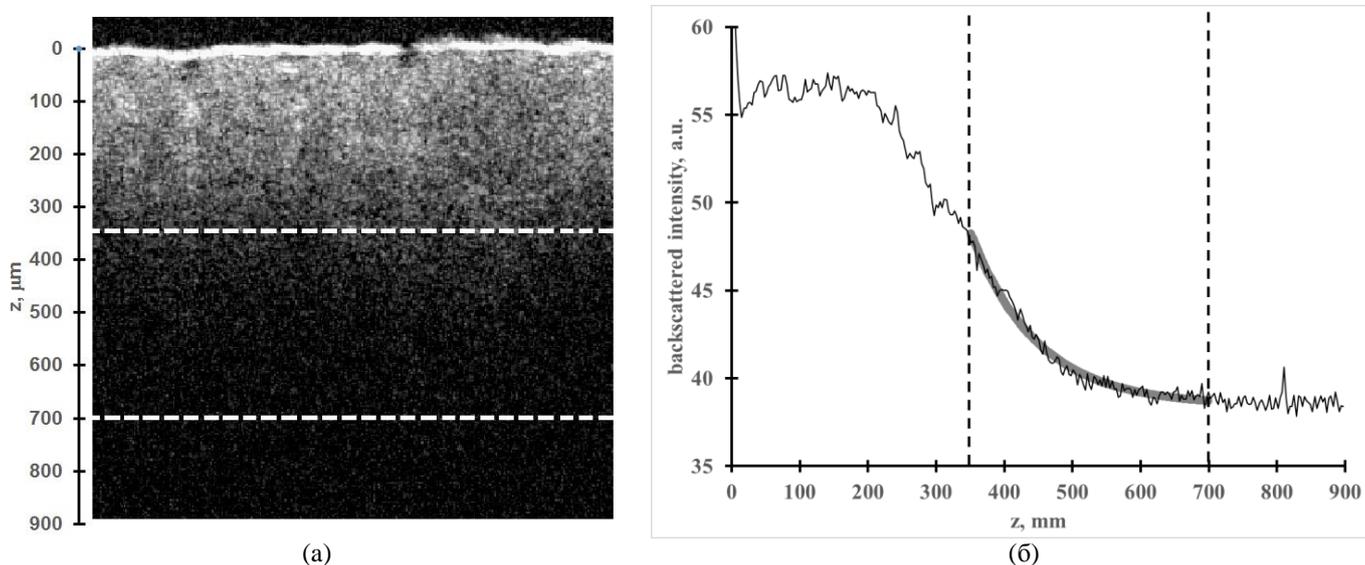


Рис.1. Измерения коэффициента рассеяния  $\mu_s$  на участке дермы с глубиной от 350 до 700 мкм на основе анализа распределения усреднённого ОКТ-сигнала по глубине с помощью модели однократного рассеяния; (а) – фрагмент В-скана кожи *in vivo*, по которому проводилось усреднение ОКТ-сигнала, (б) – распределение усреднённого ОКТ-сигнала по глубине (тонкая кривая) и результат аппроксимации согласно модели однократного рассеяния (толстая кривая).

Штриховыми прямыми обозначены границы участков, на которых оценивалось значение  $\mu_s$ .

В рамках данной работы для оценки эффективности оптического просветления кожи человека *in vivo* определялись значения коэффициента рассеяния света, полученные с помощью усреднённого ОКТ А-скана на участке дермы глубиной от 350 до 700 мкм. Временные зависимости полученных коэффициентов рассеяния света при воздействии на кожу 60% водных растворов трех моносахаров и одного трехатомного спирта глицерола представлены на рис.2.

В качестве численного выражения эффективности оптического просветления кожи были использованы значения модуля средней скорости изменения коэффициента рассеяния на временном отрезке от 5 до 35 минут. Эти скорости представлены на графике в виде значения наклона в уравнениях линии регрессии.

#### МЕТОДИКА И РЕЗУЛЬТАТЫ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В качестве молекулярной модели коллагена, как в предыдущих работах [21-24] был использован миметический пептид коллагена  $(GPH)_3$  [29], составляющего основу большей части регулярных доменов коллагена человека. Такие относительно небольшие синтетические пептиды часто используются для молекулярного моделирования коллагенов. Трехмерная модель пептида строилась по данным из Protein Data Bank (PDB) с последующим добавлением атомов водорода и оптимизации структуры методом молекулярной механики [30]. В качестве иммерсионных просветляющих агентов нами были рассмотрены ряд моносахаров (рибоза, глюкоза и фруктоза). Молекулярное моделирование взаимодействия просветляющих агентов с коллагеном проводилось в два этапа.

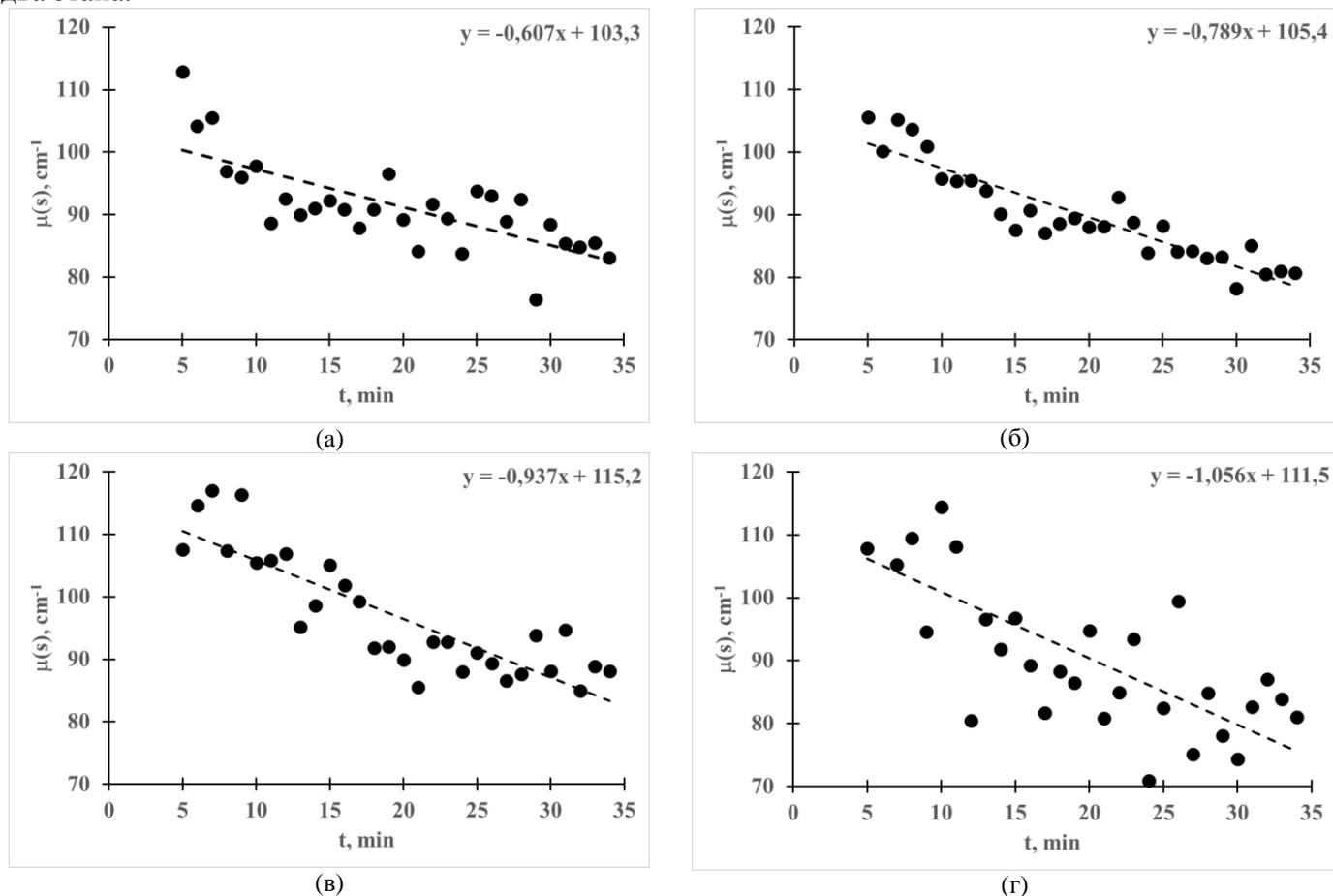


Рис.2. Зависимость величины коэффициента рассеяния  $\mu$ , на участке дермы с глубиной от 350 до 700 мкм на основе анализа распределения усреднённого ОКТ-сигнала по глубине с помощью модели однократного рассеяния от времени действия иммерсионных агентов: (а) – глицерола, (б) – рибозы, (в) – глюкозы и (г) – фруктозы.

На первом этапе, методом DFT/B3LYP/6 - 311+G(d,p) [31,32] с использованием программы Gaussian [33] были определены и рассчитаны все самые низкоэнергетические конформеры рассматриваемых сахаров в изолированном состоянии. Вычисленные геометрические параметры и значения зарядов на атомах по Малликену в дальнейшем использовались при моделировании этих систем в рамках классической молекулярной динамики. Также были вычислены и волновые числа колебательных переходов, которые оказались положительными, что дополнительно свидетельствует о нахождении молекулярных систем в локальных минимумах. Пространственные конфигурации самых низкоэнергетических конформеров некоторых просветляющих агентов показаны на рис.3а и 3б.

На втором этапе для оценки энергии межмолекулярного взаимодействия выбранных просветляющих агентов с коллагеном был использован минимальный фрагмент миметического пептида, сохраняющий регулярную структуру –  $((GPH)_3)_2$  состоящий из 231 атома, структура

которого предварительно оптимизировалась в рамках полуэмпирического метода PM6 [34]. Полученная пространственная структура показана на рис.3в. Как видно из рис.3в посадочный молекулярный карман представляет собой участок пептида размером приблизительно 10 на 12 Å, в котором имеются четыре доступные для межмолекулярного связывания функциональные группы: две карбонильные (одна на остатке глицина - 2, другая на остатке гидроксипролина -3 одной и тоже α-цепи) и две спиртовые -1 и 4 на остатках гидроксипролинов различных α-цепей. Эта оптимизированная структура модели коллагена использовалась для проведения молекулярного докинга с просветляющими агентами в рамках программы AutoDockVina [35].

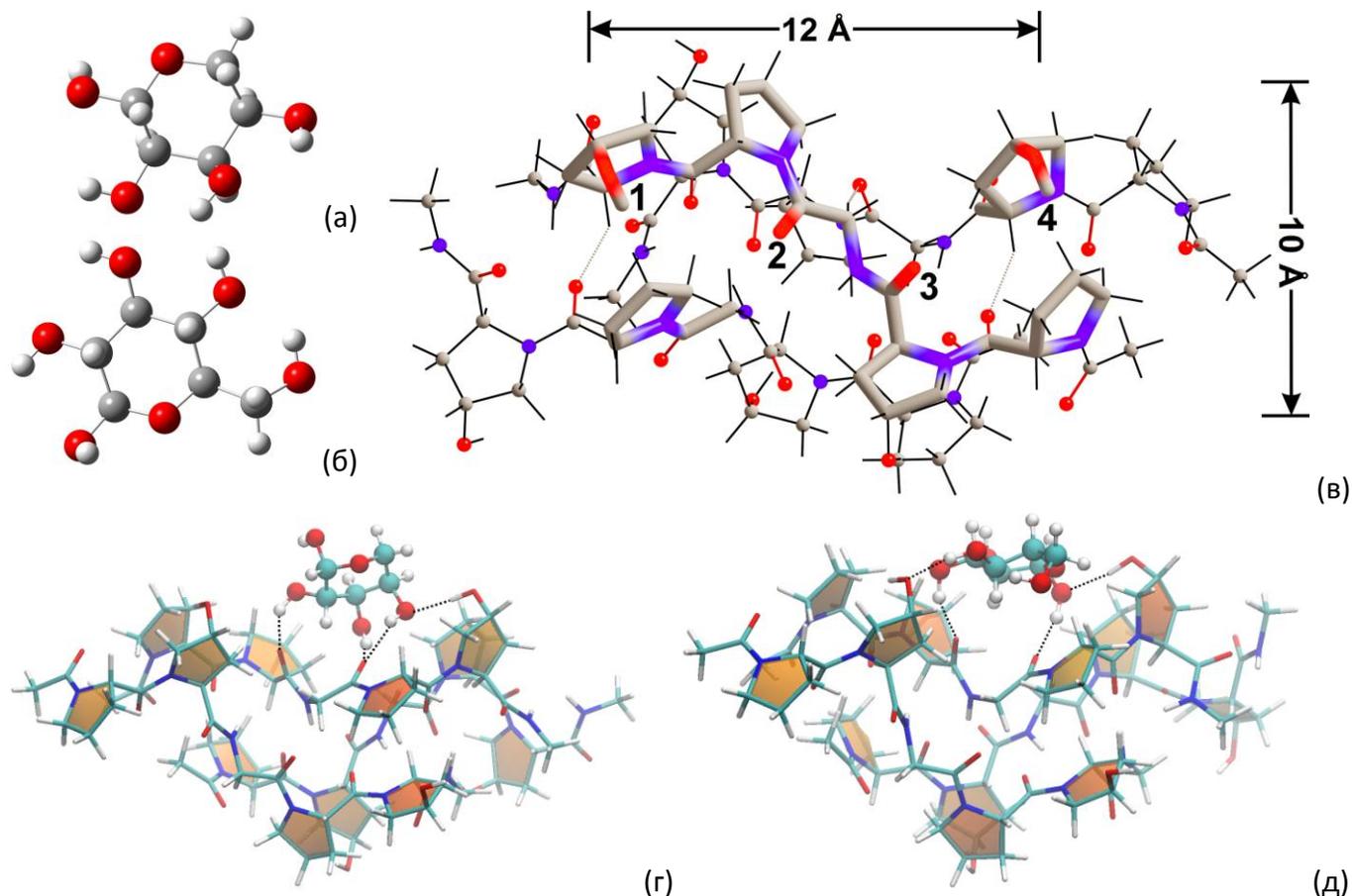


Рис.3. Пространственные конфигурации: (а, б) - самых низкоэнергетических конформеров некоторых просветляющих агентов (рибазы и глюкозы); (в) - фрагмента миметического пептида – ((GPH)<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, оптимизированная в рамках полуэмпирического метода PM6 (цифрами обозначены молекулярные группы, участвующие в образовании водородных связей с просветляющими агентами); (г, д) - водородосвязанных комплексов, образованных фрагментом коллагена ((GPH)<sub>3</sub>)<sub>2</sub> и представленными выше иммерсионными просветляющими агентами. Пунктирными линиями на рисунке показаны водородные связи

После проведения молекулярного докинга для каждой взаимодействующей системы выбирались первые пять наиболее выгодных конфигураций, которые далее оптимизировались полуэмпирическим методом PM6. Затем путем проведения однократной SCF процедуры методом DFT/B3LYP/6 - 31G(d) вычислялись полная электронная энергия комплексов. Аналогичная процедура была использована для получения значений полной электронной энергии просветляющих агентов и пептидного фрагмента. Энергия межмолекулярного взаимодействия рассчитывалась, как разница полных энергий комплекса и суммы энергий отдельных его составляющих. Для установления корреляции с эффективностью оптического просветления были выбраны наибольшие значения энергий межмолекулярного взаимодействия, соответствующие наиболее вероятным структурам комплексов. На рис.3 (г,д) показано полученное в рамках метода PM6 пространственное строение водородосвязанных комплексов, образованных фрагментами коллагена ((GPH)<sub>3</sub>)<sub>2</sub> и некоторыми просветляющими агентами.

#### ОБСУЖДЕНИЕ И ВЫВОДЫ

Для удобства обсуждения полученных результатов в табл. 1 сведены количественные параметры межмолекулярных взаимодействий (значения длин классических водородных связей,

образованных согласно расчету между активными группами молекулярного кармана коллагена и гидроксильными группами просветляющих агентов, и вычисленные значения энергий межмолекулярных взаимодействий), а также экспериментально полученные с помощью ОКТ значения модуля средней скорости изменения коэффициента рассеяния.

**Таблица 1.**

Длины водородных связей (в ангстремах), энергии межмолекулярных взаимодействий в (кДж/моль) между фрагмента коллагена (GPH)<sub>3</sub> и различными просветляющими агентами, рассчитанные методом PM6/3LYP/6-31G(d), а также экспериментальные значения скорости оптического просветления.

Тип агента	Длины водородных связей	$\Delta E$	Эффективность оптического просветления кожи
глицерол	1.74; 1.91; 1.92; 1.93; 2.44	-42.8	0.607
рибоза	1.84; 1.90; 1.91; 1.95	-80.9	0.789
глюкоза	1.68; 1.71; 1.84; 1.94	-94.5	0.937
фруктоза	1.82; 1.84; 1.90; 1.96; 2.23	-89.2	1.056

Например, как видно из табл.1., молекула трехатомного спирта глицерола образует четыре относительно сильные водородные связи и одну более слабую со всеми активными группами посадочного кармана, однако общей длины молекулы недостаточно, чтобы все водородные связи были максимально эффективными. При переходе от трехатомного спирта глицерола к моносахариду глюкозе наблюдается значительное увеличение эффективности оптического просветления кожи. Это можно объяснить тем, что глюкоза согласно расчета образует более сильные водородные связи с коллагеном, чем глицерол. Из табл.1. видно, что несмотря на меньшее количество образованных водородных связей их длина заметно короче, что и является определяющим фактором для энергии связывания. Как видно из рис.3д более сильные водородные связи с карбонильными группами образуются, как за счет компактной кольцевой структуры глюкозы, которая позволяет ей достаточно низко опуститься в молекулярный карман коллагена, так и за счет хорошего взаимного расположения взаимодействующих групп.

Для оценки степени (эффективности) оптического просветления иммерсионными агентами разными авторами используются различные параметры. Так, например, в [1] для этого используется потенциал оптического просветления, который вводится как наклон зависимости приведенного коэффициента рассеяния после 45 мин действия иммерсионного агента от его концентрации, выраженному в молях. Т.е. для его определения требуется исследовать действие иммерсионных агентов с различными начальными концентрациями.

В рамках данной работы в качестве численного выражения эффективности оптического просветления кожи были использованы значения модуля средней скорости изменения коэффициента рассеяния при воздействии водного раствора иммерсионного агента средней концентрации. Из рис. 4 видно, что оба этих параметра хорошо коррелируют между собой. Это позволяет нам использовать в дальнейших исследованиях значение скорости просветления как способ оценки эффективности оптического просветления иммерсионными агентами.

Также из рис.4. видно, что рассчитанные методом PM6/3LYP/6-31G энергии взаимодействия молекулы пептида коллагена с молекулами различных просветляющих агентов (значения для спиртов взяты из [22]) хорошо коррелирует как с величиной потенциала оптического просветления кожи крысы и человека [1] так и с экспериментально полученными в рамках данной работы значениями скорости изменения коэффициента рассеяния кожи человека.

Это позволяет говорить о принципиальной важности последиффузионного этапа, в котором происходит взаимодействие коллагена с просветляющими агентами и его влияние на оптическое просветление биотканей. Результаты исследования позволяют говорить о том, что в процессе такого взаимодействия происходит частичное замещение связанной с коллагеном воды. Это приводит к нарушению связующей сетки водородных связей и как следствие к обратимому процессу растворения коллагеновых фибрилл, что в свою очередь уменьшает их показатель преломления и выравнивает его с межколлагеновой средой. Чем выше сродство просветляющего агента к коллагену, тем эффективнее идет этот процесс.

Следующим принципиальным шагом для увеличения эффективности взаимодействия может быть подбор молекулярного агента с такими структурными характеристиками, которые позволяли бы ему взаимодействовать сразу с двумя или более молекулярными карманами коллагена. Таким

эффективным просветляющим агентом может служить молекулярная система полимерного типа, состоящая, например, из шестичленных моносахаридов, соединенных подвижной углеродно-кислородной цепочкой такой длины, чтобы насыщенные кольца сахара попадали в области молекулярных карманов коллагена и взаимодействовали с ними посредством своих гидроксильных групп. Следует заметить, что значительное увеличение размера молекул, используемых в качестве просветляющих агентов, приведет к увеличению вязкости вещества и как следствие к уменьшению коэффициента диффузии его в биоткани, а также к увеличению времени его вымывания из биотканей.

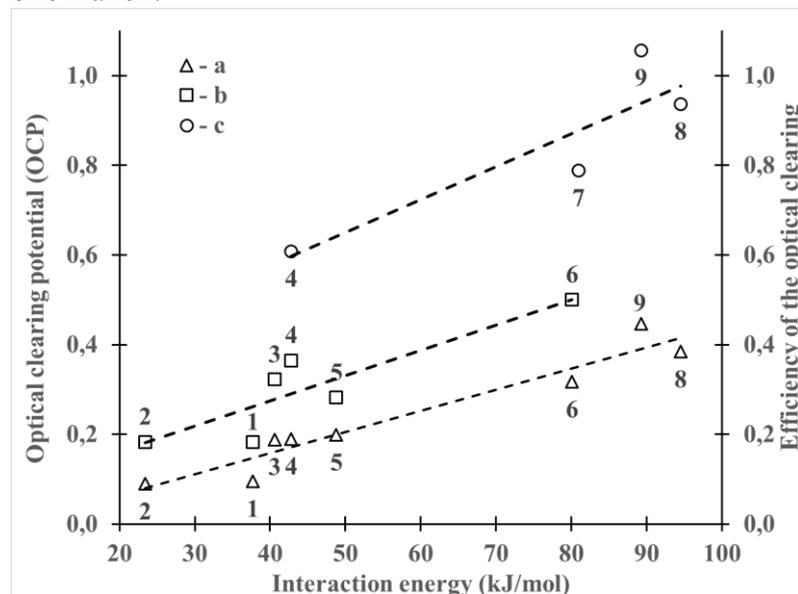


Рис.4. Зависимость величины потенциала оптического просветления (ось слева) кожи крысы (а) и человека (b) [1], а также величины эффективности оптического просветления (ось справа) кожи человека (с) от энергии взаимодействия молекулы пептида коллагена с молекулами просветляющих агентов. Цифрами на графиках обозначены иммерсионные агенты: 1 - этиленгликоль; 2 - 1,2-пропандиол; 3 - 1,3-пропандиол; 4 - глицерол; 5 - ксилитол; 6 - сорбитол; 7 - рибоза; 8 - глюкоза и 9 - фруктоза.

*Авторы выражают благодарность Гениной Э.А. за помощь в проведении экспериментов.*

*Работа была частично поддержана грантами РФФИ: № 18-52-16025 а, 18-07-01228 а и при финансовой поддержке в рамках государственных заданий высшим учебным заведениям и научным организациям в сфере научной деятельности, полученных от Минобрнауки, №: 3.9128.2017/БЧ.*

#### Литература

- Hirshburg J.M. Chemical agent induced reduction of skin light scattering: doctoral dissertation. / Texas A&M University, 2009
- Tuchin V. V. Handbook of Optical Sensing of Glucose in Biological Fluids and Tissues / V.V. Tuchin. - Taylor & Francis Group LLC, CRC Press, 2009
- Tuchin V. V. Optical Clearing of Tissues and Blood. / PM 154, SPIE Press, Bellingham, WA, 2006
- Zhu D., Larin K.V., Luo Q. et al. // Laser Photonics Rev. 2013. V. 7. № 5. P. 732
- Genina E.A., Bashkatov A.N., Sinichkin Yu.P. et al. // J. Biomed. Photonics & Eng. 2015. V. 1. № 1. P. 22-58
- Генина Э.А., Башкатов А.Н., Кочубей В.И. и др. // Оптика и спектроскопия 2005. Т. 98. № 3. С. 515-521
- Генина Э.А., Башкатов А.Н., Синичкин Ю.П. и др. // Квантовая электроника 2006. Т. 36. № 12. С. 1119-1124
- Bashkatov A.N., Korolevich A.N., Tuchin V.V. et al. // Asian Journal of Physics 2006. V. 15. № 1. P. 1-14
- Genina E.A., Bashkatov A.N., Tuchin V.V. // Adv. Optical Technologies 2008. V. 2008. Article ID 267867
- Bashkatov A.N., Genina E.A., Tuchin V.V. et al. // Laser Physics 2009. V. 19. № 6. P. 1312-1322
- Wen X., Tuchin V.V., Luo Q. et al. // Phys. Med. Biol. 2009. V. 54. № 22. P. 6917-6930
- Sudheendran N., Mohamed M., Ghosn M.G. et al. // J. Innovative Optical Health Sciences 2010. V. 3. № 3. P. 169-176
- Wen X., Jacques S.L., Tuchin V.V. et al. // J. Biomed. Opt. 2012. V. 17. № 6. P. 066022.
- Simonenko G.V., Kirillova E.S., Tuchin V.V. // Optical Memory & Neural Networks 2009 V. 18. № 2. P. 12-15
- Ларин К.В., Тучин В.В. // Квантовая электроника 2008. Т. 38. № 6. С. 551-556
- Tuchina D.K., Shi R., Bashkatov A.N. et al. // J. Biophotonics 2015. V. 8. № 4. P. 332-346
- Wen X., Mao Z., Han Z. et al. // J. Biophotonics 2010. V. 3. № 1-2. P. 44-52
- Hirshburg J.M., Ravikumar K.M., Hwang W. et al. // J. Biomed. Opt. 2010. V. 15. № 5. P. 055002
- Feng W., Shi R., Ma N. et al. // J. Biomed. Opt. 2016. V. 21. № 8. P. 081207
- Yu T., Wen X., Tuchin V.V. et al. // J. Biomed. Opt. 2011. V. 16. № 9. P. 095002
- Dvoretzky K.N., Berezin K.V., Chernavina M.L. et al. // Proc. SPIE 2018. V. 10716. P. 1071624
- Berezin K.V., Dvoretzky K.N., Chernavina M.L. et al. // J. Mol. Modeling 2018. V. 24. № 2. P. 45
- Berezin K.V., Dvoretzky K.N., Chernavina M.L. et al. // Proc. SPIE 2017. V. 10336. P. 103360J.
- Bashkatov A.N., Berezin K.V., Dvoretzkiy K.N. et al. // J. of Biomed. Opt. 2018. V. 23. № 9. P. 091416.

25. Faber D.J., van der Meer F.J., Aalders M.C.G. et al. // Opt. Express 2004. V. 12. № 19. P. 4353
26. Lee P., Gao W., Zhang X. // Appl. Opt. 2010. V. 49. № 18. P. 3538
27. Genina E.A., Bashkatov A.N., Kolesnikova E.A. et al. // J. Biomed. Opt. 2014. V. 19. № 2. P. 021109
28. Wang R.K., Tuchin V.V. in Handbook of Coherent-Domain Optical Methods. Biomedical Diagnostics, Environmental Monitoring, and Material Science. / Tuchin V.V. - Springer, 2013, v. 2. p. 665.
29. Okuyama K., Miyama K., Mizuno K. et al. // Biopolymers 2012. V. 97. № 8. P. 607-616
30. Cornell W.D., Cieplak P., Bayly C.I. et al. // J. Am. Chem. Soc. 1995. V. 117. № 19. P. 5179-5197
31. Becke A.D. // J. Chem. Phys. 1993. V. 98. № 7. P. 5648-5652
32. Lee C., Yang W., Parr R.G. // Phys. Rev. 1988. V. 37B. № 2. P. 785-789
33. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian09, Revision A.02. Pittsburgh PA: Gaussian, Inc., 2009
34. Van der Spoel D., Lindahl E., Hess B. et al. // J. Comput. Chem. 2005. V. 26. № 16. P. 1701-1718
35. Duan Y., Wu C., Chowdhury Sh. et al. // J. Comp. Chem. 2003. V. 24. № 16. P. 1999-2012.

## **ЭФФЕКТ ДЕЙСТВИЯ СВЕТА НА ВИДОВОЙ СОСТАВ МИКРООРГАНИЗМОВ В СИСТЕМЕ ПАЗАРИТ (*AULACIDEA HIERACII* BOUCHE, 1834) – СУПЕРПАЗАРИТ (*EURYTOMA CYNIPSEA* ВОHEMAN, 1836)**

М.И. Никельшпарг, Е.В. Глинская, В.В. Аникин

*Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского*

Выполненные микробиологические исследования сложной экологической системы галл – паразит *Aulacidea hieracii* – суперпаразит *Eurytoma cynipsea* позволили впервые выявить присутствие двух видов грибов *Alternaria alternata* и *Neurospora crassa* и двух видов бактерий *Bacillus pumilus* и *Corynebacterium variabile*, наличие и численность которых изменяются при экспозиции в условиях дневного освещения.

Галлообразователь орехотворка *Aulacidea hieracii* (Hymenoptera, Cynipidae) образует галлы на ястребинке могучей *Hieracium robustum* Fr. s. L., 1848. Внутри галлов формируется экосистема, в которой существуют как симбиотические, так и паразитические организмы.

Паразитические отношения в галлах можно наблюдать, например, между *Aulacidea hieracii* и *Eurytoma cynipsea* (Hymenoptera, Chalcidoidea). *Chalcidoidea*), причем эвритомы являются самым многочисленным паразитом орехотворки [1]. Орехотворки зимуют в специальных капсулах, в отличие от паразита, который способен перемещаться по галлу, прогрызая внутри галла ходы и образуя повреждения галла [2].

При визуальном микроскопическом «осмотре» галла авторами было отмечено наличие плесневых грибов в ходах паразита, в капсулах зимующих личинок орехотворок грибной микрофлоры не наблюдалось.

Целью настоящего исследования явилось определение влияния действия света на видовой состав микроорганизмов в личинках орехотворки и эвритомы.

Сформированные галлы, имеющие средний размер 3x2x2 см, были собраны осенью 2017 г. на стеблях ястребинки могучей, произрастающей в поле поселка Юбилейный (Волжский район, г. Саратов). Микробиологические исследования проводили непосредственно после сбора галлов и после экспозиции исследуемых объектов на свету в течение 10 дней.

В результате вскрытия галлов были выделены стенки галла – растительная ткань белого цвета без включений, личинки галлообразователя *Aulacidea hieracii*, личинки суперпаразита *Eurytoma cynipsea*. Личинки и галлы обрабатывали в течение 5 минут в 70% спирте и затем дважды промывали в физиологическом растворе. Каждый исследуемый объект растирали в ступке с физиологическим раствором. По 0,1 мл суспензии высевали на чашки Петри со средой ГРМ и PDA. Далее проводили количественный учет грибов и определение индекса встречаемости отдельных видов (ИВ, %).

Видовая принадлежность микроорганизмов подтверждалась секвенированием штаммов бактерий по 16S рРНК и штаммов грибов по 18S рРНК (ЗАО «Синтол», г. Москва). Результаты микробиологических исследований представлены в таблице.

Выявлено, что доминирующим видом грибов в галлах и личинках орехотворки выступал гриб *Alternaria alternata* (Hyphomycetes, Pleocospogaceae). Численность гриба в объектах, исследуемых непосредственно после сбора галлов, составляла 10 колониеобразующих единиц (КОЕ) в пробе (стенки галла, личинки орехотворки), а индекс встречаемости достигал 40%. В личинках суперпаразита эвритомы плесневые грибы обнаружены не были.

Экспозиция исследуемых объектов на свету в течение 10 дней приводила к увеличению численности гриба *Alternaria alternata* до 30 КОЕ в стенках галла и личинках орехотворки, индекс встречаемости составил 40%. Из личинок эвритомы после их 10-дневной экспозиции на свету выделены грибы *Alternaria alternata* (численность 30 КОЕ, индекс встречаемости 40%) и *Neurospora crassa* (Sordariomycetes, Sordariaceae) (численность 10 КОЕ, индекс встречаемости 60%).

**Таблица.**  
Видовой состав бактерий и грибов в системе паразит *Aulacidea hieracii* – суперпаразит *Eurytoma cynipsea*

Виды микроорганизмов	Галлы		Галлы, экспозиция на свету		Личинки орехотворки		Личинки орехотворки, экспозиция на свету		Личинки эвритомы		Личинки эвритомы, экспозиция на свету	
	КОЕ	ИВ	КОЕ	ИВ	КОЕ	ИВ	КОЕ	ИВ	КОЕ	ИВ	КОЕ	ИВ
<i>Alternaria alternata</i>	10	40	30	40	10	40	30	40	-	-	30	40
<i>Neurospora crassa</i>	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	10	60
<i>Bacillus pumilus</i>	-	-	-	-	20	60	100	100	50	40	50	60
<i>Corynebacterium variabile</i>	-	-	-	-	-	-	-	-	1000	60	1000	60

Анализ видового состава бактерий в микробных ассоциациях системы галл – паразит – суперпаразит показал, что доминирующим видом, обнаруженным в личинках орехотворки и эвритомы, является *Bacillus pumilus*. В личинках орехотворки, исследуемых непосредственно после сбора галлов, численность вида составила 20 КОЕ, индекс встречаемости – 60%, в личинках суперпаразита эвритомы численность достигала 50 КОЕ, индекс встречаемости был ниже и не превышал 40%.

После экспозиции исследуемых объектов на свету в течение 10 дней численность и индекс встречаемости *Bacillus pumilus* в личинках орехотворки значительно увеличились и составили 100 КОЕ и 100% соответственно. Экспозиция личинок эвритомы на свету не приводила к увеличению численности бактерий *Bacillus pumilus*, однако способствовала распространению вида (индекс встречаемости 60%). В личинках суперпаразита *Eurytoma cynipsea* обнаружены бактерии *Corynebacterium variabile* в количестве 1000 КОЕ с индексом встречаемости 60 %, показатели вида не изменялись после экспозиции исследуемых объектов на свету.

Таким образом, микробиологические исследования сложной экологической системы галл – паразит *Aulacidea hieracii* – суперпаразит *Eurytoma cynipsea* позволили впервые выявить присутствие двух видов грибов *Alternaria alternata* и *Neurospora crassa* и двух видов бактерий *Bacillus pumilus* и *Corynebacterium variabile*, наличие и численность которых изменяются при экспозиции в условиях дневного освещения.

*Alternaria alternata* – широко распространенный гриб, способный как к сапротрофному, так и паразитическому существованию. *A. alternata* является фитопатогеном, возбудителем опасного заболевания альтернариоза многих видов культурных растений [3]. *Alternaria alternata* также известен как активный аллергизирующий агент [4, 5] (Глушко и др., 2014; Гальвидис, 2017).

*Neurospora crassa* – оранжевая хлебная плесень, широко распространенный почвенный плесневый гриб [6].

Бактерий *Bacillus pumilus* и *Corynebacterium variabile* являются широко распространенными в окружающей среде сапрофитическими микроорганизмами [7].

#### Литература

1. Аникин В.В., Никельшпарг М.И., Никельшпарг Э.И. и др. // Энтомологические и паразитологические исследования в Поволжье. 2018. Вып. 15. С. 82–88
2. Никельшпарг М.И., Аникин В.В., Воронин М.Ю. // Бюллетень ботанического сада Саратовского государственного университета. 2018. Т. 16. Вып. 1. С. 60-66
3. Кокаева Л.Ю., Кудрявцева Н.Н., Побединская М.А. и др. // Защита картофеля. 2015. №1. С. 14-18.

4. Глушко Н.И., Халдеева Н.В., Лисовская С.А. и др. // Успехи медицинской микологии. 2014. Т. 12. С. 24–26.
5. Гальвидис И.А. // Медицинская иммунология. 2017. Т. 19. С. 123.
6. Соколовский В.Ю., Белозерская Т.А. // Успехи биологической химии. 2000. Т. 40. С. 85–152.
7. Определитель бактерий Берджи // Под ред.: Дж. Хаулта, Н. Крига, П. Снита и др.; Пер. с англ. под ред. Г.А. Заварзина. М.: Мир, 1997.

**ХРАНЕНИЕ ВОДОРОДА С ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТЬЮ В 2D-МАТРИЦЕ ИЗ ГРАФЕНОВЫХ НАНОБЛИСТЕРОВ**

О.Е. Глухова, П.В. Барков, М.М. Слепченков

*Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского*

Впервые исследована механическая устойчивость нового наноматериала – 2D-матрицы из наноразмерных ячеек в виде монослойной графеновой подложки и блистера из монослоя графена. Показано, что подобные матрицы являются механически устойчивыми и перспективными для экологически чистых технологий. Рассчитанные поля атомных локальных напряжений демонстрируют, что даже при наличии дефектов в атомной сетке блистера (Стоуна-Уэлса – SW, двойной вакансии – 2V, ad-dimer – AD, и их сочетание) атомный каркас в большинстве случаев не разрушается. Однако, установлено, что наличие одного и более SW-дефектов приводят к появлению критических напряжений, которые при повышении температуры или внешнего давления могут спровоцировать локальные разрывы связей атомной сетки. Выявлено, что при 77К и нормальном давлении блистер может хранить водород, максимальная плотность которого может достигать 6.86 Wt% для 1158 m<sup>2</sup>/g.

**ВВЕДЕНИЕ**

В настоящее время в рамках мировой индустрии наносистем и материалов решается целый ряд актуальных научно-технологических задач, одной из которых является разработка прорывных энергосберегающих технологий, используемых в различных прикладных сферах. В частности, для экологически чистых технологий очень актуальной является задача хранения водорода с высокой плотностью. Прогнозируется, что потенциальными сферами ее применения могут стать создание экологических автомобилей с топливными элементами нового поколения, а также водородная энергетика. Среди разнообразных углеродных низкоразмерных материалов, рассматриваемых в качестве перспективных систем хранения водорода, предпочтение отдается 2D-структурам, в частности графену и его производным, по причине их высокой прочности и адгезионной способности. В частности, в последнее несколько лет интенсивно развивается направление, посвященное экспериментальным и теоретическим исследованиям графеновых наноблистеров. Блистерные структуры представляют собой графеновый слой с ярко выраженными одним или несколькими "островками" неправильной формы, формирующимися в атомной сетке графена. Структуры такого типа образуются на поверхности высоко ориентированного пиролитического графита или эпитаксиального графена при их обработке атомарным газообразным водородом [1-3].

Появление наноблистеров как новой аллотропной формы графена, в первую очередь, было направлено на повышение его адгезивных свойств. В частности, проведены экспериментальные и теоретические исследования адгезии графеновых мембран на подложках из диоксида кремния [4] и графита [5]. Активно ведутся разработки новых наноустройств на основе графеновых блистеров. Целью данной работы является влияние дефектов каркаса блистера на его механическую устойчивость и выявление максимально возможной концентрации водорода, хранимого блистером при нормальном давлении и низких значениях температуры.

**АТОМИСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ**

Для изучения графенового блистера с высокой плотностью упаковки построена атомистическая супер-ячейка, представляющая собой монослойный графен (в качестве подложки) с блистером из монослоя графена. Блистер представляет собой выпуклый монослой.

Атомная структура супер-ячейки была построена в два этапа. На первом этапе был применен эмпирический потенциал AIREBO [6] и метод молекулярной динамики при температуре 70-90К и нормальном давлении. Использовался термостат Нозе-Гувера [7]. Интегрирование уравнений движений проводилось с помощью алгоритма Верле. Использовался открытый источник KVAZAR [8]. На втором этапе атомная структура супер-ячейки уточнялась методом DFTB с использованием пакета DFTB+. При построении модели использовались данные натурального эксперимента, описанного в работе [9].

**МЕХАНИЧЕСКАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ АТОМНОЙ СЕТКИ БЛИСТЕРА С ДЕФЕКТАМИ**

Поскольку в процессе синтеза графеновых модификаций всегда образуются и дефекты в атомной сетке, они могут провоцировать появление нанотрещин в виде разрывов С-С связей. Были исследованы случаи присутствия в структуре блистера однопольных и комбинированных дефектов вида Стоуна-Уэлса (SW-дефект), двойной вакансии (2V-дефект) и Ad-dimer дефект (AD-дефект).

Для этого в атомную сетку вводятся соответствующие дефекты и далее структура блистера реоптимизируется методом DFTB. В итоге атомная сетка релаксирует так, что энергия блистера снова становится минимальной, отвечающей равновесной конфигурации. Исследование распределения локальных атомных напряжений проводилось с помощью ранее разработанной методики, основанной на энергетическом подходе [10]. Картины поля локальных атомных напряжений при различных дефектах показаны на рисунке 1. Карты напряжений показывают распределение напряжения по атомам сетки блистера. Появление дефектов приводит к повышению напряжения не только на вершине блистера, но и в других локальных областях. Повышение напряжения вблизи отдельных атомов говорит также о том, что эти атомы наиболее химически активны. Таким образом, наиболее искривленные локальные области будут эффективнее адсорбировать атомы водорода, кислорода и другие.

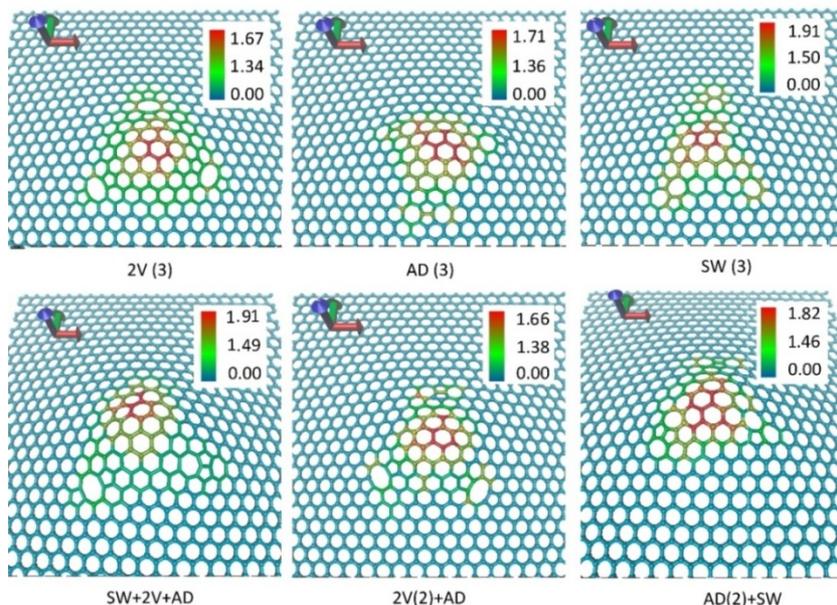


Рис. 1. Карты локального атомного напряжения.

## ХРАНЕНИЕ ВОДОРОДА С ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТЬЮ С ПОМОЩЬЮ ГРАФЕНОВЫХ БЛИСТЕРОВ

Далее был исследован процесс заполнения блистера атомарным водородом при нормальном давлении и 70-90 К. На первом этапе применялся метод AIREBO и метод молекулярной динамики, а затем для уточнения конфигурации супер-ячейки использовался метод DFTB. Средняя температура в процессе формирования структуры водородной массы в блистере составляла 77 К.

Концентрация атомов водорода увеличивалась в блистере постепенно следующим образом: 1) полость блистера заполнялась определенным небольшим количеством атомарного водорода; 2) проводилась реоптимизация супер-ячейки; 3) определялось оставшееся в блистере количество водорода, его состояние и распределение в блистере. Далее эта процедура из трех этапов повторялась для большего количества атомарного водорода. Пример заполнения водородом блистера показан рис.2а для концентрации 4.17 Wt% (водород отмечен синим цветом). На этом рисунке представлены два вида 2D-структуры: слева – в перспективе; справа – сверху. Если на начальном этапе внутри полости блистера было расположено хаотично 1200 атомов, после процесса молекулярно-динамической оптимизации осталось 768 атомов. Остальная часть атомов элиминировала сквозь атомный каркас блистера. Анализ распределения водорода показал, что водород сосредоточен преимущественно в центре блистера, в периферийной части (где расстояние между блистером и подложкой 3.2–3.4 Å) находятся всего 1.56 %. Это водород в атомарном виде, когда атомы образовали химические связи с подложкой и блистером. При этом остальная часть водорода перешла в молекулярную фазу, что можно увидеть и на рис.2а.

Далее, как было выше описано, количество атомов водорода в блистере увеличивалось до достижения максимальной плотности. Для данных размеров (5.5 x 6.6 нм) супер-ячейки и высоты блистера (0.9 нм) максимальная плотность водорода составила 6.86 Wt% при поверхностной

плотности  $0.8632 \text{ mg/m}^2$  ( $1158 \text{ m}^2/\text{g}$ ). Плотность водорода  $\sim 5 \text{ Wt\%}$  была достигнута в [11], при той же температуре  $77\text{K}$  наблюдалась адсорбция при  $0.4347 \text{ mg/m}^2$  ( $2300 \text{ m}^2/\text{g}$ ). На рис. 2б представлен вид блистера с концентрацией водорода  $6.86 \text{ Wt\%}$  (слева – в перспективе, справа – вид сверху). В этом случае количество атомарного водорода составило  $3.13\%$ . Часть его – в периферийной области, часть – под куполом блистера зацепилась за атомы каркаса.

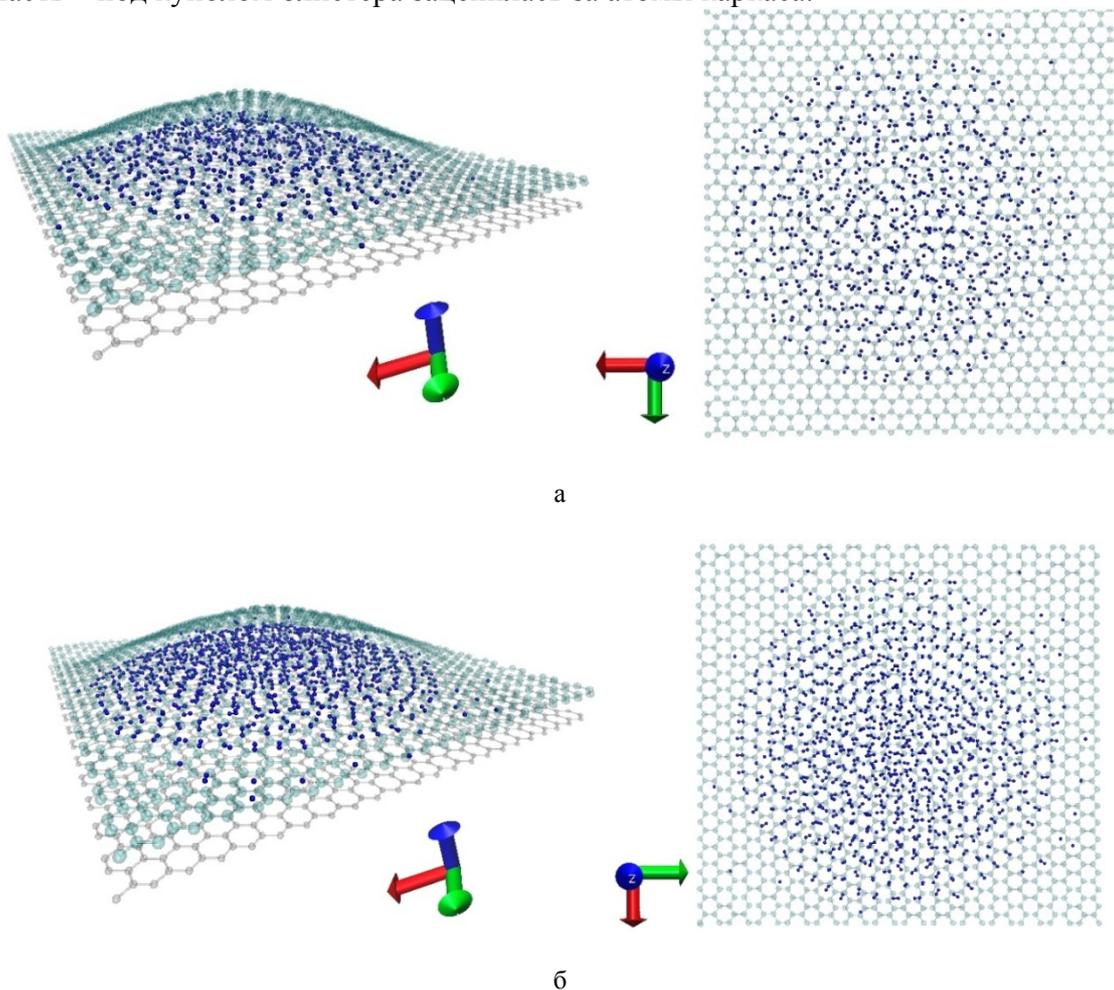


Рис. 2. Хранение водорода графеновым блистером: а) супер-ячейка с  $4.17 \text{ Wt\% H}$ ; б) супер-ячейка с  $6.86 \text{ Wt\% H}$  (атомы и молекулы водорода отмечены синими шариками).

Также исследована закономерность повышения концентрации водорода в зависимости от поверхностной плотности. Обнаружено, что эта закономерность нелинейная, точнее экспоненциальная, как показывает график на рисунке 3.

#### ВЫВОДЫ

Методами молекулярной динамики, AIREBO и квантово-механическим методом DFTB доказано, что атомный каркас блистера сохраняет свою механическую устойчивость даже при наличии дефектов SW, 2V и AD, и их комбинаций. Наименьшее возмущение в распределении атомного локального напряжения атомной сетки блистера создают дефекты 2V и AD. Эти дефекты, независимо от их количества и их сочетания не вызывают критического напряжения в атомной сетке. Они не приведут к разрушению каркаса при небольшом повышении температуры и давления.

Симулирование процесса заполнения блистера атомарным водородом обнаружило следующее: 1) концентрация (Wt%) атомов водорода в блистере растет нелинейно (приблизительно по экспоненциальному закону) с увеличением поверхностной плотности; 2) атомный каркас блистера не разрушается при заполнении его полости водородом, даже при наличии дефектов; 3) при данных размерах блистера предельная плотность атомов водорода составляет  $6.86 \text{ Wt\%}$  для  $1158 \text{ m}^2/\text{g}$  ( $0.8632 \text{ mg/m}^2$ ); 4) в процессе заполнения блистера атомарный водород практически весь становится молекулярным.

Таким образом, подобные 2D-матрицы из графеновых матриц являются крайне перспективными для хранения водорода и его транспортировки.

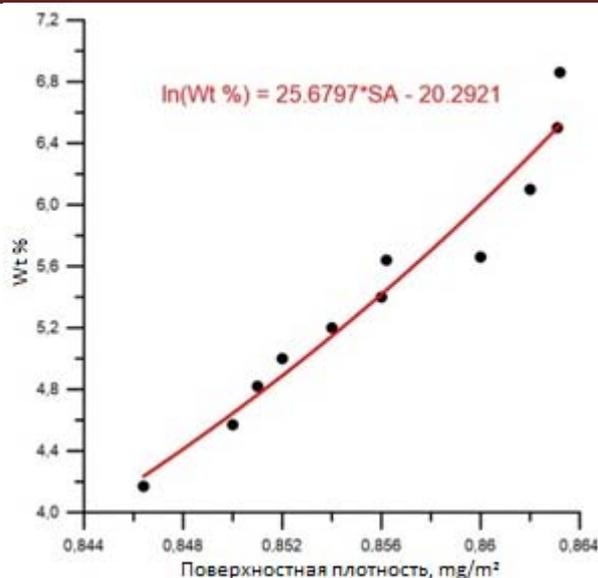


Рис. 3. Зависимость концентрации водорода (Wt%) от поверхностной плотности при температуре 77° К и внешнем давлении 1 бар.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Стипендия Президента РФ молодым ученым и аспирантам №СП-3135.2016.1.*

#### Литература

1. Nechaev Y.S. // J. Nano Res. 2011. V. 15. P. 75-93.
2. Wang P., Liechti K.M., Huang R. // Journal of Applied Mechanics 2016. V. 83. P. 071002.
3. Liao P., Xu P. // Applied Physics A 2015. V. 120. №. 4. P. 1503-1509.
4. Nechaev Y.S. // J. Nano Res. 2011. V. 15. P. 75-93.
5. Wang P., Liechti K.M., Huang R. // Journal of Applied Mechanics 2016. V. 83. P. 071002.
6. Глухова О.Е., Савостьянов Г.В. Вычислительный практикум по моделированию наноструктур в программном комплексе Kvazar [Электронный ресурс]: учебно-методическое пособие для студентов по направлениям подготовки "Радиофизика" и "Конструирование и технология электронных средств" / - Саратов: [б. и.], 2015. - 44 с. - Б. ц.
7. Patra P. K., Bhattacharya B. // The Journal of Chemical Physics 2014. V. 140. P. 064106
8. Глухова О.Е., Колесникова А.С., Савостьянов Г.В. и др. ПО «KVAZAR»-платформа для прогностического моделирования в области нано- и биомедицинских технологий // Саратов: Изд-во «Саратовский источник», 2015. – 247с.
9. Larciprete R., Colonna S., Ronci F. et al. // Nano Lett. 2016. V. 16. № 3. P. 1808–1817
10. Glukhova O.E., Slepchenkov M.M. // Nanoscale. 2012. V. 11. P. 3335-3344
11. Klechikova A.G., Merciera Guillaume, Merinob Pilar et al. // Microporous and Mesoporous Materials 2015. V. 210. P. 46-51

## РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ МНОГОДИАПАЗОННОЙ МИКРОПОЛОСКОВОЙ ФРАКТАЛЬНОЙ АНТЕННЫ

К.А. Саяпин<sup>1,2</sup>, М.М. Слепченков<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>Научно-производственное предприятие «Ника-СВЧ», г. Саратов

В данной работе приводятся результаты исследования микрополосковой антенны на основе фрактала Минковского несимметричной структуры. Проведено численное моделирование предлагаемой антенны. Исследования показали, что данная структура антенны обладает многодиапазонными свойствами в рассматриваемой полосе частот.

### ВВЕДЕНИЕ

Бурное развитие информационных технологий вызывает высокую потребность в новых типах приемо-передающих антенн, обладающих малыми габаритами и широким рабочим диапазоном частот. Микрополосковые антенны, получившие большую популярность благодаря малым массогабаритным параметрам и простоте изготовления, являются узкополосными устройствами, что существенно ограничивает область их применения. Расширить рабочий диапазон частот микрополосковых антенн позволяет использование фрактальных технологий, показавших

свою высокую эффективность как в антенной технике, так и в ряде других областей радиоэлектроники [1].

Фракталы представляют собой геометрические фигуры, обладающие свойством самоподобия [2]. Наиболее известными являются фракталы Коха, Минковского и Серпинского. Исследования [1] электродинамических свойств данных фрактальных структур показали, что они обладают рядом замечательных свойств, позволяющих с успехом использовать их в антенной технике [3-5]. К основным преимуществам антенн, построенных на основе принципов фрактальной геометрии, относятся в первую очередь широко- и многодиапазонность, а также небольшие габариты.

В данной работе приводятся результаты разработки и электродинамического анализа микрополосковой антенны, выполненной на основе несимметричного фрактала Минковского первой итерации, для диапазона частот 4-7 ГГц.

#### СТРУКТУРА МИКРОПОЛОСКОВОЙ АНТЕННЫ

В качестве префрактала использована патч-антенна, геометрические размеры которой получены из следующих соотношений:

$$w = \frac{c}{2f_0} \sqrt{\frac{2}{\varepsilon_r + 1}},$$

$$\varepsilon_{eff} = \frac{\varepsilon_r + 1}{2} + \frac{\varepsilon_r - 1}{2} \left( \frac{1}{\sqrt{1 + 12 \frac{h}{w}}} \right),$$

$$L = \frac{c}{2f_0 \sqrt{\varepsilon_{eff}}} - 0,824h \left( \frac{(\varepsilon_{eff} + 0,3) \left( \frac{w}{h} + 0,264 \right)}{(\varepsilon_{eff} - 0,258) \left( \frac{w}{h} + 0,8 \right)} \right), \quad (1)$$

где  $w$  и  $L$  – соответственно ширина и длина излучающего элемента,  $\varepsilon_{eff}$  – эффективная диэлектрическая проницаемость,  $f_0$  – резонансная частота антенны,  $\varepsilon_r$  – диэлектрическая проницаемость материала подложки,  $h$  – толщина подложки.

Питание антенны производится с помощью подводящей микрополосковой линии передачи, включенной в центральную точку боковой стороны излучающего элемента. Для обеспечения лучшего согласования в точке включения микрополосковой линии выполнен небольшой вырез в излучающей пластине. В качестве подложки антенны задан материал с диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon_r=3,38$  и толщиной  $h=1,5$ .

Частотные характеристики патч-антенны (префрактала), полученные в электродинамическом симуляторе AWR AXIEM [6], приведены на рисунке 2. Максимальное согласование наблюдается в узкой полосе с центральной частотой  $f_0=4,98$  ГГц.

С целью улучшения частотных характеристик во всей рассматриваемой полосе частот выполнен переход от префрактала к фракталу Минковского первой итерации и решена задача параметрической оптимизации с помощью метода Нелдера-Мида в пакете проектирования устройств СВЧ AWR Microwave Office [6]. В качестве варьируемых параметров использованы геометрические размеры фрактала: ширина и длина центрального и периферийных элементов; в качестве цели оптимизации – достижение минимальных обратных потерь и максимального коэффициента усиления антенны во всем диапазоне. Параметры подводящей линии передачи и свойства диэлектрической подложки антенны остались неизменными. Полученная топология

фрактальной антенны приведена на рисунке 1, б. Можно заметить, что структура фрактала стала асимметричной относительно горизонтальной оси. Анализ частотных характеристик (рис. 2) показал, что при переходе к антенне фрактальной структуры число резонансов в рассматриваемой полосе частот увеличилось. Причем три из них обеспечивают обратные потери менее -15 дБ (таблица).

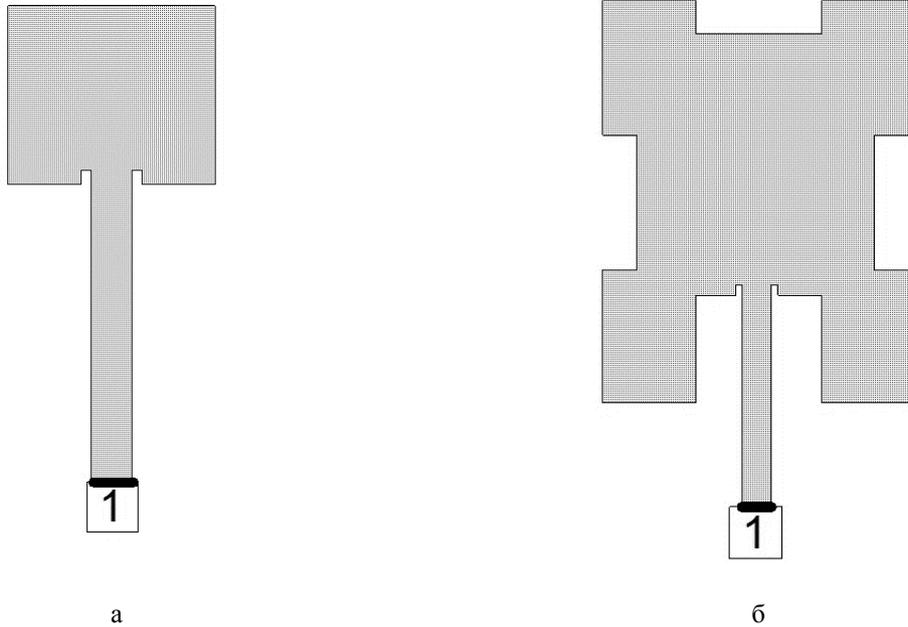


Рис. 1. Структура антенн на основе префрактала (а) и фрактала первой итерации (б)

Таблица 1.

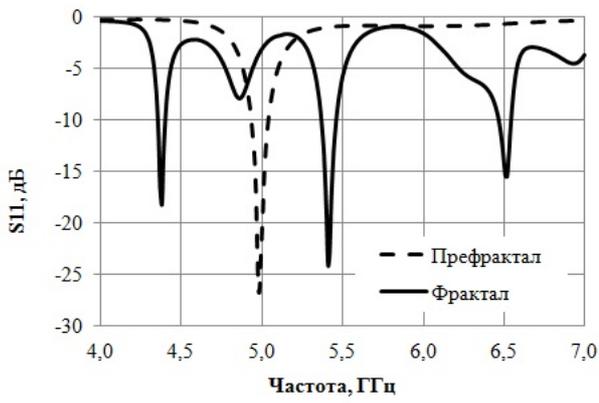
Частотные характеристики рассматриваемых антенн.

№ резонанса	Префрактал (рис. 1, а)			Фрактал первой итерации (рис. 1,б)		
	Резонансная частота, ГГц	S11, дБ	Усиление, дБ	Резонансная частота, ГГц	S11, дБ	Усиление, дБ
1	4,98	- 26,73	6,71	4,38	- 18,21	- 4,54
2				4,86	-7,93	4,41
3				5,41	- 24,13	3,03
4				6,52	- 15,52	- 6,04

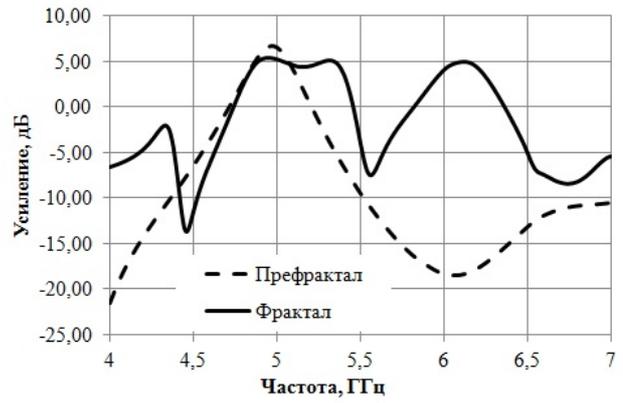
Диаграммы направленности для различных типов поляризации фрактальной антенны представлены на рисунке 3, а, б, г. По сравнению с префракталом (рис. 3, в) заметно отчетливое выделение главного и боковых лепестков.

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

В результате проведенных исследований получена структура микрополосковой антенны, основанной на фрактальной геометрии, частотные характеристики которой демонстрируют лучшие показатели по сравнению с исходной структурой (префракталом). В частности, использование фрактальной геометрии позволило добиться приемлемого согласования и коэффициента усиления в окрестности четырех резонансных частот исследуемого диапазона. Таким образом, антенна полученной структуры может быть использована в устройствах многополосной и широкополосной радиосвязи.

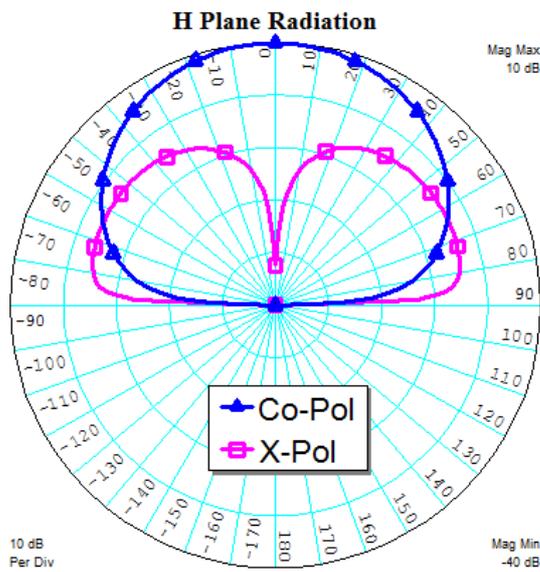


а

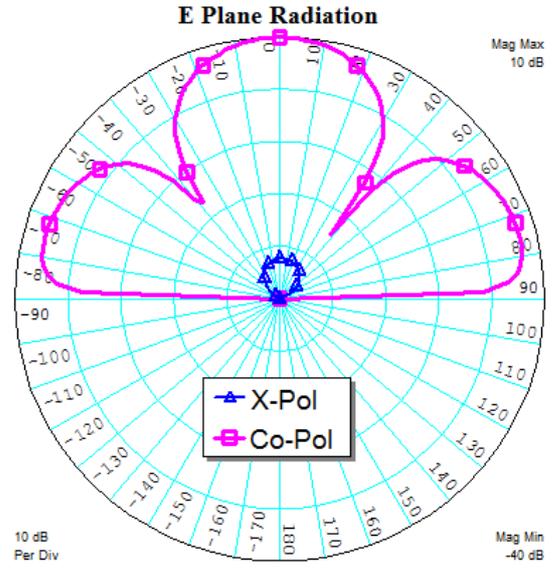


б

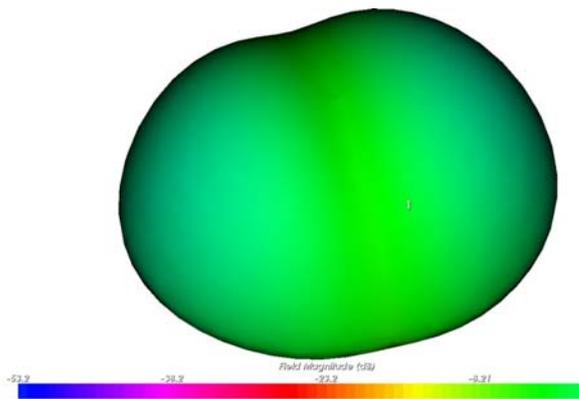
Рис. 2. Сравнительные частотные характеристики антенн на основе префрактала и фрактала первой итерации: а) возвратные потери, б) коэффициент усиления.



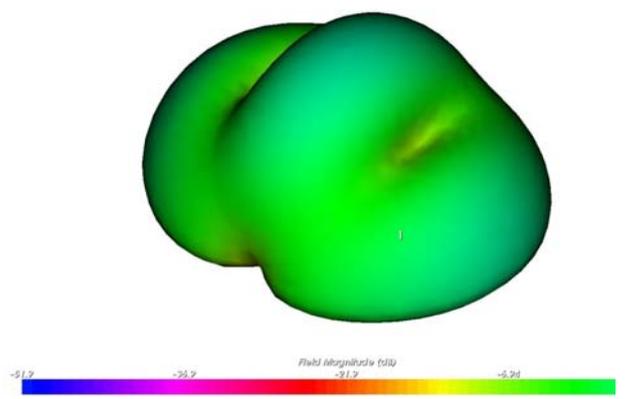
а



б



в



г

Рис. 3. Диаграммы направленности антенн на основе префрактала (в) и фрактала первой итерации (а, б, г).

### Литература

1. Потапов А.А. Фракталы в радиофизике и радиолокации: Топология выборки. Изд. 2-е, перераб. и доп. М.: Университетская книга, 2005. 848 с.
2. Федер Е. Фракталы: Пер. с англ.-М.: Мир, 1991. - 254 с.
3. Prasad Hara, Purushottam R. V., Misra V. C. et al. // IEEE Electronics Letters. 2000. V. 36. № 14. P. 1179 – 1180.
4. Liu J.-C., Wu C.-Y., Chang D.-C. et al. // IEEE Electronics Letters. 2006. V. 42. № 15. P. 1151-1153

## ПРОВОДЯЩИЕ СВОЙСТВА ТРЕХСЛОЙНОЙ ГРАФЕН-ГРАФАНОВОЙ СТРУКТУРЫ

В.В. Шунаев, М.М. Слепченков, О.Е. Глухова

*Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского*

В работе методом молекулярной динамики построена атомистическая модель нового графен/графанового композита с тремя типами упаковки. Установлено, что наиболее энергетически выгодной является формирование структуры типа ААА, когда три слоя находятся строго друг над другом. Для полученных моделей были рассчитаны зонные структуры. Обнаружено, что для всех трех типов упаковки композит представляет собой полупроводник с шириной запрещенной зоны 0.5-0.7 эВ. На основе метода неравновесных функций Грина было установлено, что сопротивление структуры типа ААА меньше, чем для упаковок ААВ и АВА.

### ВВЕДЕНИЕ

Графен демонстрирует уникальные механические [1], электронные и магнитные свойства, которые меняются в зависимости от размера и хиральности [2, 3]. Наводороженный графен – графан – имеет энергетическую щель, которая находится в диапазоне 3,5-4,5 эВ [4-7]. В последнее время нанокompозиты на основе графена и графана находят применение в тонких гибких дисплеях, солнечных панелях, волноводах [8]. Гибридные структуры на основе графена и графана синтезируются из графита в среде газообразного водорода при давлении выше 2 ГПа и температуре 450-700°C [9]. Другим способом формирования таких структур является лазерное облучение графена, на поверхности которого адсорбируются молекулы H<sub>2</sub>O или NH<sub>3</sub> [10]. В последнем случае возможно гидрирование графена лишь с одной стороны.

Методы математического моделирования полезны для изучения свойств графен/графановых наноструктур, в том числе механических [11] и электронных [12, 13, 14]. В этой работе исследуется новая гибридная структура, состоящая из двух слоев графена и одного слоя графана. Целью исследования является изучение энергетических параметров, а также электронных и проводящих свойств этой структуры методами квантовой химии

### ПОСТРОЕНИЕ ГРАФЕН/ГРАФАНОВОЙ АТОМНОЙ МОДЕЛИ

Была рассмотрена трехслойная структура, в которой графановый лист находился между двумя графеновыми. Длина всех листов равнялась 24,14 Å в направлении кресла и 17,22 Å в направлении зигзаг. В этой работе изучалось три типа слоистых гибридных материалов графен/графана: тип ААА, где все слои расположены строго один над другим; тип ААВ, где верхний слой смещен относительно двух других; тип АВА, где средний слой сдвинут относительно двух других. Построение атомной модели проводилось в ПО KVAZAR [15].

Структуры с фиксированными краями были оптимизированы путем минимизации полной энергии, рассчитанной потенциалом AIREBO [16]. В результате оптимизации были найдены равновесные состояния для графен/графановых нанокompозитов трех типов. Их атомные структуры показаны на рисунке 1. Видно, что края графеновых слоев направлены навстречу друг другу, как бы обертывая находящийся между ними графеновый слой. В то же время центральная область всех трех листов практически не изменилась.

Средние значения энергии на атом до и после оптимизации, а также энтальпии реакции образования для всех типов упаковки приведены в таблице 1. Как видно из таблицы 1, структура типа ААА имеет наименьшую энергию и самую энтальпию реакции образования, поэтому она будет самой термодинамически стабильной и энергетически выгодной с точки зрения синтеза. Отметим, что все рассмотренные нанокompозиты имели отрицательную энтальпию реакции, а значит все они могут существовать на практике.

### ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА

На следующем этапе исследовались электронные свойства полученных структур методом SCC DFTB 2 [17] в базе «Зоб-3-1». Зонная структура композита ААА показана на рисунке 2. Для данной структуры уровень Ферми равен -5,1 эВ. Повышение уровня Ферми по сравнению с чистым графаном ( $E_f = -5$  эВ) указывает на снижение эмиссионных свойств из-за уменьшения работы выхода. Щель между валентной зоной и зоной проводимости составляет около 0,55 эВ. Можно

сделать вывод, что графен/графановый композит типа ААА имеет полупроводниковый тип проводимости в отличие от диэлектрика графана и металла графена. Из рисунка 2 видно, что вблизи уровня Ферми валентная зоны композита ААА испещрена линиями, что объясняется вкладом графана, в то время как проводящая зона похожа на графен.

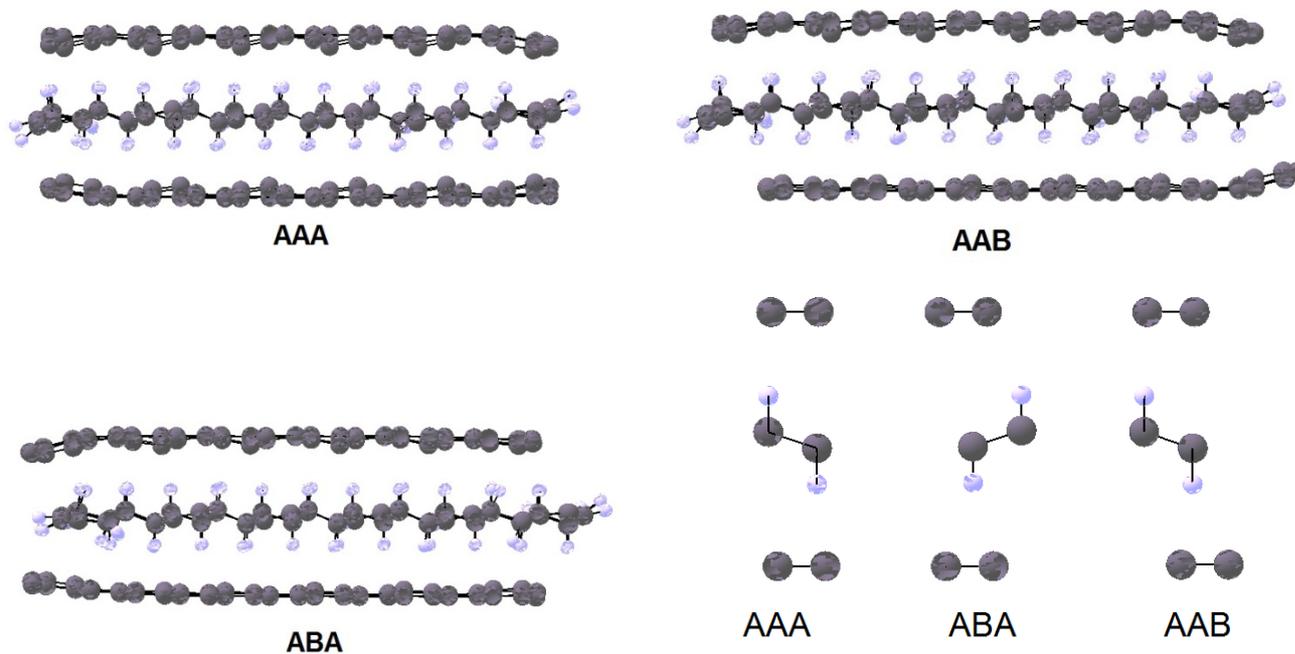


Рис. 1. Атомная структура графен/графановых нанокompозитов типа ААА, АВА, ААВ и соответствующие элементарные ячейки.

Таблица 1.

Полная энергия графен/графановых структур до и после оптимизации

Типа упаковки	Полная энергия до оптимизации, эВ/атом	Полная энергия после оптимизации, эВ/атом	Энтальпия реакции образования, эВ/атом
ААА	-5.868	-4.453	-0.025
АВА	-5.864	-4.925	-0.007
ААВ	-5.867	-4.711	-0.023

Зонные структуры композитов АВА и ААВ отличаются от ААА (рисунки 3а и 3б). Прежде всего, они имеют больший уровень Ферми: -5,27 для АВА и -5,28 эВ для ААВ. Таким образом, эти два композита имели бы худшие свойства, чем структура ААА. Композитный АВА демонстрирует наибольший зазор 0,65 эВ, тогда как для составного ААВ он практически равен ширине запрещенной зоны структуры ААА (0,53 эВ). Это можно объяснить топологиями этих структур и их упаковкой, которые влияют на расположение электронных облаков.

#### РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ

Для оценки электропроводящих свойств полученных графен/графановых композитов использовался метод неравновесных функций Грина в оригинальной модификации [18]. В качестве электродов выступали графеновые наноленты гексагональной длины (рисунок 3а). Функция пропускания для композита типа ААА показана на рисунке 3б (единицы измерения  $G_0 = e^2/h$ ). Видно, что функция сохраняет пик около уровня Ферми, типичный для графена. Вдали от уровня Ферми линия становится нерегулярной, что объясняется вкладом графеновой составляющей. Вставка на графике показывает, что функция пропускания не касается оси X. Функции пропускания для композитов ААВ и АВА, показанные на рисунках 3в и 3г, качественно соответствуют графикам для композита ААА, но важное различие наблюдается вблизи уровня Ферми: структуры АВА и

ААВ не имеют канала проводимости. Это значит, что структура ААА имеет большую проводимость линейного отклика.

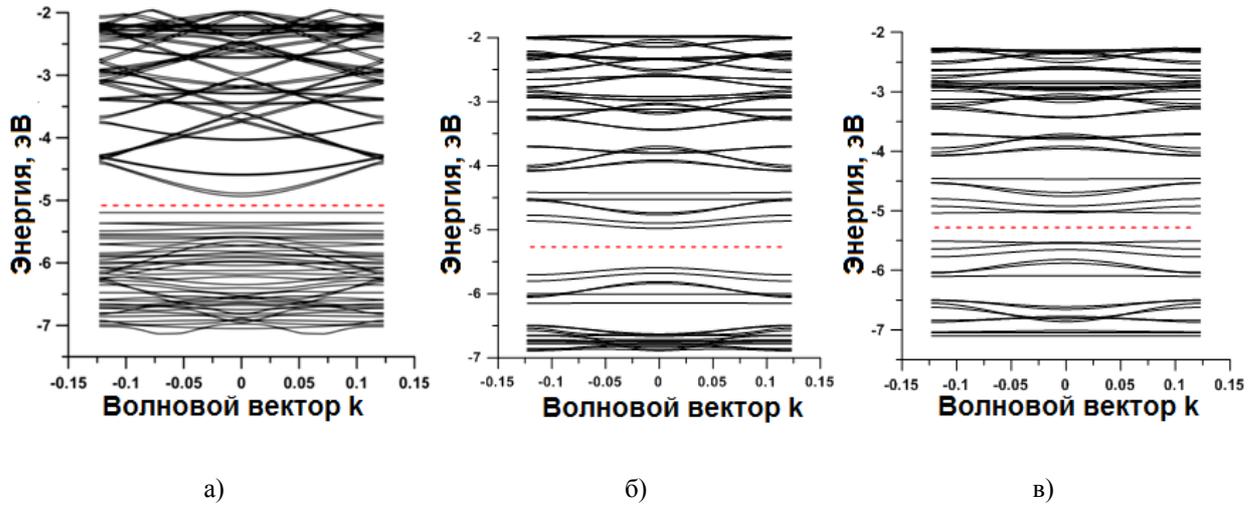


Рис. 2. Зонная структура графен/графановых композитов типа ААА (а), АВА (б), ААВ (в)

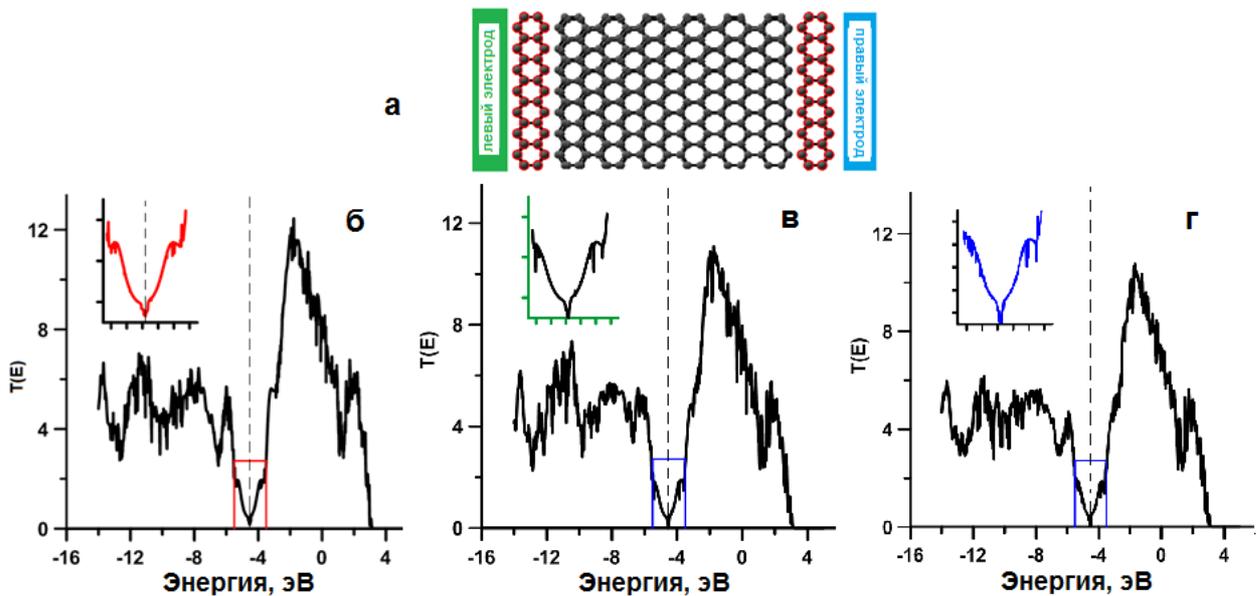


Рис. 3. Графен/графановый композит с электродами из графеновых нанолент (а). Функции пропускания для композитов ААА (б), АВА (в), ААВ (г)

Рассчитанные на основе функции пропускания сопротивления композитов представлены в таблице 2. Как и следовало ожидать, сопротивление структуры типа ААА меньше, чем сопротивление композитов ААВ и АВА.

Таблица 2.

Сопротивление и электрическая проводимость графен/графановых композитов

Тип упаковки	Сопротивление, $k\Omega$	Электрическая проводимость, $mS$
ААА	9,25	0,108
АВА	7,99	0,125
ААВ	7,46	0,131

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом молекулярной динамики на базе потенциала AIREBO были получены атомистические модели графен/графановых композитов с различными типами упаковки. Композит типа ААА оказался наиболее энергетически предпочтительным относительно энтальпии реакции образования. Было показано, что добавление графеновых слоев к графану резко уменьшает энергетический щель до  $\sim 0,5$  эВ, а новый композит демонстрирует свойства полупроводника. Расчитанные значения сопротивления показывают, что композиты типа АВА и ААВ имеют более высокие значения электропроводности, что делает эти полупроводниковые структуры перспективным материалом с точки зрения применения в тонких гибких дисплеях, солнечных панелях, волноводах.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Стипендии Президента РФ молодым ученым и аспирантам №СП-3135.2016.1.*

## Литература

1. Lee C, Wei X, Kysar J.W. et al. // Science 2008. V.321. P.385–388
2. Chen Z., Lin Y., Rooks M.J., Avouris P. // Phys. E 2007. V.40. P. 228-232
3. Seol G., Kumar B., Guo J. // Nano Res. 2012. V.5. P.164-171
4. Sofo J.O., Chaudhari A.S. and Barber G.D. // Phys. Rev. B 2007. V.75. P.153401
5. Elias D.C., Nair R.R., Mohiuddin T.M.G. et al. // Science 2009. V.323. P.610–613
6. Xiang H., Kan E., Wei S.-H. et al. // Nano Lett. 2009. V. 9. № 12. P.4025-4030
7. Guest J.R., Bode M., Guisinger N.P. // Nano Lett. 2009. V. 9. № 12. P. 4343-4347
8. Kong E.S.W. Nanomaterials, Polymers and Devices: Materials Functionalization and Device Fabrication (Australian Institute of Technology 2015, Australia
9. Antonov V.E., Bashkin I.O., Bazhenov A.V. et al. // Carbon 2016. V. 100. P. 465-473
10. Jones J.D., Mahajan K.K., Williams W.H. et al. // Carbon 2010. V. 48. P. 2335-2340
11. Reddy C.D., Cheng Q. H., Shenoy V. B. et al. // J. Appl. Phys. 2011. V. 109. P. 054314
12. Averill F.W. and Morris J. R. // Phys. Rev. B. 2011. V. 84. P.035411
13. M. J. Schmidt and D. Loss. // Phys. Rev. B 2010. V. 81. P.165439
14. W.X. Zhang, C. He, T. Li et al. // Solid State Comm. 2015. V. 211. P. 23-28
15. <http://nanokvazar.ru/>
16. S.J. Stuart, A. B. Tutein and J.A. Harrison. // J. of Chem. Phys. 2010. V.112. P. 6472-6486
17. Nechaev Y. S. // The Open Fuel Cells Journal 2011. V. 4. P.16
18. Glukhova O. E, Shmygin D. S. // Beil. Jour. Nanotec. 2018. V. 9. P.1254

## РАЗРАБОТКА ШИРОКОПОЛОСНОГО ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО МИКРОПОЛОСКОВОГО ФАЗОВРАЩАТЕЛЯ

В.П. Мещанов<sup>1</sup>, К.А. Саяпин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Научно-производственное предприятие «Ника-СВЧ», г.Саратов

<sup>2</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского

В приближении Т-волн решена задача синтеза широкополосного фиксированного фазовращателя с новой структурой электрической цепи фазосдвигающего канала на базе одиночной ступенчатой линии передачи со ступенчатым короткозамкнутым шлейфом. Проведено схемотехническое и электродинамическое моделирование предложенной структуры на микрополосковой линии передачи.

## ВВЕДЕНИЕ

В современных системах обработки радиосигналов СВЧ-диапазона имеется большая потребность в широкополосных функциональных устройствах, к числу которых относятся дифференциальные фазовращатели.

Дифференциальный фазовращатель (рис. 1), также называемый фиксированным, обеспечивает постоянных фазовый сдвиг между сигналами на выходах фазосдвигающего канала (ФК) и опорного канала (ОК) в рабочей полосе частот. К основным его характеристикам относятся следующие параметры: диапазон рабочих частот  $[f_{min}, f_{max}]$ , коэффициент стоячей волны по напряжению (КСВН) плеч фазовращателя, номинальное значение фазового сдвига  $\varphi_0$  и отклонение  $\Delta\varphi$  фазочастотной характеристики (ФЧХ) от номинального значения.

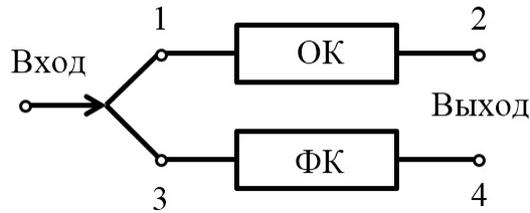


Рис. 1. Общая структура дифференциального фазовращателя.

Впервые структуру фазосдвигающего канала на основе одиночной линии передачи (ЛП) со шлейфами предложил Роберт Вилдс в 1978 году [1]. Такая структура образована отрезком однородной полуволновой ЛП, в центре которой параллельно включены разомкнутый и короткозамкнутый шлейфы длиной  $\lambda/8$ . В качестве опорного канала используется отрезок одиночной однородной линии передачи.

Аналитически задача синтеза дифференциальных фазовращателей с фазосдвигающим каналом в виде однородного отрезка ЛП длиной  $\lambda/2$  с параллельно включенным в центре четвертьволновым короткозамкнутым шлейфом решена в работе [2]. В дальнейшем были исследованы структуры ФК на основе одиночных ступенчатых линий передачи классов I [3] и II [4] с включенными в центре короткозамкнутыми шлейфами. Однако во всех перечисленных работах проводились исследования свойств структур с однородными короткозамкнутыми шлейфами. В то же время известно эффективное использование неоднородных короткозамкнутых шлейфов в устройствах фильтрации радиосигналов [5]. В связи с этим актуальным является изучение фиксированных фазовращателей со шлейфами в виде неоднородных ЛП.

В данной работе проведено исследование фазовращателя на основе одиночной трехступенчатой линии передачи с неоднородным короткозамкнутым трехступенчатым шлейфом.

**ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ СИНТЕЗА И ЕЕ РЕШЕНИЕ В ПРИБЛИЖЕНИИ Т-ВОЛН.  
МИКРОПОЛОСКОВАЯ МОДЕЛЬ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО ФАЗОВРАЩАТЕЛЯ.**

Поскольку структуры со шлейфами по определению являются отражающими и, следовательно, добиться идеального согласования в широкой полосе частот невозможно даже теоретически, при решении задачи синтеза возникает необходимость поиска компромисса между максимальным значением КСВН плеч фазовращателя и отклонением ФЧХ от требуемого номинального значения в заданном диапазоне частот. Вследствие этого задача параметрического синтеза предложенной структуры ставилась в виде двухкритериальной задачи чебышевской аппроксимации

$$\min_{AL} \max_{f \in [f_1, f_2]} |(\varphi_0 - \varphi(f, \overline{AL}))|, \tag{1}$$

$$\min_{AL} \max_{f \in [f_1, f_2]} KCBH(f, \overline{AL}),$$

где  $\varphi_0 = 45^\circ$  – заданное номинальное значение фазового сдвига;  $KCBH(f, AL)$  – КСВН плеч фазовращателя;  $AL = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_i, \theta_{ok}, Z_1, Z_2, \dots, Z_i)$  – вектор варьируемых параметров, включающий в себя электрические длины отрезков одиночной линии передачи  $\theta_1, \theta_2$ , шлейфа  $\theta_3, \theta_4, \theta_5$  и опорного канала  $\theta_{ok}$ , а также волновые сопротивления отрезков одиночной ЛП  $Z_1, Z_2$  и шлейфа  $Z_3, Z_4, Z_5$  (рис. 2).

На основе решений задачи параметрического синтеза в приближении Т-волн в программном пакете AWR Microwave Office [6] разработана схемотехническая модель фазовращателя на микрополосковой линии передачи для частотного диапазона 2-4 ГГц (рис. 3). Характеристики подложки микрополосковой ЛП соответствуют ламинату RO4003С (диэлектрическая проницаемость  $\epsilon=3,55$ , толщина  $h=0,813$ ), толщина металлизации  $t=18$  мкм.

Поскольку в приближении Т-волн не учитываются особенности распространения электромагнитных волн в средах с неоднородным диэлектрическим заполнением, частотные характеристики полученной микрополосковой схемотехнической модели имеют некоторое отклонение от заданных параметров. Кроме того, в микрополосковой схемотехнической модели введен учет влияния скачков волнового сопротивления в местах сочленения отрезков ЛП с

различными геометрическими размерами (элементы STEP1-STEP6, рис. 3), а также неоднородности, локализованной в месте соединения центрального отрезка ЛП со шлейфом (элемент МТЕЕ, рис. 3), что также вызывает смещение ФЧХ.

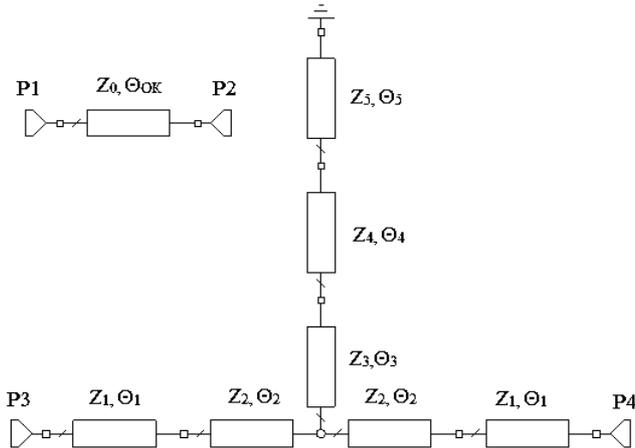


Рис 2. Модель трехступенчатого дифференциального фазовращателя в приближении Т-волн.

Для коррекции частотных характеристик решена дополнительная задача параметрической оптимизации, также поставленная в виде чебышевской аппроксимации

$$\min_{\overline{ML}} \max_{f \in [2\Gamma y, 4\Gamma y]} |(\varphi_0 - \varphi(f, \overline{ML}))|, \tag{2}$$

$$\min_{\overline{ML}} \max_{f \in [2\Gamma y, 4\Gamma y]} KCBH(f, \overline{ML}),$$

где  $\varphi(f, ML)$  – ФЧХ фазовращателя;  $KCBH(f, ML)$  – КСВН плеч фазосдвигающего канала;  $ML = (L1, L2, L3, L4, L5, L6, Lok, W1, W2, W3, W4, W5)$  – вектор варьируемых параметров.

В результате решения дополнительной задачи оптимизации частотные характеристики схмотехнической модели приняли оптимальные значения (рис. 4).

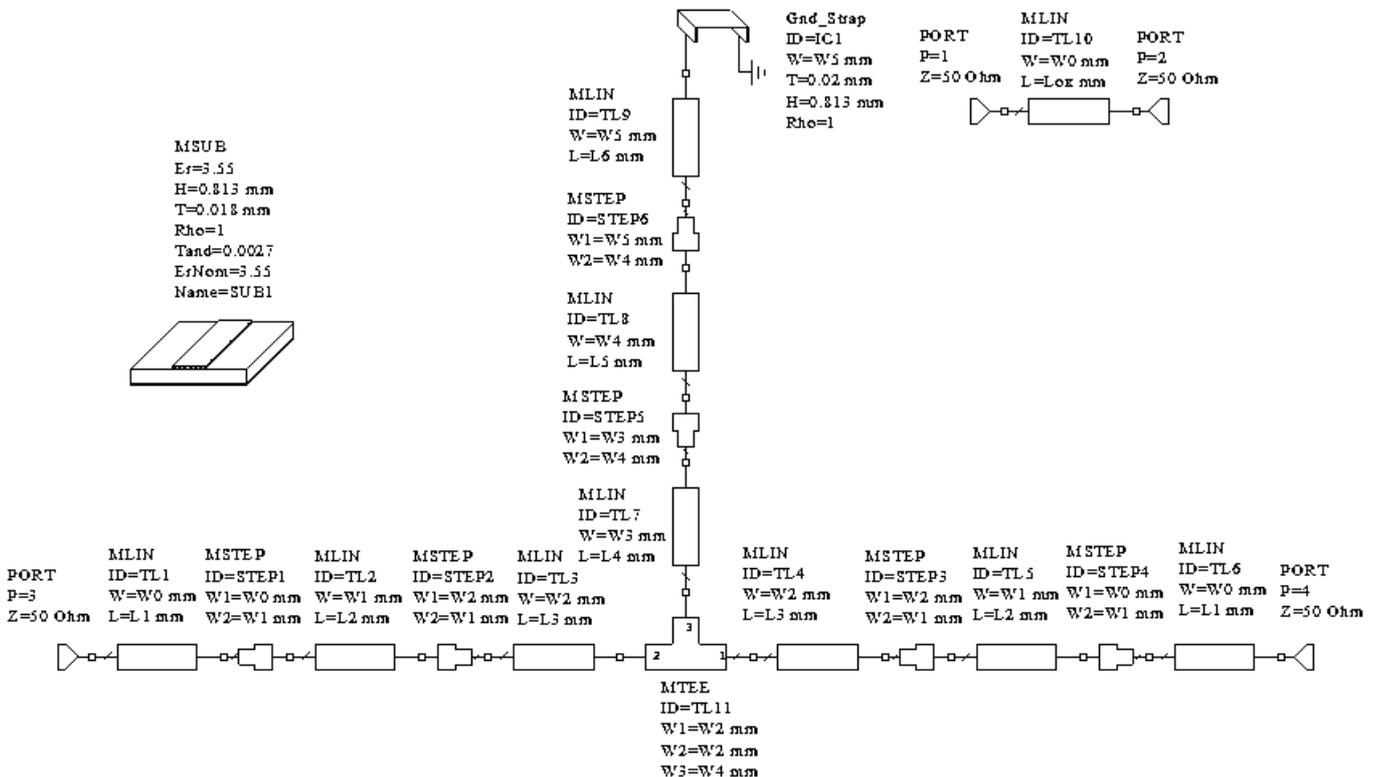


Рис. 3. Схмотехническая модель трехступенчатого дифференциального фазовращателя на микрополосковой линии передачи.

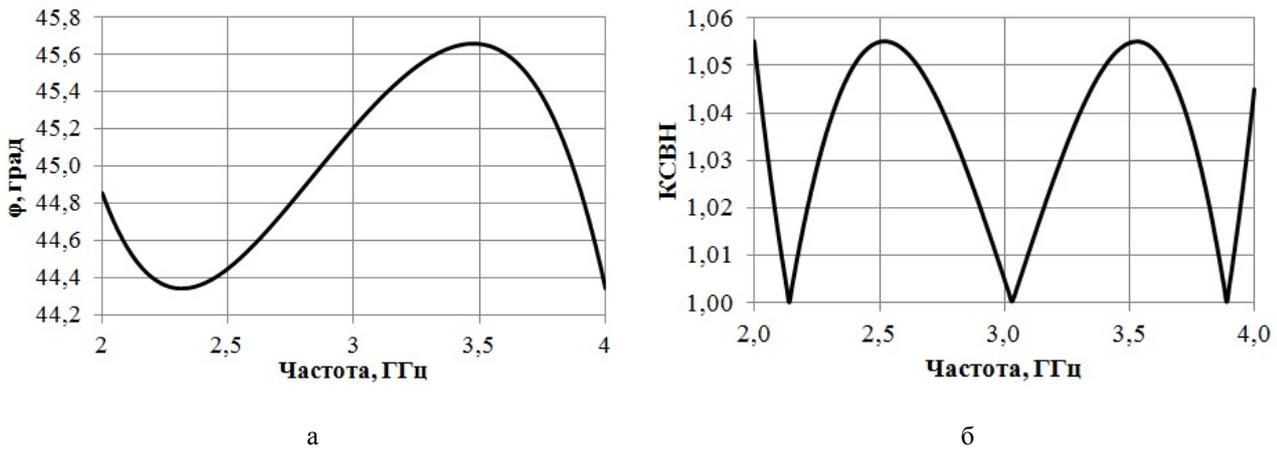


Рис. 4. Частотные характеристики схемотехнической модели дифференциального фазовращателя:  
 а) ФЧХ, б) КСВН.

Для уточнения полученных результатов построена электродинамическая модель фазовращателя и проведено моделирование в планарном EM-симуляторе AWR AXIEM [6]. Топология фазосдвигающего канала с эпюрой распределения плотности тока в нем приведена на рисунке 5, частотные характеристики – на рисунке 6.

Сравнение частотных характеристик дифференциального фазовращателя предложенной структуры с характеристиками структур, исследованных в [1], [3], [4], демонстрирует преимущество структуры со ступенчатым шлейфом. Кроме того, использование неоднородного шлейфа привело к уменьшению длин отрезков ЛП ( $l_n < \lambda/4$ ).

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты проведенных численных экспериментов показали, что дифференциальный фазовращатель предложенной структуры обладает приемлемыми частотными характеристиками. При этом его габаритные размеры значительно уменьшены по сравнению с другими структурами фазовращателей на основе одиночных ЛП, исследованными ранее. Таким образом, можно сделать вывод о целесообразности использования ступенчатого шлейфа в структуре дифференциального фазовращателя, а также обозначить перспективность исследования структуры фазосдвигающего канала на основе одиночной линии передачи с плавным шлейфом, являющимся предельным случаем  $n$ -ступенчатой линии передачи при  $n \rightarrow \infty$ .

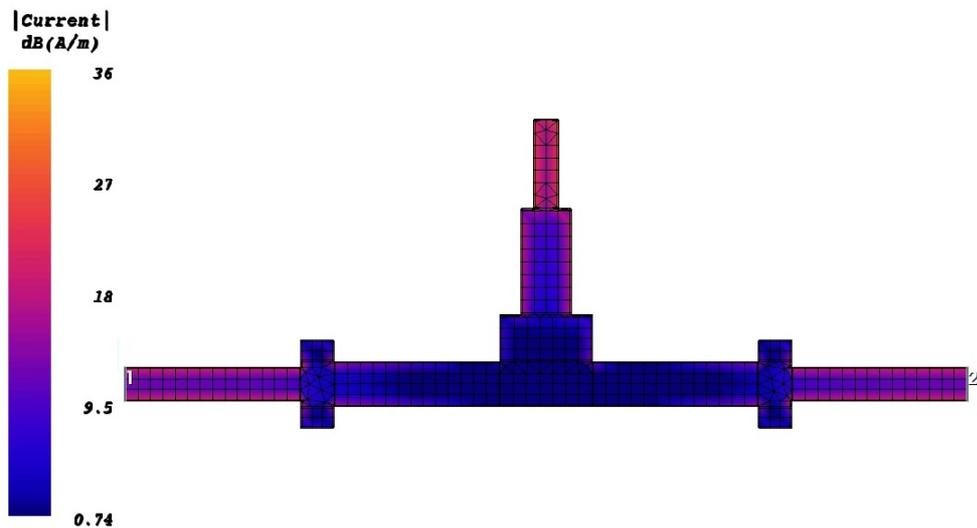


Рис. 5. Эпюра распределения плотности тока в структуре фазосдвигающего канала.

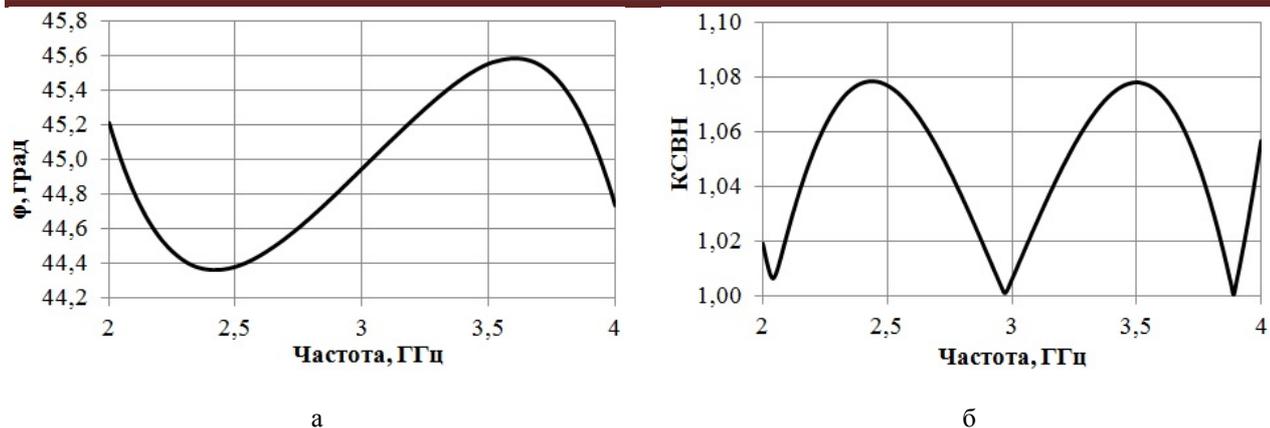


Рис. 6. Частотные характеристики электродинамической модели дифференциального фазовращателя: а) ФЧХ, б) КСВН.

#### Литература

1. Wilds R.B. // Microwave & RF. 1979. V. 6. № 12. P. 67-68
2. Алексеев А.Н., Аристархов Г.М. // Радиотехника и электроника. 1988. Т. 33. № 1. С. 63-69
3. Д.С. Губин, А.П. Креницкий, В.П. Мещанов и др. // Радиотехника и электроника. 2010. Т. 55. № 2. С. 162-167
4. Губин Д.С., Креницкий А.П., Мещанов В.П. и др. // Радиотехника и электроника. 2004. Т. 49. № 7. С. 801-805
5. Маттей Г.Л., Янг Л., Джонс Е.М.Т. Фильтры СВЧ, согласующие цепи и цепи связи. В 2-х т. М.: Связь. 1972.
6. <https://www.awrcorp.com/> NI AWR Design Environment

## СПЕКТРОСКОПИЯ РАЗЛИЧНЫХ ОБЪЕКТОВ И ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА

ВЛИЯНИЕ ГИДРАТАЦИИ НА КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ  
D-РИБОЗЫ 5-ФОСФАТА

К. В. Березин<sup>1</sup>, К.Н. Дворецкий<sup>2</sup>, М.Л. Чернавина<sup>1</sup>, А.В. Новоселова<sup>1</sup>, В.В. Нечаев<sup>3</sup>, Е.М. Антонова<sup>4</sup>, А. М. Лихтер<sup>5</sup>, В.В.Смирнов<sup>5</sup>, О.В. Гречухина<sup>6</sup>, М. В. Карташов<sup>6</sup>

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

<sup>2</sup>Саратовский государственный медицинский университет им. В.И. Разумовского

<sup>3</sup>Саратовский государственный технический университет им. Ю.А. Гагарина

<sup>4</sup>Астраханский Медицинский Университет

<sup>5</sup>Астраханский государственный университет

<sup>6</sup>Каспийский институт морского и речного транспорта

Методом функционала плотности, с использованием гибридного функционала B3LYP и набора базисных функций 6-31G(d) выполнен расчет равновесных молекулярных конфигураций и проведено моделирование спектров комбинационного рассеяния света D-рибозы 5-фосфата. Получены оптимизированные геометрические параметры, колебательные волновые числа и интенсивности в спектрах инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния света D-рибозы 5-фосфата, а так же ее водородосвязанных комплексов с 2-8 молекулами воды. С использованием метода линейного масштабирования волновых чисел и концепции локальной симметрии предложено отнесение и интерпретация колебательных полос в экспериментальном спектре комбинационного рассеяния света.

## ВВЕДЕНИЕ

D-рибоза относится к классу углеводов и в форме рибофуранозы входит в состав ряда важных биологических молекул [1], таких как РНК, ДНК, нуклеозиды, коферменты. Интерес к исследованию сахаров оптическими методами возрос в связи с разработкой неинвазивных биомедицинских технологий, в частности при использовании в качестве просветляющих агентов [2]. Расшифровка спектров углеводов [3] в кристаллической фазе и водном растворе сильно осложняются наличием многочисленных водородных связей, оказывающих существенное влияние на положение полос и их интенсивности. Отсутствие симметрии у молекулы, конформационная подвижность, насыщенный характер связей в цикле приводит к сильной делокализации нормальных колебаний, что затрудняет их интерпретацию в терминах распределения потенциальной энергии по естественным координатам.

Работы, посвященные исследованиям колебательного спектра D-рибозы, немногочисленны. Наиболее подробно они были изучены в экспериментальной работе [4]. На основании сопоставления спектров ИК и КР D-рибозы в водном растворе, анализа результатов расчетов эмпирического силового поля авторы провели интерпретацию наблюдаемых спектров D-рибозы-5-фосфата.

В связи с этим представляет интерес провести квантово-механические расчеты колебательных спектров D-рибозы-5-фосфата в комплексе с молекулами воды для установления их структуры и улучшения понимания природы колебаний D-рибозы и дальнейшей разработки более систематического подхода к интерпретации спектров углеводов. Предыдущие расчеты методом функционала плотности были выполнены для изолированных молекул рибозы и ее производных, что не позволяет провести интерпретацию колебательных конденсированных состояний кристалл и водный раствор.

## МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Расчеты проведены с использованием программы Gaussian'03 методом B3LYP/6-31G(d). Для лучшего согласия с экспериментом полученные волновые числа нормальных колебаний исследуемых молекул были уточнены методом линейного масштабирования [5-7] по формуле:

$$\nu_{\text{экср}} = a\nu_{\text{теор}}^2 + b\nu_{\text{теор}}, \quad (1)$$

где  $\nu_{\text{экср}}$ ,  $\nu_{\text{теор}}$  – опытное и вычисленное значение волнового числа в  $\text{см}^{-1}$ ,  $a$  и  $b$  – коэффициенты, подлежащие определению. Численные значения  $a$  и  $b$  были найдены в [7] для базиса 6-31G(d). Для интерпретации колебаний использовалась программа визуализации форм колебаний Molekel [8].

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ

Интерпретация колебательного спектра D-рибозы затруднена низкой симметрией молекулы и высокой степенью смешивания нормальных колебаний. В связи с этим нужно применять подход,

основанный на локальной симметрии молекулы. Он заключается в выделении наиболее симметричных фрагментов у сложной молекулы и классификации колебаний в рамках локальной точечной группы симметрии. В основе фуранозной формы рибозы лежит неплоское циклопентановое кольцо, в котором один атом углерода заменен на кислород. Молекула рибозы в данной форме представляет собой тетрагидофуран, в котором три атома водорода в группах  $\text{CH}_2$  замещены гидроксильной и один оксиметильной группой. Таким образом, колебания циклического остова могут быть проклассифицированы по более высокой группе симметрий фурана ( $C_{2v}$ ) или тетрагидофурана ( $C_2$ ). Колебания ОН-заместителей и оксиметильного фрагмента, очевидно, относятся к локальной группе ( $C_s$ ), фосфатной группы – ( $T_d$ ). D-рибоза 5-фосфат имеет 63 нормальных колебания. Пять валентных С-О и С-С колебаний, два “плоских” и два “неплоских” колебаний цикла, что связано с 3 условиями цикличности. Каждая СН связь дает одно валентное и два деформационных колебания (всего 18). Каждая ОН-группа дает шесть колебаний (валентные колебания СО, валентные колебания ОН, два деформационных колебания всей группы ОН как целого, крутильное колебание ОН и угловое деформационное колебание ОН). Локально тетраэдрическая группа  $\text{PO}_4$  приносит 9 колебаний (4 валентных РО и 5 деформационных РО). В результате, все нормальные моды D-рибозы 5 фосфата были отнесены к колебаниям фуранозного кольца и заместителей.

Предварительные расчеты спектра КР изолированной молекулы D-рибозы-5-фосфата в нейтральном состоянии приводят к сильным различиям с экспериментальным спектром водного раствора, заключающемся в частности в отсутствии наиболее интенсивной полосы симметричного колебания фосфатной группы  $975 \text{ см}^{-1}$ . Эту полосу удается качественно воспроизвести  $934 \text{ см}^{-1}$  только для анионной формы молекулы с зарядом -2. Однако в изолированном состоянии анион оказывается нестабильным по отношению внутримолекулярному переносу протона с гидроксильной группы D-рибозы на фосфатную группу. В комплексах с водой анионная форма D-рибозы-5-фосфата стабилизируется. Строение двух из 6 рассмотренных гидратов показано на рис. 1

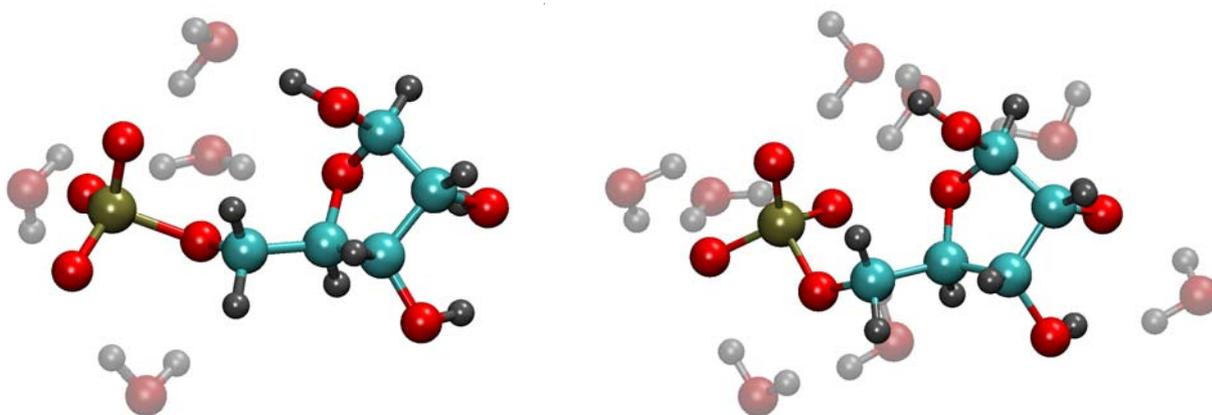
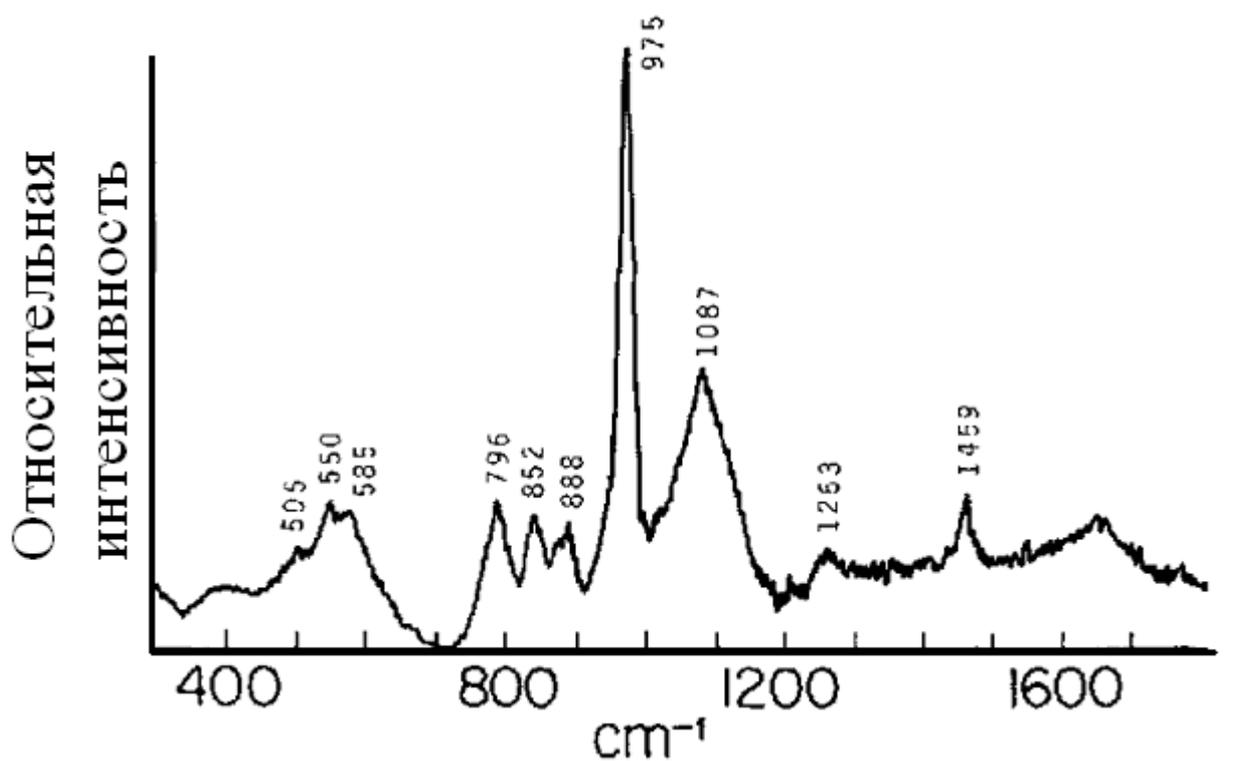
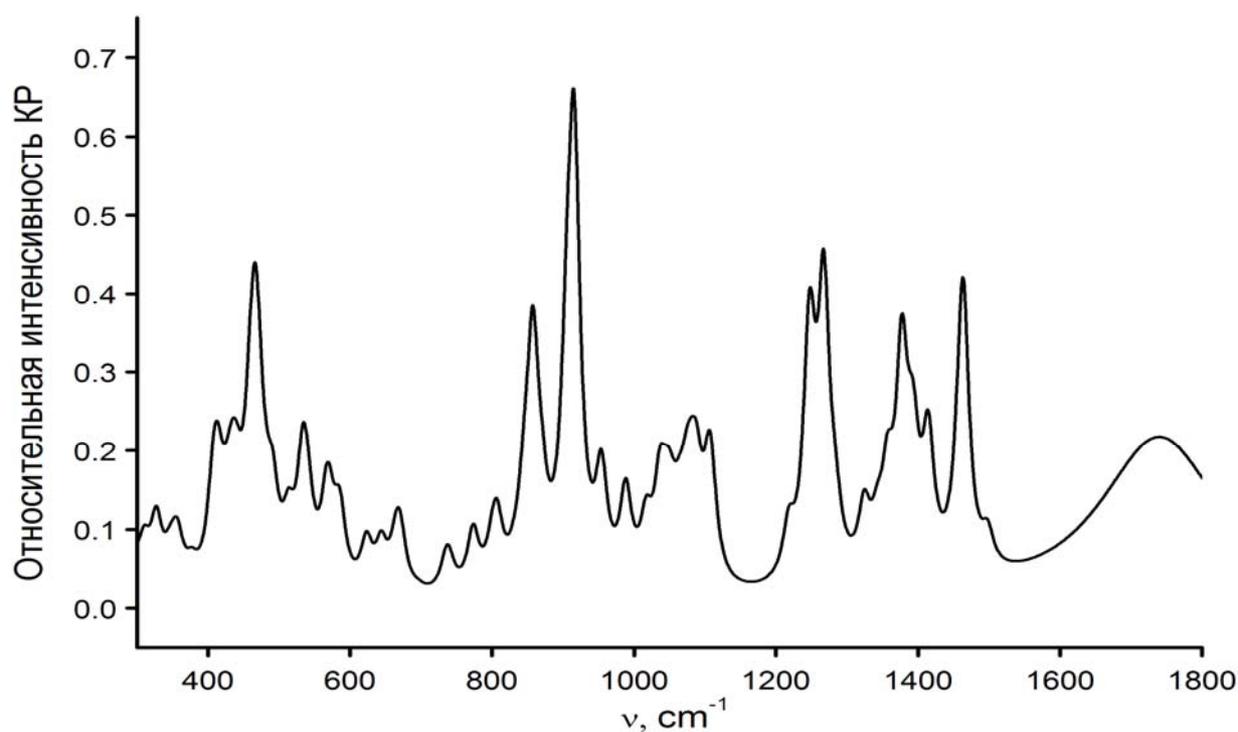


Рис. 1. Строение рассчитанных комплексов D-рибозы 5 фосфата с 4 и 8 молекулами воды.

Моделирование рассчитанного спектра КР показало (рис.2), что наряду с полосами аниона сравнимую интенсивность имеют полосы, возникающие от связанной с ним молекул воды. В экспериментальном спектре они имеют большую ширину и образуют безструктурное гало на фоне которого видны немногочисленные пики внутримолекулярных колебаний гидратированного аниона D-рибозы 5 фосфата. Наиболее низкочастотная область образованная триплетом  $505, 550, 585$  связана с деформационными колебаниями фосфатенной группы и деформационного “плоского” колебания фуранозного цикла. Следующая группа полос  $796, 852, 888 \text{ см}^{-1}$  отнесена преимущественно к валентным локально симметричным колебаниям связей СО и СС цикла рибозы. Бесструктурная, широкая полоса  $1087 \text{ см}^{-1}$ , согласно расчету, является суперпозицией большого числа полос с доминирующим вкладом валентных колебаний СО связей. Две высокочастотные полосы  $1263$  и  $1459 \text{ см}^{-1}$  объясняются симметричными деформационными колебаниями СН. В теоретическом спектре на рис 1. рядом с ними видны полосы, относящиеся к воде, ширина которых была положена равной равной ширине полос D-рибозы 5 фосфата.



а)



б)

Рис. 2. Сравнение экспериментального ((а), воспроизведено из [4]) и теоретического (б) спектров КР D-рибозы 5-фосфата в водном растворе.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнены расчеты структуры и КР спектров D-рибозы 5-фосфата в изолированном состоянии и в комплексах с 2-8 молекулами воды методом функционала плотности.

На основании сравнения форм колебаний родственных соединений с более симметричной структурой выделены колебания фуранозного кольца, гидроксильных заместителей и фосфатной группы. Полосы КР в области  $800\text{ см}^{-1}$  водных растворов идентифицированы как локально симметричные комбинации валентных колебания пятичленного кольца рибозы.

## Литература

1. Овчинников Ю.А. Биоорганическая химия. Москва: Просвещение, 1987, 816 с.
2. Hirshburg J.M. Chemical agent induced reduction of skin light scattering: doctoral dissertation. Texas A&M University, 2009
3. Wiercigroch E., Szafraniec E., Czamara K. et al. // Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc. 2017. V.185. P.317-335
4. P. Carmona, M. Molina // Journal of Raman Spectroscopy 1990. V. 21. P. 395-400
5. Yoshida H., Takeda K., Okamura J. et al. // J. Chem. Phys. A 2002. V. 106. № 14. P. 3580-3586
6. Yoshida H., Ehara A., Matsuura H. // Chem. Phys. Lett. 2000. V. 325. № 4. P. 477-483
7. Березин К.В., Нечаев В.В., Кривохижина Т.В. // Оптика и спектроскопия 2003. Т. 94. № 3. с. 398-401
8. Ugo Varetto, Molekel 5.4. <http://ugovaretto.github.io/molekel/>

## ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ КОНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ ЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ В ВОДНОМ РАСТВОРЕ

М. Л. Чернавина<sup>1</sup>, В.В.Смирнов<sup>2</sup>, А.М. Лихтер<sup>2</sup>, Е.М. Антонова<sup>3</sup>, О.В. Гречухина<sup>4</sup>,  
М. В. Карташов<sup>4</sup>, К.В. Березин<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>Астраханский Государственный Университет

<sup>3</sup>Астраханский Медицинский Университет

<sup>4</sup>Каспийский институт морского и речного транспорта

В рамках метода функционала плотности B3LYP/6-311+G(d,p) был проведен теоретический конформационный анализ этиленгликоля в водной среде с использованием двух методов: метода SCRF и супермолекулярного метода. На основе расчета относительной населенности гидратов выяснено, что низкие по энергии конформеры находятся в конформации «гош», с образованием внутримолекулярной водородной связи между спиртовыми группами. Относительная населенность конформеров при использовании двух методов расчета различная.

### ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время для диагностики и терапии многих заболеваний используются методы фотомедицины и биомедицинской оптики, но по причине того, что кожа и многие другие биоткани обладают сильным рассеянием света в видимой и ближней инфракрасной области возникают определенные сложности. Связаны они с тем, что рассеяние возникает за счет неоднородностей показателей преломления на границах различных макромолекулярных структур, в основном на коллагеновых волокнах, которые преимущественно ответственны за рассеяние света в коже [1]. Эти проблемы решаются путем введения в ткань биосовместимых молекулярных агентов, которые способствуют ее оптическому просветлению [2-5]. Экспериментальным *in vivo* и *in vitro* исследованиям просветления различных типов биотканей посвящено довольно много работ [6-12], что говорит об актуальности проблемы.

В рамках данной проблемы представляет интерес конформационный анализ иммерсионных агентов, одним из которых является водный раствор этиленгликоля, который используют как просветляющий агент *in vitro*.

Теоретическому и экспериментальному конформационному анализу в газовой фазе и жидком состоянии посвящено немало работ. В работе [13] проведен конформационный анализ этиленгликоля в газовой фазе, в найденных конформерах при различных температурах были измерены двугранные углы поворота ОН-групп и длины связей. В работе [14-16] с помощью полуэмпирических методов были рассчитаны конформеры этиленгликоля, энергии всех транс- и гош-конформеров, также посчитаны диэлектрические постоянные, константы равновесия. В работе [17] было найдено методами *ab initio* 10 конформеров этиленгликоля. В работе [18] было исследовано конформационное равновесие этиленгликоля путем оптимизации геометрии на уровнях 6-31G\*, MP2/6-31G\* и 6-31G\*\*. В работе [19] говорится о конформационном анализе этиленгликоля в жидком состоянии с помощью молекулярного моделирования, результаты подчеркивают важность межмолекулярных водородных связей для внутримолекулярных взаимодействий в жидкости. В работе [20] для исследования глобальной конформационной структуры 1,2-этандиола были использованы методы *ab initio* молекулярных орбиталей. Глобальная поверхность потенциальной энергии кручения была получена путем сканирования через три угла скручивания молекулы, при этом оставшаяся

энергия ядра была минимизирована. Были специально рассчитаны два типа путей минимальной энергии для конформационного преобразования вдоль крутильного угла углерод-углеродной связи. Все геометрии были оптимизированы на уровне MP2 (fu) / 6-31 \*\*, а энергии были рассчитаны до уровня MP2 (fu) / 6-311 + G (2d, p). В работе [21] была уточнена геометрия десяти конформаций этиленгликоля без каких-либо геометрических ограничений методом abinitio в базисе 4-21G с оптимизацией геометрии по всем параметрам стандартным градиентным методом.

В настоящей работе целью является построить молекулярные модели всех возможных конформеров этиленгликоля с использованием метода функционала плотности B3LYP/6-311+G(d,p). Провести учет водного окружения двумя способами: эффективный учет водного окружения в рамках модели SCRF, когда молекула окружается эффективной заряженной сферой; учесть водное окружение в явном виде путем добавления к молекуле этиленгликоля молекул воды. Найти отношения конформеров в водной среде.

#### МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Все теоретические расчеты проводились в рамках метода B3LYP/6-311+G(d,p). Учет водного окружения проводился двумя способами с использованием комплекса программ Gaussian [22]. Первый способ заключался в эффективном учете водного окружения в рамках модели SCRF (Self-Consistent Reaction Field), когда молекула окружается эффективной заряженной сферой. Во втором способе водное окружение учитывалось в явном виде путем добавления к молекуле этиленгликоля молекул воды.

Относительная населенность конформеров  $w_i$  была рассчитана по формуле (1)

$$w_i = \frac{e^{\left(\frac{-E_i}{RT}\right)}}{\sum_{i=1}^n e^{\left(\frac{-E_i}{RT}\right)}}, \quad (1)$$

где  $E_i$  – разность между самой низкой энергией соединения и энергией конформера,  $R$  – универсальная газовая постоянная,  $T$  – температура ( $T=300$  К).

#### РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Молекулярные модели транс и гош конформеров этиленгликоля, рассчитанные методом B3LYP/6-311+G(d,p) показаны на рис.1.



Рис.1. Трансоидная (а) и гош-конформации (б) молекулы этиленгликоля

Были смоделированы и рассчитаны энергии всех конфигураций, было найдено 4 транс-конформаций этиленгликоля (Рис.2.) и 5 гош-конформации (Рис.3.).

За центральную ось, относительно которой происходили моделированные повороты ОН-групп, была взята ось, проходящая через атомы углеродов под номерами 5 и 2 (Рис.1). в дальнейшем в статье будут использованы обозначения C2C5, а латинские буквы (L), (R) и (C), около C2C5, будут означать положение ОН-групп, соответственно слева, справа и по центру относительно заданной оси. Например, (L)C2C5(R) означает, что к атому углерода под номером 2 прикреплена ОН-группа, повернутая влево, а к атому углерода под номером 5 прикреплена ОН-группа, повернутая вправо.

Было выявлено, что гош-конформации (L)C2C5(R) и (R)C2C5(L) идентичны, также, как и транс-конформации (L)C2C5(L) и (R)C2C5(R). Гош-конформация (C)C2C5(C) в изолированном состоянии не стабилизируется и переходит в конфигурацию (C)C2C5(R). При этом транс-конформация (C)C2C5(C) в изолированном состоянии стабилизируется, в отличие от гош-конформации.

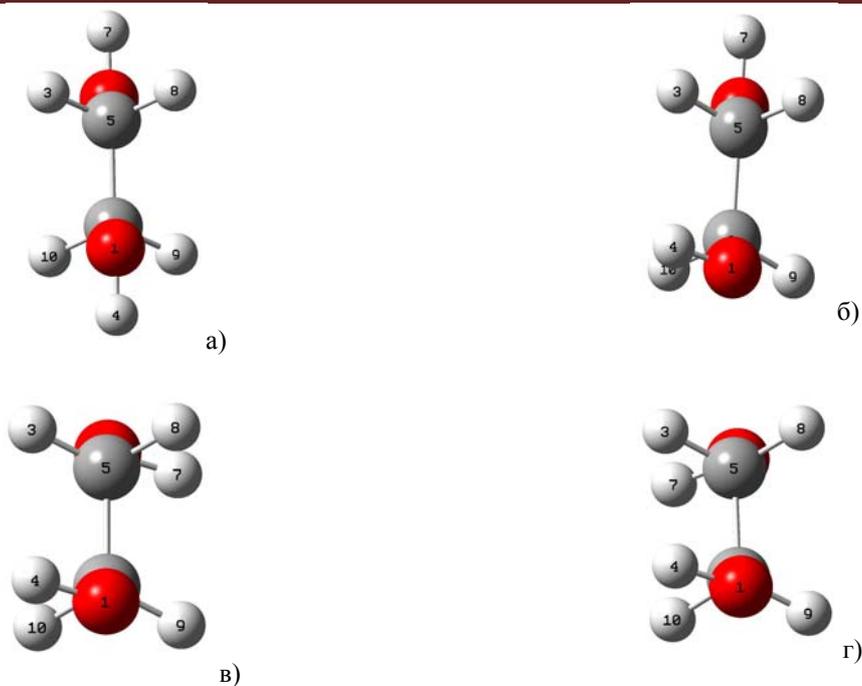


Рис.2. Транс-конформации этиленгликоля(а) (C)C2C5(C), (б) (L)C2C5(C), (в) (L)C2C5(R), (г) (L)C2C5(L).

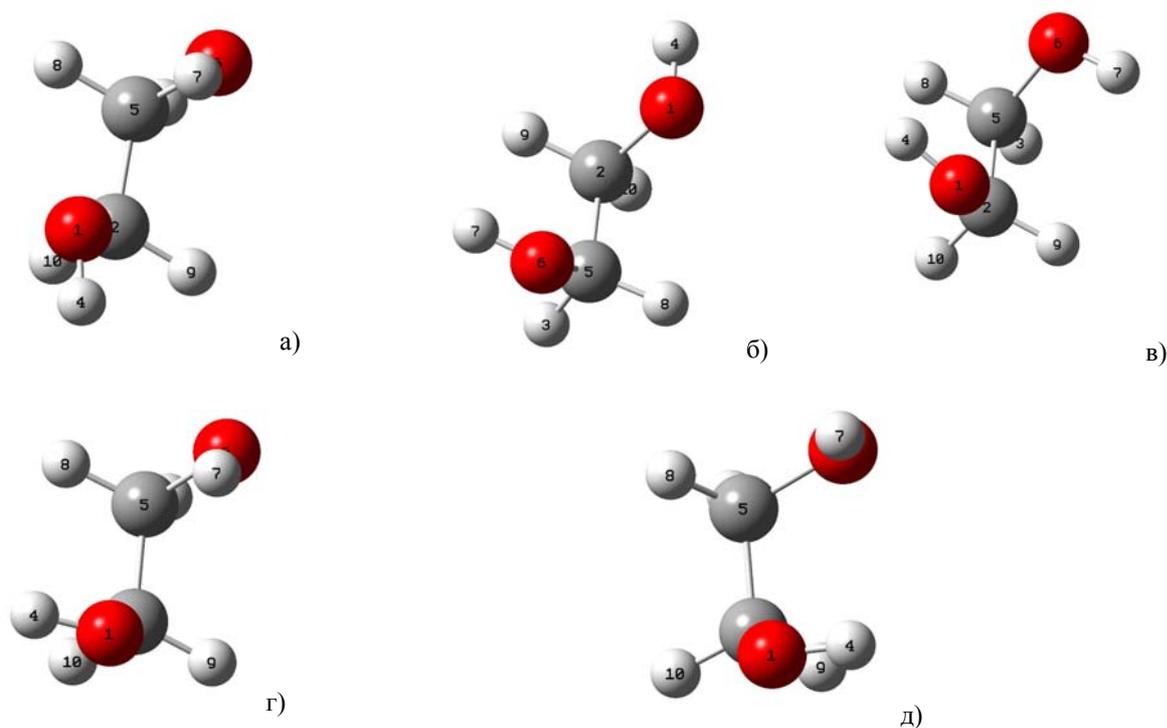


Рис.3. Гош-конформации этиленгликоля  
(а)-(C)C2C5(R), (б)-(L)C2C5(C), (в)-(L)C2C5(L), (г)-(L)C2C5(R), (д)-(R)C2C5(R).

После проведения учета водного окружения для транс-конформаций этиленгликоля было найдено 7 гидратов, а для гош-конформаций 9 гидратов.

На рисунках 4-5 представлены молекулярные структуры гидратов транс-конформаций этиленгликоля, для каждого из которых были рассчитаны энергии.

При присоединении молекул воды гош-конформация (R)C2C5(C) стабилизируется, а гош-конформации (L)C2C5(L) и (R)C2C5(R) в водном окружении представляют собой различные комплексы, с различными энергиями, хотя, как сказано ранее, без водного окружения конформеры были идентичны.

При присоединении молекул воды (C)C2C5(C) стабилизируется. Но в положении (C)C2C5(L) при присоединении молекул воды слева-справа, между молекулами не образуется водородная связь, которая определяет более стабильное положение комплекса.

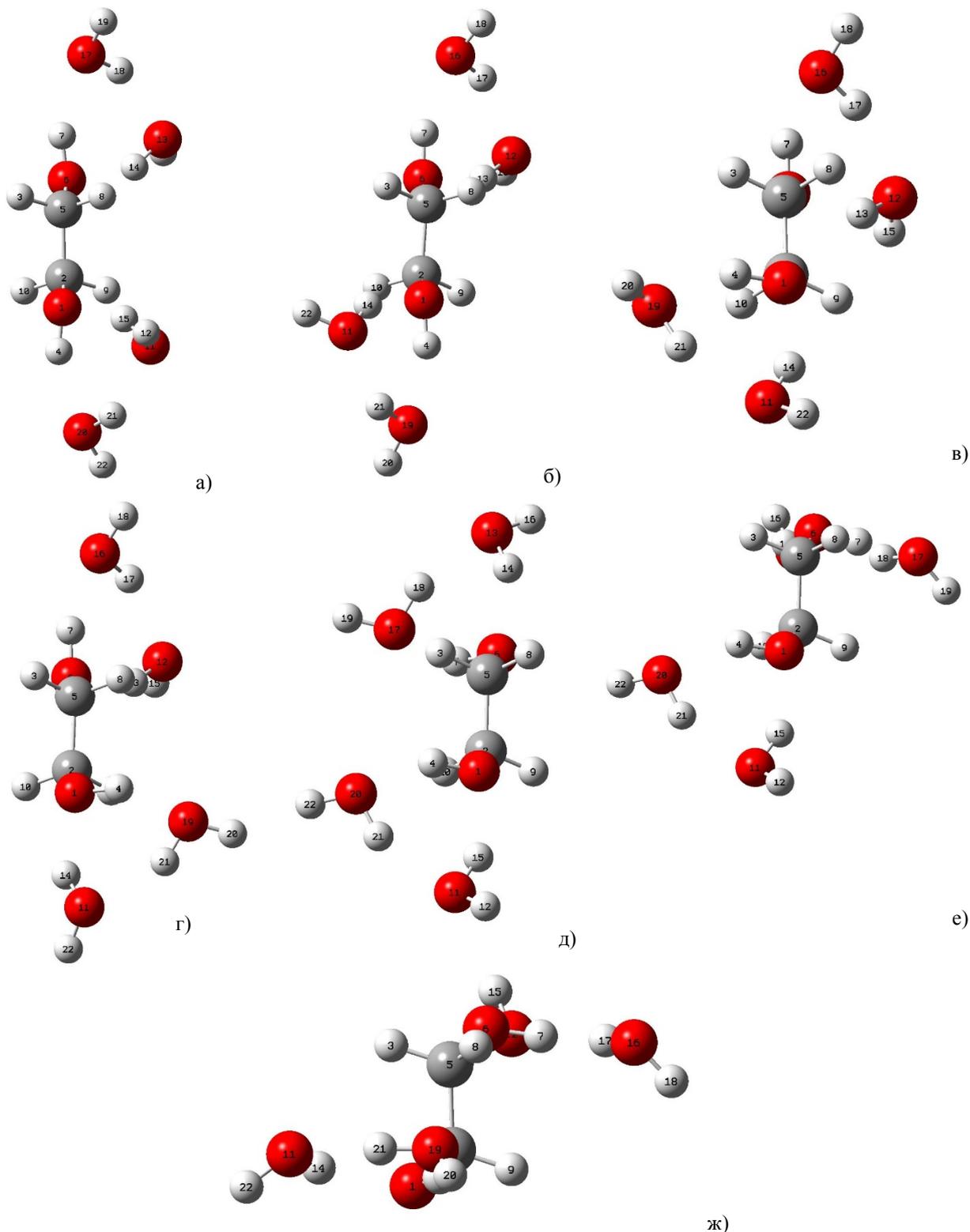


Рис.4. Гидраты этиленгликоля в транс-конфигурации

(а), (б) - (C)C2C5(C)(справа-справа, слева-справа), (в) - (L)C2C5(C)(слева-справа), (г) - (R)C2C5(C)(справа-справа), (д) - (L)C2C5(L)(слева-слева), (е) - (L)C2C5(R)(слева-справа), (ж) - (R)C2C5(R)(слева-справа).

В скобках через дефис обозначено расположение молекул воды.

Для гош-конформеров, при присоединении молекул воды в явном виде к различным спиртовым группам образуется межмолекулярная водородная связь, соответственно для транс-конформеров такого не происходит, что просто невозможно, с учетом расположения ОН групп.

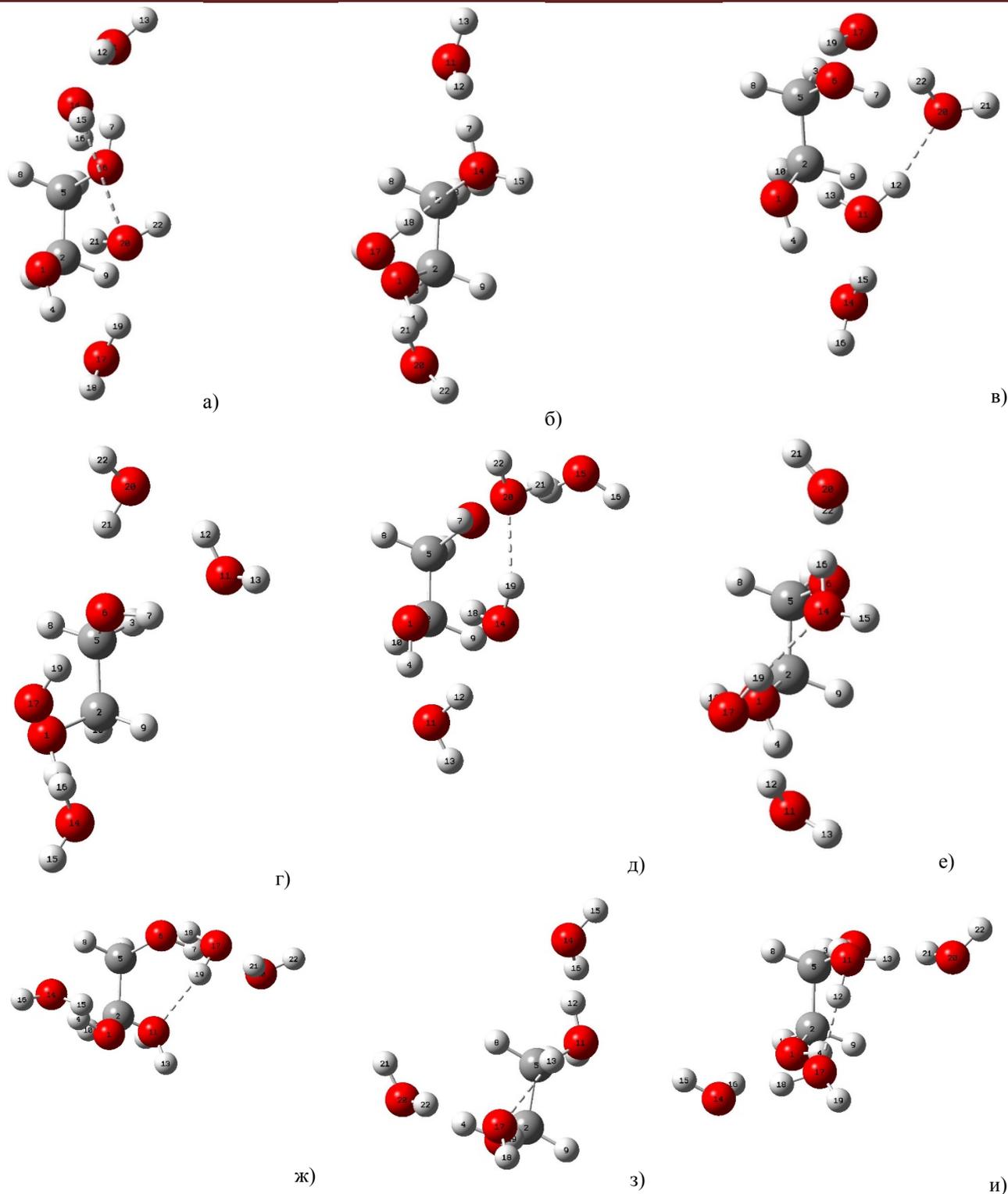


Рис.5. Гидраты этиленгликоля в транс-конфигурации

(а), (б) - (C)C2C5(C)(справа-справа, слева-справа);(в), (г) - (C)C2C5(L)(справа-справа, слева-справа); (д), (е) - (C)C2C5(R)(справа-справа, слева-справа); (ж) - (L)C2C5(L)(слева-справа); (з) - (R)C2C5(R)(слева-справа); (и) - (L)C2C5(R)(слева-справа).

Энергия различных конформеров неодинакова, но энергетический барьер, разделяющий различные поворотные изомеры, для большинства органических соединений невелик. Поэтому при обычных условиях, как правило, нельзя зафиксировать молекулы в одной строго определенной конформации: обычно в равновесии сосуществуют несколько легко переходящих друг в друга поворотных форм.

Поскольку молекула в разных конформациях обладает разной энергией, при заданной температуре имеется различная населенность конформаций. Населенными оказываются конформации, отвечающие минимумам энергии. Конформации, отвечающие максимумам энергии, не заселены.

Их следует рассматривать как переходные состояния в процессе превращения одного конформера в другой.

В таблицах 1 - 2 приведены относительные населенности конформеров, рассчитанных двумя способами. Обозначения гидратов в таблицах подразумевают под собой следующее, например, этиленгликоль-гош-(R)C2C5(R)+4H2O(L-R) назван гош-конформер этиленгликоля, у которого обе OH-группы присоединены справа-справа, а 4 молекулы воды присоединены слева-справа, расположение ведется также вокруг ранее оговоренной оси.

Таблица 1.  
Относительная населенность гидратов %.

Гидраты	Энергия в Хартри	Относительная населенность конформеров в %
Этиленгликоль-гош-(R)C2C5(R)+4H2O(L-R)	-536,2274967	59
Этиленгликоль-гош-(C)C2C5(L)+4H2O(R-R)	-536,2261292	14
Этиленгликоль-гош-(C)C2C5(R)+4H2O(L-R)	-536,2258923	11
Этиленгликоль-гош-(L)C2C5(L)+4H2O(L-R)	-536,2256776	9
Этиленгликоль-гош-(C)C2C5(R)+4H2O(R-R)	-536,2247725	3
Этиленгликоль-гош-(L)C2C5(R)+4H2O(L-R)	-536,2245917	3
Этиленгликоль-гош-(C)C2C5(C)+4H2O(L-R)	-536,2236619	1

Таблица 2.  
Относительная населенность конформеров в водном окружении в %.

SCRF	Энергия в Хартри	Относительная населенность конформеров в %
Этиленгликоль-гош-(L)C2C5(R)	-230,344385920	38
Этиленгликоль-гош-(C)C2C5(R)	-230,344299370	35
Этиленгликоль-гош-(R)C2C5(R)	-230,343127770	10
Этиленгликоль-гош-(L)C2C5(L)	-230,342505570	5
Этиленгликоль-гош-(C)C2C5(L)	-230,342314940	4
Этиленгликоль-транс-(L)C2C5(R)	-230,341750020	2
Этиленгликоль-транс-(L)C2C5(L)	-230,341728360	2
Этиленгликоль-транс-(L)C2C5(C)	-230,341349820	2
Этиленгликоль-транс-(C)C2C5(C)	-230,340983070	1

Исходя из данных, приведенных в таблицах 1, 2, можно сделать вывод о том, что более вероятны гидраты конформации гош. Как видно, из таблиц наиболее высокий процент населенности 59% и 38% именно у гош-конформеров, особенно это проявляется для гидратов, т.е. тех конформеров, к которым молекулы воды были присоединены в явном виде.

## ВЫВОДЫ

Проведен теоретический конформационный анализ этиленгликоля с использованием метода функционала плотности B3LYP/6-311+G(d,p) в водной среде с использованием двух методов: метода SCRF и супермолекулярного метода. Выяснено, что наилучшие конформеры находятся в конформации «гош», с образованием внутримолекулярной водородной связи. Относительная населенность конформеров при использовании двух методов получилась различная. Супермолекулярный метод является наиболее эффективным, но применим к небольшим системам поскольку учитывает водное окружение, первую гидратную оболочку, в явном виде.

*Работа выполнена при финансовой поддержке в рамках государственных заданий высшим учебным заведениям и научным организациям в сфере научной деятельности, полученных от Минобрнауки. Рег. номер: 3.9128.2017/БЧ.*

## Литература

1. Hirshburg J.M. Chemical agent induced reduction of skin light scattering: doctoral dissertation / Texas A&M University, 2009.
2. Tuchin V. V. Handbook of Optical Sensing of Glucose in Biological Fluids and Tissues. Taylor & Francis Group LLC, CRC Press, 2009.
3. Tuchin V. V. Optical Clearing of Tissues and Blood. / PM 154, SPIE Press, Bellingham, WA, 2006.
4. Zhu D., Larin K.V., Luo Q. et al. // Laser Photonics Rev. 2013. V. 7. № 5. P. 732–757
5. Genina E.A., Bashkatov A.N., Sinichkin Yu.P. et al. // J. Biomed. Photonics & Eng. 2015. V. 1. № 1. P.22–58

6. Генина Э.А., Башкатов А.Н., Кочубей В.И. и др. // Оптика и спектроскопия 2005. Т. 98. №4. С. 725-733
7. Генина Э.А., Башкатов А.Н., Синичкин Ю.П. и др. // Квантовая электроника. 2006. Т. 36. №12. С. 1119-1124
8. Bashkatov A.N., Korolevich A.N., Tuchin V.V. et al. // Asian Journal of Physics 2006. V. 15. № 1. P. 1-14
9. Genina E. A., Bashkatov A.N., Tuchin V.V. // Adv. Optical Technologies 2008. Article ID 267867, 8 pgs
10. Bashkatov A.N., Genina E.A., Tuchin V.V. et al. // Laser Physics 2009. V. 19. №6. P. 1312-1322
11. Wen X., Tuchin V. V., Luo Q. et al. // Physics in Medicine and Biology 2009. V. 54. №22. P. 6917-6930
12. Sudheendran N., Mohamed M., Ghosn M.G. et al. // J. Innovative Optical Health Sciences 2010. V. 3. №3. P. 169–176
13. Kazerouni M. Rahim, Hedberg Lise, Hedberg Kenneth // J. Am. Chem. Soc. 1994. V. 116. №12. P. 5279–5284
14. Podo Franca, Némethy George, Indovina Pietro L. et al. // Molecular Physics 1974. V.27. № 2. P. 521-539
15. Sengwa R.J., Kaur Kulvinder, Chaudhary Rakhee // Polym Int. 2000. V. 49. P.599-608
16. Almlöf Jan, Stymne Hans // Chemical Physics Letters 1975. V. 33. №1. P. 118-120
17. Bultinck Patrick, Goeminne Andre, Van de Vondel Dirk // Journal of Molecular Structure: THEOCHEM. 1995. V. 357. № 20. P. 19-32
18. Cabral Benedito J. Costa, Albuquerque Lidia M. P. C., Fernandes Fernando M. S. Silva // Theoretica chimica acta 1991. V. 78. № 4. P. 271–280
19. Aman Jindal and Sukumaran Vasudevan // J. Phys. Chem. B 2017. V.121. P. 5595–5600
20. Yeh T.-S., Chang Y.-P., Su T.-M., // J. Phys. Chem. 1994. V. 98. P. 8921-8929
21. Van Alsenoy C., Van Den Enden L., Schafer Lothar // Journal of Molecular Structure. 1984. V.108. P. 121-128
22. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian 03; Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 2003

## ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ МЕТОДОВ КР СПЕКТРОСКОПИИ ПРИ ОПРЕДЕЛЕНИИ СОДЕРЖАНИЯ НЕНАСЫЩЕННЫХ ЖИРНЫХ КИСЛОТ В РАСТИТЕЛЬНЫХ МАСЛАХ

К. В. Березин<sup>1</sup>, К.Н. Дворецкий<sup>2</sup>, М.Л. Чернавина<sup>1</sup>, А.В. Новоселова<sup>1</sup>, В.В. Нечаев<sup>3</sup>, Е.М. Антонова<sup>4</sup>, А. М. Лихтер<sup>5</sup>, В.В.Смирнов<sup>5</sup>, О.В. Гречухина<sup>6</sup>, М. В. Карташов<sup>6</sup>

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

<sup>2</sup>Саратовский государственный медицинский университет им. В.И. Разумовского

<sup>3</sup>Саратовский государственный технический университет им. Ю.А. Гагарина

<sup>4</sup>Астраханский Медицинский Университет

<sup>5</sup>Астраханский государственный университет

<sup>6</sup>Каспийский институт морского и речного транспорта

Зарегистрированы спектры КР пяти образцов масел семян подсолнечника и пяти образцов оливкового масла холодного отжима различных торговых марок в диапазоне 500-2000 см<sup>-1</sup>. В рамках методов ВЗLYP/6-31G(d)/6-31G(d,p)/6-31+G(d,p)/6-311G(d)/6-311G(d,p)/6-311+G(d,p) построены структурные модели восьми жирных кислот: олеиновой, линолевой, пальмитиновой, стеариновой, альфа-линоленовой, арахидоновой, эйкозапентаеновой и докозагексаеновой, а также в рамках метода ВЗLYP/6-31G(d) триглицеридов первых четырех из вышеописанных кислот. Рассчитаны колебательные волновые числа и интенсивности в спектрах ИК и КР. Используя супермолекулярный подход, проведено моделирование спектров КР оливкового масла и масла семян подсолнечника. Исследована зависимость относительной интенсивности колебательных полос  $\nu_{\text{эсп.}} = 1660 \text{ см}^{-1}$  и  $\nu_{\text{эсп.}} = 1445 \text{ см}^{-1}$  от содержания в маслах триглицеридов олеиновой и линолевой кислот. Исследована зависимость интенсивности этих полос от степени насыщенности жирных кислот. Построены экспериментальная и эмпирические зависимости для оценки относительного содержания триглицеридов олеиновой и линолевой кислот в смеси оливкового масла и масла семян подсолнечника. Обсуждается применимость методов теории функционала плотности совместно с колебательной спектроскопией для определения смесей растительных масел.

### ВВЕДЕНИЕ

Известно, что спектроскопия КР является чувствительным, неразрушающим методом анализа различных жиров и липидов. Структурные особенности триглицеридов различных кислот заметно проявляются в колебательных спектрах, позволяя использовать спектроскопию КР как инструмент для качественного и количественного определения кислотного состава жиров.

Большой интерес к определению жирнокислотного состава масел растительного происхождения связан с одной стороны с важной ролью жиров в правильном рационе питания, с другой стороны, регистрация изменений в типичном жирнокислотном составе растительных масел позволяет отличить натуральный продукт от его фальсификата. Особенно это касается наиболее часто подделываемого, оливкового масла, обладающего хорошими органолептическими свойствами и полезным воздействием на организм человека. Большое количество подделок связано с тем, что объемы мирового производства оливкового масла относительно небольшие, а цена его довольно высока по сравнению со многими другими растительными маслами. В связи с этим применению методов

спектроскопии КР для исследования жирнокислотного состава различных масел растительного и животного происхождения посвящено довольно много работ [1-10]. В частности, в работах [1,2] спектроскопия КР и последующий теоретический анализ методами частичных наименьших квадратов и главных компонент применялись для определения фальсификата оливкового масла при его разбавлении подсолнечным маслом и маслом фундука. В работе [3] показана возможность калибровки КР спектрометра для определения процентного содержания в оливковом масле триглицерида линолевой кислоты при выявлении его фальсификации путем разбавления растительными маслами. В работе [4] показано, что существует связь между интенсивностями экспериментальных КР полос с волновыми числами  $1265\text{ см}^{-1}$  и  $1655\text{ см}^{-1}$  и процентом содержания триглицеридов олеиновой и линолевой кислоты в маслах, которая может быть использована при определении фальсификации оливкового масла.

В работе [5] использованы методы средней и ближней ИК спектроскопии, а также спектроскопии КР для дифференциации и определения подлинности пищевых масел и жиров, отмечается, что метод КР спектроскопии по эффективности занимает промежуточное место между методами средней и ближней ИК спектроскопии. В работах [6,7] с помощью КР спектроскопии определялось процентное содержание конъюгированной линолевой кислоты в фотоизомеризованном соевом масле и коровьем молоке.

По данным хроматографического анализа различных масел [11] известно, что жирнокислотную основу оливкового масла и масла семян подсолнечника составляют олеиновые (омега-9) и линолевые (омега-6) кислоты, из которых последняя является незаменимой, т.е. не синтезируется организмом из других кислот, а попадает в него только с пищей. При планировании правильного рациона питания очень важно соблюдать баланс, как между незаменимыми полиненасыщенными кислотами омега-3 и омега-6, так и между полиненасыщенными и мононенасыщенными, из которых олеиновая кислота является самой распространенной. Таким образом, экспресс анализ жирнокислотного состава наиболее употребляемых в пищевом рационе растительных масел необходим не только для выявления их фальсификации, но и для планирования правильного рациона питания.

В данной работе мы использовали спектроскопию КР совместно с супермолекулярным моделированием [12] спектральных свойств ряда оливковых масел и масел семян подсолнечника для оценки относительного содержания в их смеси триглицеридов олеиновой и линолевой кислот.

#### МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА И РАСЧЕТА

Экспериментальные исследования проводились на КР спектрометре QEPRO-RAMAN фирмы Ocean Optics (США) в диапазоне  $300\text{ см}^{-1} - 2000\text{ см}^{-1}$ . Длина волны возбуждающего лазера  $785\text{ нм}$ . Разрешение прибора  $8\text{ см}^{-1}$ . Для исследования были выбраны 5 образцов масел семян подсолнечника и 5 образцов оливкового масла для которых экспериментально определен жирнокислотный состав [13]. Все образцы растительных масел были закуплены в продуктовых магазинах г. Саратова, РФ. Для построения экспериментальной зависимости и тестирования возможностей, полученных в данной работе эмпирических зависимостей интенсивности КР полос от относительного содержания в смеси масел триглицеридов олеиновой и линолевой жирных кислот дополнительно были зарегистрированы КР спектры четырех объемных смесей (20, 40, 60 и 80%) оливкового и масла семян подсолнечника соответственно.

Расчеты триглицеридов олеиновой, линолевой, стеариновой и пальмитиновой кислот проводились методом B3LYP/6-31G(d), а расчеты отдельных жирных кислот методами B3LYP/6-31G(d)/6-31G(d,p)/ 6-31+G(d,p)/6-311G(d,p)/ 6-311G(d)/ 6-311+G(d,p) по программе [14]. Дополнительно для исследования зависимости интенсивности некоторых КР полос от степени насыщенности кислот были рассчитаны структуры и КР спектры четырех жирных кислот, относящихся к классу омега-3: альфа линоленовой, арахиноновой, эйкозапентаеновой и докозагексаеновой.

Молекулярные модели оливкового масла и масла семян подсолнечника строились на основе четырех моделей жирных кислот (олеиновой (ОК), линолевой (ЛК), пальмитиновой (ПК) и стеариновой (СК)). Содержание этих кислот в моделях устанавливалось таким, чтобы оно соответствовало усредненному значению для пяти исследуемых масел. Затем значения нормировались, чтобы их сумма была равна 100%, так как содержание в маслах других типов жирных кислот не учитывалось. Таким образом в модели оливкового масла содержание ОК составило 73.9%, ЛК-9.4%, ПК-13.5%, СК-3.2%, а для модели масла семян подсолнечника 64.1, 25.9, 6.6 и 3.4% соответственно. Теоретическое моделирование процесса фальсификации оливкового масла маслом семян подсол-

нечника проводилась путем изменения взаимного отношения ОК и ЛК с учетом общего изменения содержания насыщенных кислот при переходе от модели оливкового масла к модели масла семян подсолнечника. Теоретические КР спектры моделей исследуемых масел строились по программе [15] в единицах сечения КР [16]. Полуширина всех лоренцевых контуров задавалась равной  $10 \text{ см}^{-1}$ . Для лучшего согласия с экспериментом вычисленные значения колебательных волновых чисел были скорректированы с помощью метода линейного масштабирования частот [17]. Интегральная интенсивность экспериментальных полос определялась путем подсчета количества пикселей в ограниченном снизу контуре при разрешении спектрограммы  $600 \text{ dpi}$ .

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Экспериментальные КР спектры пяти образцов оливкового масла и масла семян подсолнечника показаны на рис.1. Как видно из рис.1, в области  $500\text{-}2000 \text{ см}^{-1}$  в КР спектре рассматриваемых масел наблюдаются несколько интенсивных полос. Первые две из них  $\nu_{\text{эксп.}} = 1660 \text{ см}^{-1}$  и  $\nu_{\text{эксп.}} = 1445 \text{ см}^{-1}$  согласно расчету образованы колебаниями только ненасыщенных частей жирнокислотных цепей (синфазные валентные колебания связей  $\text{C}=\text{C}$ ), а вторая только колебаниями насыщенных частей (деформационные ножничные колебания  $\text{CH}_2$  групп и концевой  $\text{CH}_3$  группы). Следующая частично разрешенная полоса имеет два максимума первый  $\nu_{\text{эксп.}} = 1306 \text{ см}^{-1}$  согласно расчету образован деформационными крутильными колебаниями  $\text{CH}_2$  групп, а второй  $\nu_{\text{эксп.}} = 1270 \text{ см}^{-1}$  преимущественно деформационными синфазными колебаниями  $\text{CH}$  связей ненасыщенных фрагментов. Таким образом, изменение длины жирнокислотных цепей или степени их ненасыщенности естественным образом отражается на интенсивности этих полос, что позволяет использовать их для оценки относительного содержания в растительных маслах ненасыщенных кислот. Для нашего исследования в качестве аналитических мы выбрали первые две полосы поскольку они в КР спектре не перекрываются и для определения интегральных интенсивностей не нужно проводить разделение контуров. Оставшиеся КР полосы в этой частотной области образованы, согласно расчету, различными деформационными колебаниями  $\text{CH}$  связей и  $\text{CH}_2$  групп, а также валентными колебаниями  $\text{C}-\text{C}$  связей насыщенных участков цепей. Кроме этого, в спектре наблюдается слабая полоса  $\nu_{\text{эксп.}} = 1750 \text{ см}^{-1}$  образованная валентными колебаниями  $\text{C}=\text{O}$  связей карбонильных групп.

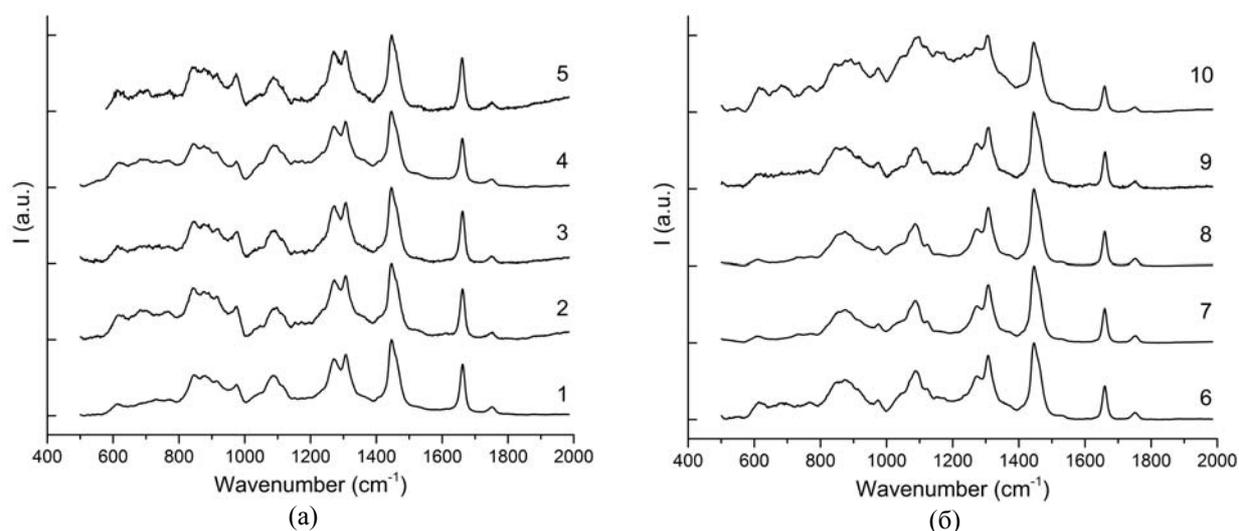


Рис. 1 Экспериментальные КР спектры масел семян подсолнечника (а) и оливковых масел (б) в области  $500\text{-}2000 \text{ см}^{-1}$ . Цифрами на графиках обозначены номера образцов масел.

На рис.2 представлено сравнение теоретических КР спектров ОК, ПК построенных с утроенными по величине значениями интенсивностей и их триглицеридов, а так же сравнение экспериментальных КР спектров двух типов растительных масел со спектрами соответствующих теоретических моделей.

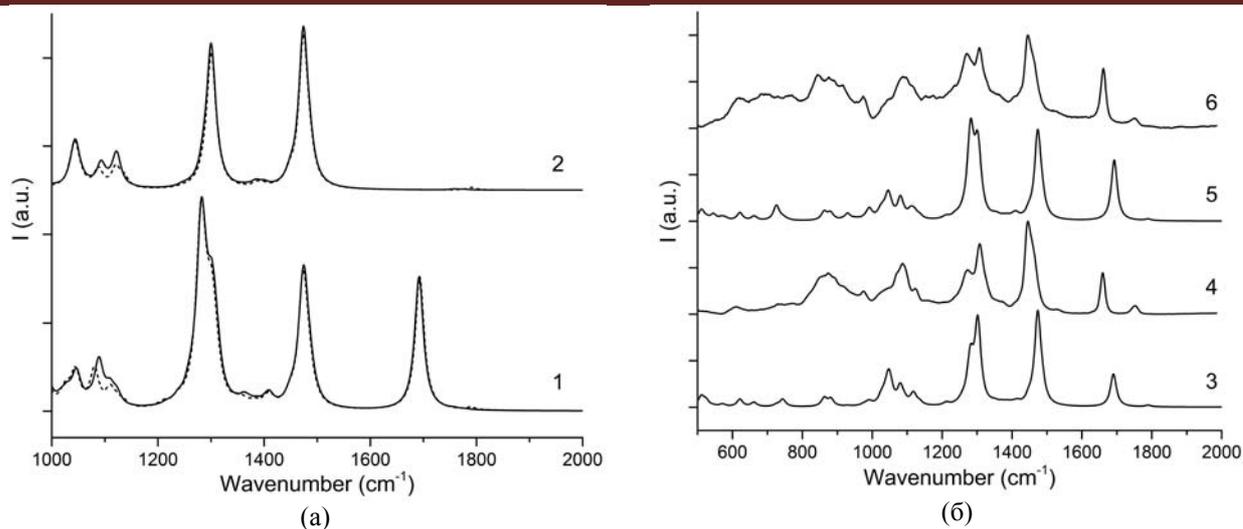


Рис 2. Теоретические КР спектры а) олеиновой кислоты 1, пальмитиновой кислоты 2 построенные с учетом по величине значениями интенсивностей (пунктирная линия) и их триглицеридов (сплошная линия), а также экспериментальные спектры образцов оливкового 4 и масла семян подсолнечника 6, и спектры теоретических моделей этих масел 3, 5 рассчитанные методом V3LYP/6-31G(d).

Как видно из рис.2, глицериновая сшивка оказывает слабое влияние на КР спектры жирных кислот в отличие, например, от ИК спектров [18]. Видно, что в данной спектральной области практически отсутствуют значимые частотные сдвиги, а интенсивность основных КР полос фактически прямо пропорциональна числу цепей. Это позволяет при теоретическом моделировании КР спектров растительных масел использовать структурные модели только отдельных жирных кислот, что существенно экономит время теоретических расчетов.

Чтобы установить, как волновые числа и относительная КР интенсивность исследуемых полос зависит от выбора теоретического уровня были сделаны расчеты рассматриваемых моделей жирных кислот с использованием шести стандартных базисных наборов. Результаты этих расчетов представлены в табл.1. Как видно из табл.1 относительная интенсивность рассматриваемых КР полос рассчитанная в рамках теоретического метода V3LYP довольно сильно зависит от типа базисного набора. Расширение базисного набора и особенно добавление в базис диффузных функций, приводит к существенному уменьшению значения относительной интенсивности для этих КР полос. Сравнение этих значений со средними экспериментальными (4.11 для оливковых масел и 2.69 для масел семян подсолнечника) показывает, что лучшее согласие достигается при использовании базисного набора 6-31G(d). Довольно большое расхождение в значениях относительных интенсивностей КР полос между теорией и экспериментом говорит о том, что использовать только теоретические данные полученные в данной работе для построения аналитической зависимости, которую можно было бы использовать в практических целях не представляется возможным. Следует заметить, что не смотря на значительные расхождения в значениях относительных интенсивностей их функциональная зависимость от содержания в маслах ОК и ЛК описывается в хорошем согласии с экспериментом. Функциональная зависимость носит нелинейный характер, так как КР интенсивность рассматриваемых полос по-разному зависит от числа колебаний их формирующих.

На рис 3 представлены теоретические зависимости интенсивности рассматриваемых КР полос от числа деформационных колебаний  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}_3$  групп и валентных колебаний связей  $\text{C}=\text{C}$  их образующих. Из рис.3 видно, что с увеличением степени ненасыщенности жирнокислотной цепи интенсивность КР полосы образованной валентными  $\text{C}=\text{C}$  колебаниями довольно быстро линейно возрастает. При равенстве длин жирнокислотных цепей с ростом степени насыщенности количество  $\text{CH}_2$  групп пропорционально уменьшается, что приводит к снижению интенсивности второй КР полосы, но спад интенсивности происходит значительно медленнее, чем ее рост в первом случае.

При теоретическом моделировании зависимости относительной интенсивности КР полос от содержания в смеси двух типов рассматриваемых масел олеиновой и линолевой кислот дополнительно учитывался тот факт, что среднее содержание насыщенных кислот в них различны. Так, например, в оливковом масле это значение равно 16.3%, а в масле семян подсолнечника 9.8%. Этот учет позволяет улучшить согласие с экспериментом, так как в интенсивность КР полосы  $\nu_{\text{ксп.}} = 1445$

$\text{см}^{-1}$  вносят вклад деформационные колебания как ненасыщенных так и насыщенных кислот. На рис.4а представлена зависимость учитывающая это изменение. Она носит логарифмический характер и описывается следующим выражением  $y = -0.09 \ln(x) + 0.83$ , где  $x$  - отношением олеиновой и линолевой кислот,  $y$  - разница между экспериментальными и теоретическими значениями относительной интенсивности КР полос смесей рассматриваемых масел.

**Таблица 1.**

Волновые числа ( $\text{см}^{-1}$ ) и относительные интенсивности (значения в скобках) двух КР полос в спектрах ненасыщенных жирных кислот и моделей оливкового масла и масла семян подсолнечника рассчитанные в рамках метода ВЗЛР с различными базисными наборами.

Жирные кислоты и модели масел	Базисные наборы					
	6-31 G(d)	6-31 G(d,p)	6-31+ G(d,p)	6-311 G(d)	6-311 G(d,p)	6-311+ G(d,p)
Олеиновая кислота	1517/1743 (3.38)	1502/1740 (3.26)	1493/1722 (1.71)	1502/1726 (2.48)	1491/1721 (2.32)	1489/1714 (1.59)
Линолевая кислота	1517/1746 (1.28)	1502/1744 (1.24)	1493/1725 (0.68)	1502/1730 (0.94)	1491/1725 (0.89)	1489/1717 (0.64)
Модель оливкового масла	1517/1744 (3.47)	1502/1741 (3.35)	1493/1722 (1.78)	1502/1727 (2.39)	1491/1722 (1.65)	1489/1714 (2.56)
Модель масла семян подсолнечника	1517/1746 (1.77)	1502/1744 (1.71)	1493/1725 (0.94)	1502/1730 (1.24)	1491/1725 (0.88)	1489/1717 (1.31)

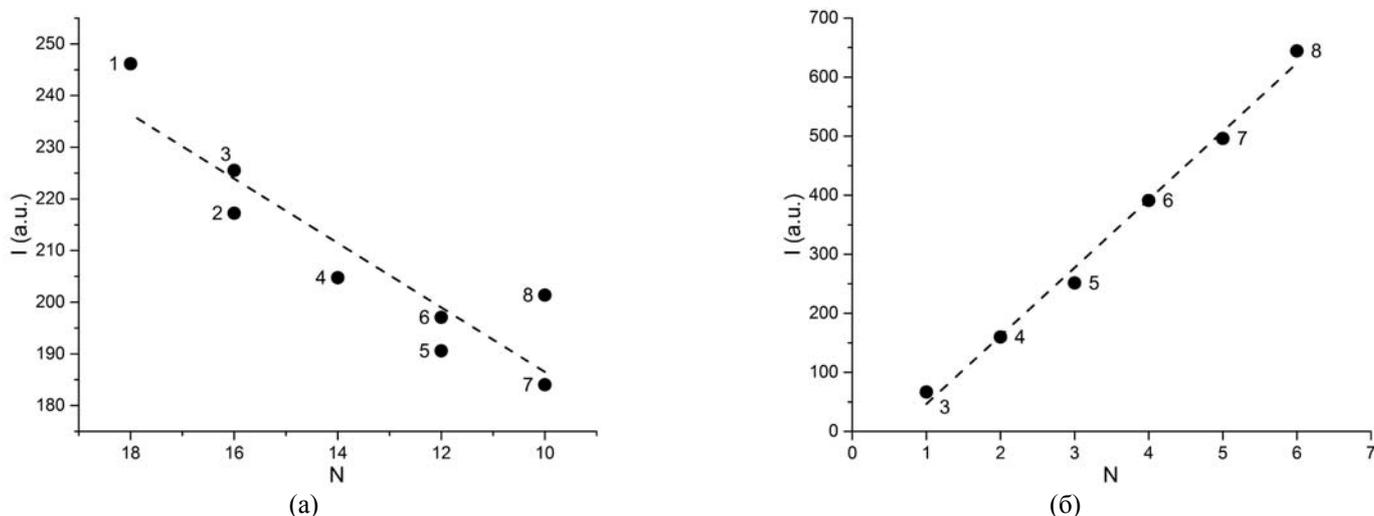


Рис. 3. Теоретическая зависимость интенсивности КР полос (а)  $\nu_{\text{ксп.}} = 1445 \text{ см}^{-1}$  от числа деформационных колебаний  $\text{CH}_2$ ,  $\text{CH}_3$  групп и (б)  $\nu_{\text{ксп.}} = 1660 \text{ см}^{-1}$  от числа валентных колебаний связей  $\text{C}=\text{C}$  в спектрах жирных кислот: пальмитиновая (1); стеариновая (2); олеиновая (3); линолевая (4);  $\alpha$ -линоленовая (5); архидоновая (6); эйкозопентаеновая (7) и докозагексаеновая (8) рассчитанная методом ВЗЛР/6-31G(d).

На рис.4б представлены теоретические зависимости относительной интенсивности двух КР полос от соотношений концентраций олеиновой и линолевой кислот, построенные с разной параметризацией. В первом случае зависимость построена только по данным теоретических расчетов методом ВЗЛР/6-31G(d). Во втором случае в качестве эмпирического параметра использовался коэффициент сдвига (0.78), который рассчитывался как среднее значение разницы между экспериментальными значениями относительной интенсивности КР полос и полученными в ходе моделирования КР спектров 10 образцов растительных масел представленных на рис.4а. Эта зависимость описывается уравнением  $y = -0.59 \ln(x) + 3.01$  ( $x, y$  описаны выше) и наиболее хорошо подойдет для определения процентного содержания олеиновой и линолевой кислот в смеси оливкового маслах и маслах семян подсолнечника близкой к отношению 1:1. В третьем случае в качестве корректирующего параметра была выбрана функциональная зависимость разницы между экспериментальными и

теоретическими значениями относительной интенсивности КР полос от соотношений концентраций олеиновой и линолевой кислот в исследуемых образцах растительных масел, также представленной на рис.4а. Эта зависимость описывается уравнением  $y = -0.50 \ln(x) + 3.06$ . Она является универсальной и может быть использована при оценке, как процентного содержания олеиновой и линолевой кислот в чистых маслах, так и в их смесях и соответственно для определения фальсификации оливкового масла холодного отжима маслом семян подсолнечника. При использовании этой зависимости средняя ошибка в определении доли оливкового масла в смеси двух масел составила 5%. Кроме этого, была построена зависимость основанная только на экспериментальных данных, которая описывается уравнением  $y = -0.49 \ln(x) + 2.91$  и может, также использоваться для определения фальсификации оливкового масла.

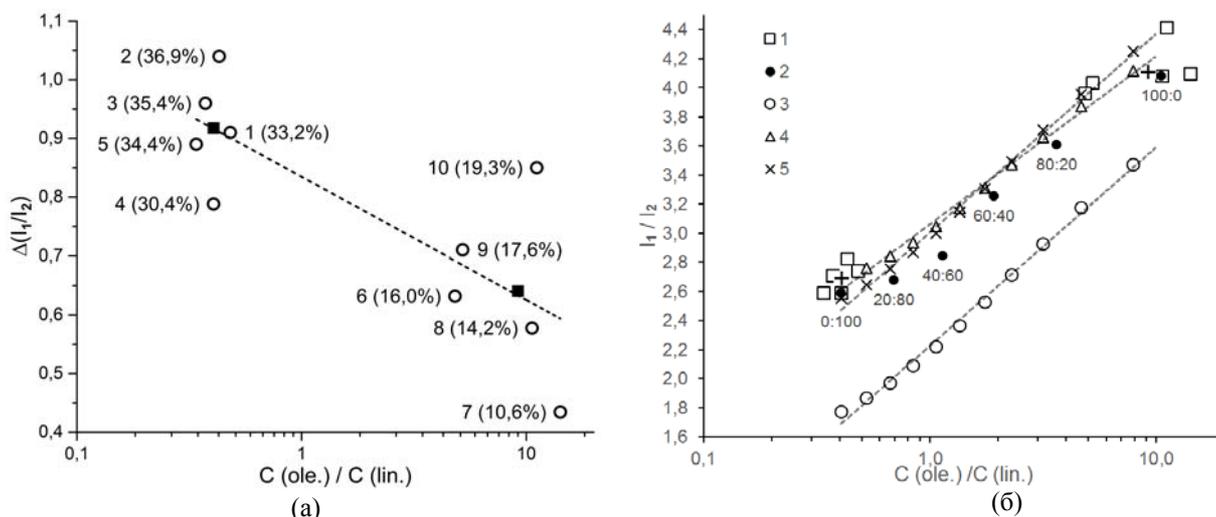


Рис.4. Разница (а) между экспериментальными значениями относительной интенсивности КР полос и полученными в ходе моделирования КР спектров 10 образцов растительных масел (цифрами на графике обозначены номера образцов: 1-5 масла семян подсолнечника, 6-10 оливковые масла; в скобках – разница между экспериментальными и теоретическими значениями в процентах). Квадратами на графике отображены средние значения для образцов масла семян подсолнечника и оливкового масла; пунктирной линией - аппроксимация зависимости разницы между экспериментальными и теоретическими значениями и отношением олеиновой и линолевой кислот в образцах. Зависимости (б) относительной интенсивности КР полос от соотношений концентраций олеиновой и линолевой кислот построенные с разной параметризацией: 3 – модель, построена на основе только теоретических расчетов; 4 – модель, построенная на основе теоретических расчетов с учетом эмпирического коэффициента сдвига 0.78; 5 – модель, построенная на основе теоретических расчетов с учетом эмпирического коэффициента сдвига с учетом функциональной зависимости представленной на рис.4а. Квадратами (1) показаны экспериментальные значения относительных интенсивностей КР полос для образцов оливкового масла (группа точек справа) и масел семян подсолнечника (слева); плюсами обозначены их средние значения. Точками (2) обозначены экспериментальные результаты для смеси одного из образцов оливкового масла и масла семян подсолнечника (цифрами внизу дано соотношение концентраций этих масел в смеси).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Зарегистрированы экспериментальные КР спектры пяти образцов оливкового масла холодного отжима и пяти образцов масел семян подсолнечника в диапазоне  $500 - 2000 \text{ см}^{-1}$ . В рамках теоретического метода V3LYP с шестью стандартными базисными наборами гауссовских функций 6-31G(d), 6-31G(d,p), 6-31+G(d,p), 6-311G(d), 6-311G(d,p), 6-311+G(d,p) построены структурные модели и рассчитаны спектральные характеристики восьми жирных кислот: олеиновой, линолевой, пальмитиновой, стеариновой, альфа-линоленовой, арахидоновой, эйкозапентаеновой и докозагексаеновой, а также в рамках метода V3LYP/6-31G(d) триглицеридов первых четырех кислот.

Используя супермолекулярный подход проведено моделирование колебательного КР спектра оливкового масла холодного отжима и масла семян подсолнечника. Установлена функциональная связь между относительной интенсивностью двух экспериментально наблюдаемых КР полос  $\nu_{\text{эксн.}} = 1660 \text{ см}^{-1}$  и  $\nu_{\text{эксн.}} = 1445 \text{ см}^{-1}$  от содержания в маслах триглицеридов олеиновой и линолевой кислот, которая хорошо аппроксимируется логарифмической зависимостью.

Показано, что использованные в работе теоретические методы без эмпирической коррекции не обеспечивают хорошего согласия с экспериментом при описании такой функциональной зависимости.

Проведено экспериментальное и теоретическое моделирование процесса разбавления оливкового масла холодного отжима маслом семян подсолнечника в результате которого получены три функциональные зависимости, которые могут быть использованы на практике, как для оценки относительного содержания олеиновых и линолиевых кислот в оливковых маслах и маслах семян подсолнечника, так и для оценки доли масла семян подсолнечника в смеси при фальсификации оливкового масла холодного отжима.

*Работа выполнена при финансовой поддержке в рамках государственных заданий высшим учебным заведениям и научным организациям в сфере научной деятельности, полученных от Минобрнауки. №: 3.9128.2017/БЧ.*

#### Литература

1. Díez López E.C., Bianchi G. and Goodacre R. // J. Agric. Food Chem. 2003. V. 51. P. 6145-6150
2. El Abassy R.M., Donfack P. and Materny A. // Journal of Raman Spectroscopy 2009. V. 40. P. 1284
3. Baeten Vincent, Aparicio Ramón // BASE [Enligne] 2000. V.4. P.196-203
4. Zhang X.F., Zou M.Q., Qi X.H. et al. // J. Raman Spectroscopy 2011. V.42. P. 1784 - 1788
5. Yang Hong, Irudayaraj Joseph, Paradkar Manish M. // Food Chemistry 2005. V. 93. P. 25–32
6. Bernuy B., Meurens M., Mignolet E. et al. // J. Agric. Food Chem. 2009. V. 57. P. 6524–6527
7. Meurens M., Baeten V., He Yan Sh. et al. // J. Agric. Food Chem. 2005. V.53. P.5831-5835
8. Abbas O., Fernández Pierna J. A., Codony R. et al. // Journal of Molecular Structure 2009. P. 924–926
9. Motoyama Michiyo, Ando Masahiro, Sasaki Keisuke et al. // Food Chem. 2016. V. 196. P. 411-418
10. El-Abassy R.M., Eravuchira P.J., Donfack B. et al. // Vibrational Spectroscopy 2011. V. 56. P. 3–8
11. Жиры, масла и производные продукты (всемирная организация здравоохранения продовольственная и сельскохозяйственная организация ООН) Изд. «Весь Мир» Москва 2007, 68 с.
12. Березин К. В., Шагаутдинова И. Т., Чернавина М. Л. и др. // Оптика и спектр. 2017. Т. 123. № 3. С. 472– 478
13. [https://roscontrol.com/category/produkti/rastitelnoe\\_maslo/](https://roscontrol.com/category/produkti/rastitelnoe_maslo/)
14. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian03, Revision B.03; Gaussian03, Inc., Pittsburgh PA. 2003
15. Файфель А. Б., Березин К. В., Нечаев В. В. Программа для моделирования и визуализации колебательных ИК и КР спектров по данным квантово-механических расчетов. Проблемы оптической физики. Саратов: Изд. ГосУНЦ “Колледж”. 2003. С. 74–77
16. Березин К. В., Кривохижина Т. В., Нечаев В. В. // Оптика и спектр. 2004. Т. 97. № 4. С. 559– 565
17. Березин К. В., Нечаев В. В., Кривохижина Т. В. // Оптика и спектр. 2003. Т. 94. № 3. С. 398– 401
18. Березин К.В., Лихтер А.М., Шагаутдинова И.Т., Чернавина М. Л., Нечаев В.В. Экспериментальный FT-IR спектр масла косточки винограда и молекулярные модели триглицеридов жирных кислот // Проблемы оптической физики и биофотоники. Под ред. Г.В. Симоненко, В.В. Тучин – Саратов : Изд - во «Новый ветер», 2016, с.95-99.

## ЛОГАРИФМИЧЕСКИЕ ПО КОНСТАНТЕ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ ВКЛАДЫ В ТОНКИЙ СДВИГ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ, ИСЧЕЗАЮЩИЕ В ПРЕДЕЛЕ $m_2 \rightarrow m_1$

С.В. Чурочкина

*Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского*

Рассматриваются вопросы, связанные с проблемой сходимости ряда теории возмущений в квазипотенциальном подходе. Обсуждаются новые логарифмические по константе тонкой структуры вклады в тонкий сдвиг уровней энергии, исчезающие в пределе  $m_2 \rightarrow m_1$ .

В то время как задача решения уравнений Шредингера и Дирака с кулоновским потенциалом решается точно, релятивистская задача на связанное состояние системы двух частиц даже в случае основного кулоновского взаимодействия требует все более тщательной разработки аппарата теории возмущений. Эта проблема решалась многими методами [1-4], и в частности с использованием метода квазипотенциала [5-7]. В работе [7] было выяснено, что квазипотенциальный подход дает два способа вычисления значения величины тонкого сдвига уровней энергии водородоподобного атома с точностью до пятого порядка по константе тонкой структуры  $\alpha$ . Помимо этого, зависимость квазипотенциала от относительных энергий и полной энергии позволяет увеличить точность вычислений для исследования поправок к тонкому сдвигу уровней энергии с точностью до шестого порядка по константе тонкой структуры [8-12].

При решении этой задачи возникает вопрос об устранении поправок типа  $\frac{\alpha^6 \mu^3}{m_1 m_2} \frac{m_2}{m_1} \ln \alpha^{-1} > \frac{\alpha^5 \mu^3}{m_1 m_2}$ , нарушающих сходимость ряда теории возмущений по степеням тонкой структуры (здесь  $\mu$  – приведенная масса атома,  $m_1$ ,  $m_2$  – массы легкой и тяжелой частиц, составляю-

щих атом, соответственно). Остановимся на нем более подробно. Для этого проанализируем более подробно вклады от двухфотонных диаграмм с обменом одним поперечным фотоном в низшем приближении.

Выпишем необходимое для дальнейшего анализа выражение для поправки к уровням энергии от двух диаграмм, описывающих обмен двумя параллельными фотонами (одним кулоновским и одним поперечным, и соответственно одним поперечным и одним кулоновским) в виде

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{par}}^{++} = & -\frac{\alpha^7 \mu^5}{2\pi^6} \int \frac{d^3 p \Omega_p N_p}{(p^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \int \frac{d^3 q \Omega_q N_q}{(q^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \int \frac{d^3 k}{\varepsilon_{1k} \varepsilon_{2k} (\vec{p} - \vec{k})^2 k_q} \times \\ & \times \frac{1}{\varepsilon_{1k} - E_1 + \varepsilon_{2k} - E_2} \left( \frac{1}{\varepsilon_{1q} - E_1 + \varepsilon_{2k} - E_2 + k_q} + \frac{1}{\varepsilon_{2q} - E_2 + \varepsilon_{1k} - E_1 + k_q} \right) \times \\ & \times \left\{ k^2 + \frac{M_{1k} M_{2k}}{M_{1q} M_{2q}} q^2 + (\vec{k} \vec{q}) \left( \frac{M_{1k}}{M_{1q}} + \frac{M_{2k}}{M_{2q}} \right) - \frac{(k^2 - q^2)^2}{k_q^2} \frac{M_{1k} M_{2k}}{(\varepsilon_{1k} + \varepsilon_{1q})(\varepsilon_{2k} + \varepsilon_{2q})} \right\}, \end{aligned} \quad (1)$$

которое было получено в [13]. Здесь  $k_q = |\vec{k} - \vec{q}|$ ,

$$\Omega_p = \frac{(\varepsilon_{1p} + m_1)(\varepsilon_{2p} + m_2)}{2\mu(\varepsilon_{1p} + \varepsilon_{2p} + m_1 + m_2)}, \quad N_p = \sqrt{\frac{(\varepsilon_{1p} + m_1)(\varepsilon_{2p} + m_2)}{4\varepsilon_{1p} \varepsilon_{2p}}}, \quad (2)$$

$$M_{ip} = \varepsilon_{ip} + m_i, \quad \varepsilon_{ip} = \sqrt{p^2 + m_i^2}, \quad i = 1, 2. \quad (3)$$

Соответствующее лидирующее выражение от двух диаграмм с перекрестными фотонными линиями (одной кулоновской и одной поперечной и соответственно симметричными одной поперечной и одной кулоновской) можно представить как

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{cr}}^{++} = & -\frac{\alpha^7 \mu^5}{\pi^6} \int \frac{d^3 p \Omega_p N_p}{(p^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \int \frac{d^3 q \Omega_q N_q}{(q^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \int \frac{d^3 k}{\varepsilon_{1k} \varepsilon_{2kpq}} \frac{1}{(\vec{p} - \vec{k})^2} \frac{1}{|\vec{k} - \vec{q}|} \times \\ & \times \frac{1}{(|\vec{k} - \vec{q}| + \varepsilon_{1k} - E_1 + \varepsilon_{2q} - E_2)(|\vec{k} - \vec{q}| + \varepsilon_{1p} - E_1 + \varepsilon_{2kpq} - E_2)} \times \\ & \times \left( \vec{p} \vec{q} - \frac{\vec{p}(\vec{k} - \vec{q})\vec{q}(\vec{k} - \vec{q})}{(\vec{k} - \vec{q})^2} \right). \end{aligned} \quad (4)$$

Низшее приближение для величины сдвига получается заменой радикалов типа  $\sqrt{p^2 + m_i^2} \approx m_i$  и учетом особой роли полюсного члена

$$\left( \frac{1}{\varepsilon_{1q} - E_1 + \varepsilon_{2k} - E_2 + k_q} + \frac{1}{\varepsilon_{2q} - E_2 + \varepsilon_{1k} - E_1 + k_q} \right) \approx \frac{2}{k_q}.$$

С помощью простых алгебраических преобразований легко получить, что

$$k^2 + q^2 + 2(\vec{k} \vec{q}) - \frac{(k^2 - q^2)^2}{k_q^2} = 4 \left( q^2 - \frac{\vec{q}(\vec{k} - \vec{q})\vec{q}(\vec{k} - \vec{q})}{k_q^2} \right). \quad (5)$$

Учитывая вышесказанное, объединим формулы (1) и (4). После этого произведем сдвиг  $\vec{k}' = |\vec{k} - \vec{q}|$ , вычтем из получившегося выражения итерацию, и снова сделаем замену  $\vec{k} = \vec{k}'$ , тогда

$$\begin{aligned} \Delta E = & \frac{\alpha^7 \mu^5}{\pi^6 m_1 m_2} \int \frac{d^3 p \Omega_p N_p}{(p^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \int \frac{d^3 q \Omega_q N_q}{(q^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \int \frac{d^3 k}{k^3} \frac{1}{(\vec{p} - \vec{k} + \vec{q})^2} \times \\ & \times \left( \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right) (p - q)^i (p - q)^j. \end{aligned} \quad (6)$$

Полученное выражение (6) совпадает с результатами работ [2,3,14].

Сравним выражение (1) с лидирующим вкладом от обмена одним поперечным фотоном [15]

$$\Delta E_{\text{par}}^{++} \cong -2 \frac{\alpha^7 \mu^5}{\pi^6 m_1 m_2} \int \frac{d^3 p \Omega_p N_p}{(p^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \int \frac{d^3 q \Omega_q N_q}{(q^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \int \frac{d^3 k}{(k^2 + \alpha^2 \mu^2)(\vec{p} - \vec{k})^2 k_q^2} \times$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left\{ k^2 + q^2 + 2(\vec{k}\vec{q}) - \frac{(k^2 - q^2)^2}{k_q^2} \right\} = \\
 & = -2 \frac{\alpha^7 \mu^5}{\pi^6 m_1 m_2} \int \frac{d^3 q \Omega_q N_q}{(q^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \int \frac{d^3 k}{(k^2 + \alpha^2 \mu^2) k_q^2} \left\{ 4(\vec{k}\vec{q}) + k_q^2 - \frac{(k^2 - q^2)^2}{k_q^2} \right\} = \\
 & = 2\Delta E_T(\alpha^4) = -2 \frac{\alpha^4 \mu^4}{m_1 m_2}. \tag{7}
 \end{aligned}$$

Суммарная поправка от двухфотонных обменов дается выражением из [16]

$$\begin{aligned}
 \Delta E = & \langle \phi'_C(\vec{p}) | (K_C G_0 K_T + K_T G_0 K_C)_{0F}^+ | \phi'_C(\vec{q}) \rangle + \langle \phi'_C(\vec{p}) | (K_{CT} + K_{TC})_{0F}^+ | \phi'_C(\vec{q}) \rangle - \\
 & - \langle \phi_C(\vec{p}) | v_C f(K_T)_{0F}^+ | \phi'_C(\vec{q}) \rangle - \langle \phi'_C(\vec{p}) | (K_T)_{0F}^+ f v_C | \phi_C(\vec{q}) \rangle. \tag{8}
 \end{aligned}$$

С помощью уравнения Шредингера можно показать, что итерационная диаграмма точно сводится к диаграмме обмена одним поперечным фотоном

$$\begin{aligned}
 \langle \phi_C(\vec{p}) | v_C f(K_T)_{0F}^+ | \phi'_C(\vec{q}) \rangle & = \langle \phi_C(\vec{p}) | v_C(\vec{p} - \vec{k}) \frac{1}{k^2 + \alpha^2 \mu^2} \frac{M_{1k} M_{2k}}{M_{1k} + M_{2k}} (K_T)_{0F}^+ | \phi'_C(\vec{q}) \rangle = \\
 & = \langle \phi_C(\vec{k}) | \frac{1}{2\mu} (k^2 + \alpha^2 \mu^2) \frac{1}{k^2 + \alpha^2 \mu^2} \frac{M_{1k} M_{2k}}{M_{1k} + M_{2k}} (K_T)_{0F}^+ | \phi'_C(\vec{q}) \rangle = \\
 & = \langle \phi'_C(\vec{k}) | (K_T)_{0F}^+ | \phi'_C(\vec{q}) \rangle = \Delta E_T(\alpha^4) = -\frac{\alpha^4 \mu^3}{m_1 m_2}. \tag{9}
 \end{aligned}$$

Таким образом, вклад от двухфотонных обменов не содержит вкладов  $\alpha^4$  и этим подтверждается вывод Баркера и Гловера [17] о том, что лидирующие вклады к  $S$ -уровням энергии, рассчитанные в кулоновской калибровке, обусловлены однофотонными обменами, а обмены большим числом фотонов приводят к поправкам  $(Z\alpha)^5$  и выше.

Остановимся на анализе выражения (6) более подробно. Используя соотношение

$$(\vec{p} - \vec{q})^2 - \frac{(\vec{k}(\vec{p} - \vec{q}))(\vec{k}(\vec{p} - \vec{q}))}{k^2} = p^2 - \frac{(\vec{p}\vec{k})^2}{k^2} + q^2 - \frac{(\vec{k}\vec{q})^2}{k^2} - 2\vec{p}\vec{q} + 2\frac{(\vec{p}\vec{k})(\vec{k}\vec{q})}{k^2},$$

в низшем приближении получаем

$$\begin{aligned}
 \Delta E & = \frac{1}{\pi^6} \frac{\alpha^7 \mu^5}{m_1 m_2} \int \frac{d^3 p N_p}{(p^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \int \frac{d^3 q N_q}{(q^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \int \frac{d^3 k}{k^3} \frac{1}{(\vec{p} - \vec{k} + \vec{q})^2} \times \\
 & \times \left( p^2 - \frac{(\vec{p}\vec{k})^2}{k^2} + q^2 - \frac{(\vec{k}\vec{q})^2}{k^2} - 2 \left( \vec{p}\vec{q} - \frac{(\vec{p}\vec{k})(\vec{k}\vec{q})}{k^2} \right) \right) = \\
 & = \frac{1}{\pi^6} \frac{\alpha^7 \mu^5}{m_1 m_2} \int \frac{d^3 p N_p}{(p^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \int \frac{d^3 q N_q}{(q^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \int \frac{d^3 k}{k^3} \frac{1}{(\vec{p} - \vec{k} + \vec{q})^2} \times \\
 & \times 2 \left( q^2 - \frac{(\vec{k}\vec{q})^2}{k^2} - \left( \vec{p}\vec{q} - \frac{(\vec{p}\vec{k})(\vec{k}\vec{q})}{k^2} \right) \right). \tag{10}
 \end{aligned}$$

В результате интегрирования по трем импульсам  $\vec{p}$  выражение (10) принимает вид

$$\Delta E = \frac{2}{\pi^4} \frac{\alpha^6 \mu^4}{m_1 m_2} \int \frac{d^3 k}{k^3} \int \frac{d^3 q N_{(\vec{q}-\vec{k})}}{((\vec{q}-\vec{k})^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \left[ 1 - \frac{(\vec{k}\vec{q})^2}{k^2 q^2} \right] \left[ 1 - \frac{\alpha \mu}{q} \operatorname{arctg} \frac{q}{\alpha \mu} \right]. \tag{11}$$

Дальше полученное выражение удобно проинтегрировать по угловой части трехвектора  $\vec{k}$ , выбрав за полярную ось вектор  $\vec{q}$ , тогда в низшем приближении (опускаем члены пропорциональные  $\alpha^6$ ) имеем

$$\Delta E = \frac{16}{\pi^2} \frac{\alpha^6 \mu^4}{m_1 m_2} \int_0^\infty dq q^2 \left( 1 - \frac{\alpha \mu}{q} \operatorname{arctg} \frac{q}{\alpha \mu} \right) \int_\varepsilon^\infty \frac{dk}{k} \int_{-1}^1 dz \frac{1 - z^2}{(q^2 + k^2 + \alpha^2 \mu^2 - 2kqz)^2}, \tag{12}$$

где граничный параметр  $\varepsilon$  определяется из  $\mu(Z\alpha)^2 \ll \varepsilon \ll \mu$ .

После интегрирования по  $z$  равенство (12) перепишем, введя замену  $k = k'\alpha\mu$ ,  $q = q'\alpha\mu$ ,

$$\Delta E = \frac{16}{\pi^2} \frac{\alpha^5 \mu^3}{m_1 m_2} \int_0^\infty dq q^2 \left( 1 - \frac{1}{q} \arctg q \right) \int_{\varepsilon/\alpha\mu}^\infty \frac{dk}{k} \left[ -\frac{1}{4k^2 q^2} \left( 4 - \frac{q^2 + k^2 + 1}{kq} \ln \frac{q^2 + k^2 + 1 + 2kq}{q^2 + k^2 + 1 - 2kq} \right) \right]. \quad (13)$$

Проинтегрируем (13) по импульсу  $k$  и после этого в получившемся выражении отбросим слабые, пропорциональные целочисленным степеням  $\alpha$ . Тогда

$$\Delta E \approx \frac{16}{\pi^2} \frac{\alpha^5 \mu^3}{m_1 m_2} \int_0^\infty dq q^2 \left( 1 - \frac{1}{q} \arctg q \right) \frac{4}{3} \frac{1}{(q^2 + 1)^2} \ln \frac{\alpha\mu}{\varepsilon} = \frac{8}{3\pi} \frac{\alpha^5 \mu^3}{m_1 m_2} \ln \frac{\alpha\mu}{\varepsilon}. \quad (14)$$

Этот результат совпадает с данными работы [14]. Дополнительные логарифмические поправки по константе тонкой структуры и по параметру отношения масс частиц возникают лишь в шестом порядке по  $\alpha$ . Для иллюстрации данного утверждения рассмотрим следующий интеграл, входящий в выражение (6),

$$Y = \frac{1}{\pi^6} \frac{\alpha^7 \mu^5}{m_1 m_2} \int \frac{d^3 p N_p}{(p^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \int \frac{d^3 q N_q}{(q^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \int \frac{d^3 k}{k^3} \frac{(\vec{p} - \vec{q})^2}{(\vec{p} - \vec{k} + \vec{q})^2}. \quad (15)$$

После тривиальных алгебраических преобразований, в которых используется соотношение

$$\frac{(\vec{p} - \vec{q})^2}{(\vec{p} - \vec{k} + \vec{q})^2} = 1 - \frac{k^2 - 2\vec{k}(\vec{p} - \vec{q})}{(\vec{p} - \vec{k} + \vec{q})^2},$$

и после вычисления интеграла по трехимпульсу  $\vec{q}$ , получаем

$$Y \approx \frac{1}{\pi^4} \frac{\alpha^6 \mu^4}{m_1 m_2} \int \frac{d^3 p N_p}{(p^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \int \frac{d^3 k}{k^3} \left( \frac{k^2}{(\vec{p} - \vec{k})^2} - 1 + \frac{2p^2}{(\vec{p} - \vec{k})^2} \right). \quad (16)$$

Вычисление интегралов по трехимпульсу  $\vec{k}$  приводит к следующим результатам:

$$\int \frac{d^3 k}{k^3} \left( \frac{k^2}{(\vec{p} - \vec{k})^2} - 1 \right) = 2\pi \left( \frac{k-p}{p} \ln \left| \frac{k+p}{k-p} \right| + 2 \ln \frac{k+p}{k} \right), \quad (17)$$

$$\int \frac{d^3 k}{k^3 (\vec{p} - \vec{k})^2} = \frac{2\pi}{p} \left( -\left( \frac{1}{k} - \frac{1}{p} \right) \ln \left| \frac{k+p}{k-p} \right| - \frac{2}{p} \ln \frac{k+p}{k} \right). \quad (18)$$

Итак,

$$Y \approx \frac{2}{\pi^3} \frac{\alpha^6 \mu^4}{m_1 m_2} \int \frac{d^3 p N_p}{(p^2 + \alpha^2 \mu^2)^2} \left\{ \left( 1 + \frac{k}{p} - \frac{2p}{k} \right) \ln \left| \frac{k+p}{k-p} \right| - 2 \ln \frac{k+p}{k} \Big|_{k=\varepsilon}^{k=\alpha\mu} + \left( 1 + \frac{k}{p} - \frac{2p}{k} \right) \ln \left| \frac{k+p}{k-p} \right| - 2 \ln \frac{k+p}{k} \Big|_{k=\alpha\mu}^{k=\infty} \right\}. \quad (19)$$

Первое слагаемое (19) имеет основной вклад, аналогичный полученному в (14), а именно

$$\boxed{\times} \quad (20)$$

Второе слагаемое (19) после замены  $p = p'm_2$  принимает вид

$$Y_2 \approx \frac{8}{\pi^2} \frac{\alpha^6 \mu^3}{m_1 m_2} \frac{\beta}{1+\beta} \int_0^\infty \frac{dp p^2 N_{1p} N_{\beta p}}{(p^2 + \gamma^2)^2} \left\{ 2 + 2 \ln \frac{p+\gamma}{p} - 2 \ln \frac{\gamma}{p} + \left( \frac{2p}{\gamma} - \frac{\gamma}{p} - 1 \right) \ln \left| \frac{p+\gamma}{p-\gamma} \right| \right\}, \quad (21)$$

где  $\gamma = \alpha\beta/(1+\beta)$ ,  $\beta = m_1/m_2$ .

Остановимся более подробно на следующем слагаемом из выражения (21)

$$I^{\ln} = -\frac{16}{\pi^2} \frac{\alpha^6 \mu^3}{m_1 m_2} \frac{\beta}{1+\beta} \int_0^\infty \frac{dp p^2 N_{1p} N_{\beta p}}{(p^2 + \gamma^2)^2} \ln \frac{\gamma}{p}. \quad (22)$$

Используя формулу

$$1 - N_{1p} = \frac{p^2}{4\sqrt{p^2+1}(\sqrt{p^2+1+1})} + \frac{p^4}{32(p^2+1)(\sqrt{p^2+1+1})^2} + \frac{p^6(3+N_{1p})}{64(p^2+1)^{3/2}(\sqrt{p^2+1+1})^3(1+N_{1p})^3},$$

и тождество

$$N_{\beta p} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( 1 + \frac{\beta}{\sqrt{p^2 + \beta^2}} \left( 1 + \sqrt{\frac{\sqrt{p^2 + \beta^2} + \beta}{\sqrt{p^2 + \beta^2}}} \right)^{-1} \right),$$

получаем

$$I^{\ln} \approx -\frac{16}{\pi^2} \frac{\alpha^6 \mu^3}{m_1 m_2} \frac{\beta}{1 + \beta} \int_0^{\infty} \frac{dp p^2}{(p^2 + \gamma^2)^2} \ln \frac{\gamma}{p} \left( N_{\beta p} - \frac{p^2}{8(p^2 + 1)} \frac{1}{\sqrt{2}} \left( 1 + \frac{\beta}{\sqrt{p^2 + \beta^2}} \right) \right). \quad (23)$$

Первое слагаемое (23) пропорционально  $\ln \alpha^{-1}$ , второе –  $\ln(\alpha\beta)^{-1}$ , а третье

$$\begin{aligned} I^{\ln} &\approx \frac{2}{\sqrt{2}\pi^2} \frac{\alpha^6 \mu^3}{m_1 m_2} \frac{\beta^2}{1 + \beta} \int_0^{\infty} \frac{dp}{(p^2 + 1)\sqrt{p^2 + \beta^2}} \ln \frac{\gamma}{p} \approx \\ &\approx -\frac{2}{\sqrt{2}\pi^2} \frac{\alpha^6 \mu^3}{m_1 m_2} \frac{\beta^2}{1 + \beta} \left( \ln \alpha^{-1} \ln \beta^{-1} + \frac{1}{2} \ln^2 \beta^{-1} \right). \end{aligned} \quad (24)$$

В интервале  $\beta \leq p \leq 1$ , где возникают логарифмические по массовому параметру поправки, первое слагаемое (23) можно представить в виде

$$I_1^{\ln} \approx -\frac{16}{\sqrt{2}\pi^2} \frac{\alpha^6 \mu^3}{m_1 m_2} \frac{\beta}{1 + \beta} \int_0^{\infty} \frac{dp}{p^2} \ln \frac{\gamma}{p} \approx -\frac{16}{\sqrt{2}\pi^2} \frac{\alpha^6 \mu^3}{m_1 m_2} \frac{\beta}{1 + \beta} \left\{ \left( \frac{1}{\beta} - 1 \right) \ln \alpha^{-1} - \ln \beta^{-1} \right\}. \quad (25)$$

Обсудим теперь некоторые тонкие моменты, касающиеся вкладов  $\alpha^6 \ln \alpha^{-1}$ , которые, как нам кажется, которые могли быть упущены в ходе дискуссии в работах [18-20].

В статье [20] констатируется получение различных вкладов относительного порядка  $\alpha^6 \ln \alpha^{-1}$  для уровней энергии позитрония. Между тем, как отмечалось выше, в работе [18] речь шла об атоме мюония, а в работе [19] об атоме позитрония.

Наиболее просто сравнить результаты для прямого канала, приравняв массы  $m_1 = m_2$ .

Однако, в поправках (24) и (25) существенна зависимость от массового коэффициента  $\beta$ . При  $m_1 = m_2$  поправка (24) зануляется, но она существует при  $m_1 \neq m_2$ . Поправка (25) содержит величину  $\ln \alpha^{-1}$  с коэффициентом  $\left( \frac{1}{\beta} - 1 \right)$ . При  $\beta = 1$ , она обращается в нуль, а при  $m_1 \neq m_2$  существуют поправки

совершенно различной величины, пропорциональные  $\ln \alpha^{-1}$  и  $\beta \ln \alpha^{-1}$  [21].

Что касается поправок типа (24), то они существенно отличают спектр атомов мюония и позитрония. Но, возможно, при дискуссии они не учитывались из-за малости (коэффициент  $\beta^2$ ).

Поправки типа (25)  $\frac{\alpha^6 \mu^3}{m_1 m_2} \ln \alpha^{-1}$  и  $\frac{\alpha^6 \mu^3}{m_1 m_2} \beta \ln \alpha^{-1}$  надо считать отдельно, непосредственный пе-

реход к спектру позитрония не оправдан. Однако нельзя сказать однозначно, принимали ли это во внимание участники дискуссии.

Что касается логарифмических по отношению масс частиц  $\beta$  вкладов то, как видно из формулы (24), они при анализе диаграммы с перекрестными кулоновской и поперечной фотонными линиями возникают лишь в шестом порядке по константе тонкой структуры и пропорциональны

$$\frac{\alpha^6 \mu^3}{m_1 m_2} \beta^2 \ln^2 \beta^{-1}.$$

#### Литература

1. Bethe H.A., Salpeter E.E. // Physical Review 1951. V.84. № 6. P.1232-1242
2. Fulton T., Martin P.C. // Physical Review 1954. V.95. № 3. P.811-822
3. Grotch H., Yennie D.R. // Reviews of Modern Physics 1969. V.41. № 2. P.350-374
4. Gross F. // Physical Review 1969. V.186. № 5. P.1448-1462
5. Logunov A.A., Tavkhelidse A.N. // Nuovo Cimento 1963. V.29. № 2. P.380-399
6. Kadyshevsky V.G. // Nuclear Physics B 1968. V.6. № 2. P.125-148
7. Тюхтяев Ю.Н. // Теоретическая и математическая физика 1982. Т.53. №3. С.419-428
8. Бойкова Н.А., Клещевская С.В., Тюхтяев Ю.Н. и др. // Ядерная физика 2001. Т.64. №8. С.1437-1441

9. Бойкова Н.А., Бойкова О.А., Клещевская С.В. и др. // Теоретическая физика 2007. №8. С.124-129.
10. Boikova O.A., Boikova N.A., Kleshchevskaya S.V. et al. // Proceedings of SPIE 2007. V.6537. P.65370K
11. Бойкова Н.А., Бойкова О.А., Клещевская С.В. и др. // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика 2008. Т.8. №2. С.42-46
12. Бойкова О.А., Клещевская С.В., Тюттяев Ю.Н. и др. // Ядерная физика 2010. Т.73. № 6. С.1024-1032
13. Бойкова Н.А., Клещевская С.В., Тюттяев Ю.Н. и др. // Ядерная физика 2003. Т.66. №5. С.925-933
14. Ньюнко Н.Е., Тюттяев Ю.Н., Фаустов Р.Н. // Сообщение P2-7493. ОИЯИ. 1973.
15. Бойкова Н.А., Бойкова О.А., Клещевская С.В. и др. // Когерентная оптика и оптическая спектроскопия 2007, с.217-220.
16. Тюттяев Ю.Н., Фаустов Р.Н. // Сообщение P2-86-281. ОИЯИ. 1986.
17. Barker W.A., Glover F.N. // Physical Review 1955. V. 99. № 1. P.317-324
18. Khriplovich I.B., Milstein A.I., Yelkhovsky A.S. // Physics Letters B 1992. V.282. № 1-2. P.237-242
19. Fell R.N. // Physical Review Letters 1992. V.68. № 1. P.25-28
20. Fell R.N., Khriplovich I.B., Milstein A.I. et al. // Physics Letters A 1993. V.181. № 2. P.172-174
21. Бойкова О.А., Бойкова Н.А., Клещевская С.В. и др. // Проблемы оптической физики и биофотоники 2009, с.118-123.

## СУПРАМОЛЕКУЛЯРНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ И ЭНЕРГИЯ ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ В ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ СМЕСЯХ НАНОАЛМАЗОВ И ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

И.Л. Пластун, А.Н. Бокарев, А.А.Захаров, А.А.Наумов  
*Саратовский государственный технический университет им. Ю.А. Гагарина*

Показано, что между лекарственными препаратами и карбоксилированными детонационными наноалмазами может осуществляться значительное супрамолекулярное взаимодействие, которое характеризуется наличием большого числа слабых и средних водородных связей, обеспечивающих высокую устойчивость супрамолекулярных ансамблей. Образованные водородные связи могут рассматриваться как один из базовых механизмов в реализации адресной доставки лекарственных средств и удержания препарата в клетках организма, существенно повышая, таким образом, терапевтическую эффективность лекарств.

В настоящее время множество исследований в различных сферах науки связано с изучением биомолекул и их взаимодействия с углеродными наночастицами. Одной из наиболее интенсивно развивающихся научных отраслей, связанных с нанотехнологиями, является применение наноструктур в биологии и медицине [1]. В частности, существенный интерес представляет использование алмазоподобных соединений, называемых диамантоидами или наноалмазами [2], в качестве средства доставки и удержания в клетках лекарственных и диагностических препаратов [3]. Подобные возможности достигаются за счёт образования комплексных соединений в двухкомпонентных смесях наноалмазов с лекарственными средствами.

Образование межмолекулярных водородных связей относятся к так называемому супрамолекулярному взаимодействию, когда за счёт большого числа связей средней силы можно получить достаточно устойчивый молекулярный комплекс [4]. Комплексообразование за счёт водородных связей можно рассматривать как один из базовых механизмов для реализации адресной доставки лекарственных средств и повышения терапевтической эффективности лекарства, что всегда было одной из наиболее актуальных и востребованных задач фармакологии и биохимии. В экспериментальных работах (см., например, [5,6]) механизм адресной доставки основывается на контролируемой загрузке лекарственного средства на поверхность в процессе адсорбции в растворах с уровнем рН от 7 и выше, а затем высвобождении молекул препарата с поверхности наноалмаза исключительно в опухолевых клетках, имеющих более кислый уровень рН по сравнению со здоровыми клетками.

Процесс молекулярного моделирования углеродных наноструктур требует большого количества вычислительных ресурсов и времени в зависимости от сложности структуры и числа атомов углерода в составе молекулярного комплекса. По этой причине успешное моделирование крупных алмазоподобных структур в соединении с другими молекулами, и особенно в присутствии водного окружения, является очень трудоёмкой процедурой. В связи с этим возникает необходимость использования в расчётах только небольших алмазоподобных наночастиц. Наименьшим алмазоподобным углеводородом является адамантан (C<sub>10</sub>H<sub>16</sub>) (Рис.1а). Данная молекула является основным

«строительным блоком» для более крупных алмазоподобных наноструктур, поэтому адамантан наиболее привлекателен как основа аппроксимационного моделирования более сложных алмазоподобных структур, в том числе наноалмазов. В настоящей работе рассматривается модифицированный адамантан, который содержит 4 карбоксильных группы  $\text{COOH}$ , называемый 1,3,5,7-адамантантетракарбоновой кислотой ( $\text{C}_{14}\text{H}_{16}\text{O}_8$ ) (АТКК) (Рис.1б). Возможность использования данного вещества в качестве объекта, моделирующего взаимодействие карбоксилированных наноалмазов с лекарственными препаратами, была детально обоснована нами в [7].

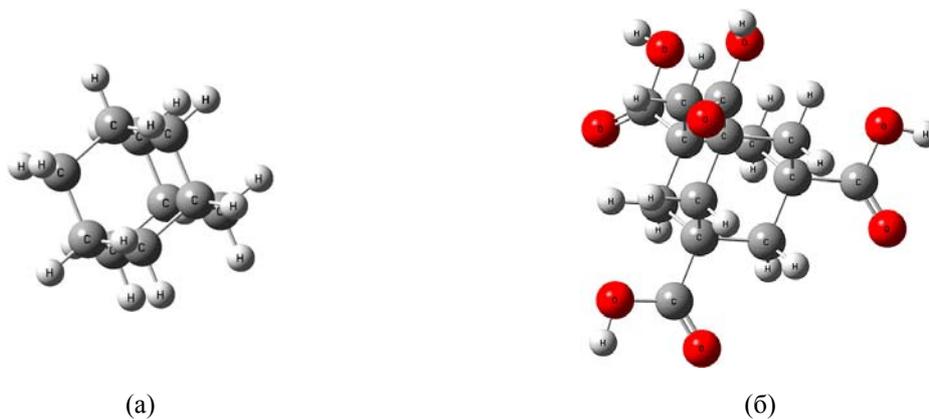


Рис.1. Структура «чистого» адамантана (а) и адамантана, обогащённого 4 карбоксильными группами  $\text{COOH}$  (1,3,5,7-адамантантетракарбоновой кислоты) (б)

Моделирование структуры и расчёт спектров молекул и их комплексов осуществлялись на основе метода теории функционала плотности (ТФП) [8] с использованием функционала B3LYP с использованием базисного набора 6-31G(d) [9].

В расчётах был использован программный комплекс Gaussian 09 [10], который широко применяется для решения задач молекулярного моделирования в различных сферах вычислительной физики и химии.

В настоящее время одними из известных и широко применяемых для лечения онкологических заболеваний препаратов являются доксорубицин ( $\text{C}_{27}\text{H}_{29}\text{NO}_{11}$ ) и митоксантрон ( $\text{C}_{22}\text{H}_{28}\text{N}_4\text{O}_6$ ), относящиеся к антрациклиновому ряду. Механизмы противоопухолевой активности антрациклинов, и в частности, доксорубицина [11] и митоксантрона [12] хорошо известны фармацевтам. Одним из механизмов действия препаратов, вызывающим гибель опухолевой клетки, является процедура интеркаляции, когда молекула доксорубицина встраивается между двумя соседними нуклеотидами в ДНК, при этом образуется прочное взаимодействие между ДНК и антрациклиновым кольцом доксорубицина, благодаря чему нарушается синтез ДНК [11,12]. К сожалению, доксорубицин и митоксантрон, как и большинство противоопухолевых препаратов, токсичны. При лечении приходится ограничивать вводимую дозу, поскольку антрациклины могут оказывать неблагоприятное воздействие на различные органы человека. Другим фактором, препятствующим успешному лечению раковых заболеваний, является химиорезистентность клеток, что выражается в основном в оттоке лекарственных препаратов из раковых клеток [12]. В связи с этим возникает необходимость удерживать лекарственные препараты в клетках на более длительный срок с целью нераспространения лекарства по всему организму и максимально длительного удержания лекарства в клетке.

Одним из средств удержания лекарства в клетке опухоли являются карбоксилированные наноалмазы (НА). Экспериментальные работы свидетельствуют о существенном повышении терапевтической активности доксорубицина [5] и митоксантрона [6] в присутствии карбоксилированных наноалмазов. Однако, механизм повышения терапевтической активности в данных экспериментальных исследованиях не был объяснён, что обуславливает актуальность проведённого нами молекулярного моделирования.

В результате молекулярного моделирования были получены структурные схемы и рассчитаны ИК-спектры доксорубицина, митоксантрона и их комплексов с карбоксилированными наноалмазами в кристаллической фазе и в водном окружении. Спектры и структура лекарственных препаратов показаны на рис.2 и 3.

В высокочастотной области рассчитанного ИК-спектра хорошо заметны пики (1-5 на рисунке 2б), соответствующие валентным колебаниям связей О-Н (1-5 на рисунке 2а), которые могут участвовать в водородном связывании.

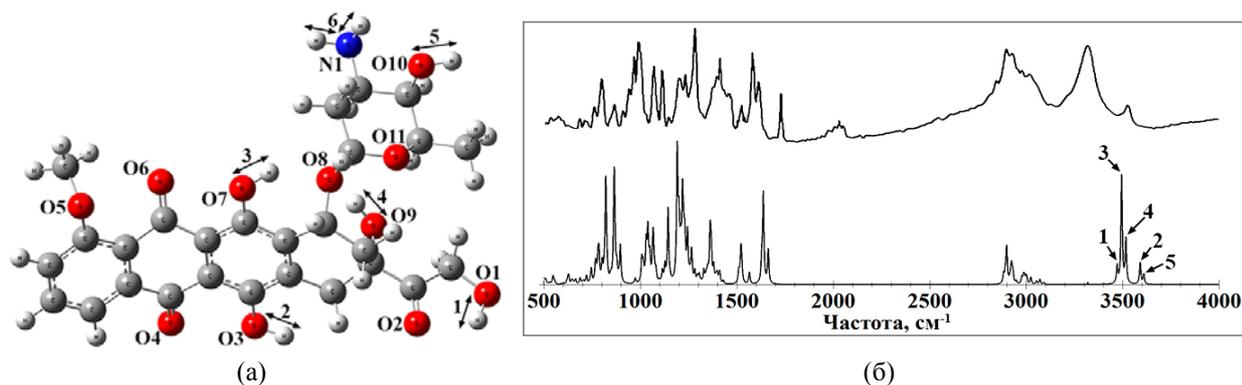


Рис. 2. Структура (а), рассчитанный ИК-спектр (б) (внизу) и экспериментальный ИК-спектр (б) (вверху) доксорубицина

В высокочастотной области рассчитанного ИК-спектра митоксантрона стоит отметить пики 1-4 и 5-8 (рисунок 3б), соответствующие валентным колебаниям связей О-Н (1-4 на рисунке 3а) и N-H (5-8 на рисунке 3а). Все выделенные пики хорошо согласуются с экспериментальными данными. По причине наличия в составе молекул доксорубицина и митоксантрона большого количества атомов, которые могут участвовать в образовании водородных связей в качестве донора или акцептора, весьма вероятна ситуация, при которой водородное связывание молекул препаратов с поверхностью наноналмазов будет происходить с участием разных атомов.

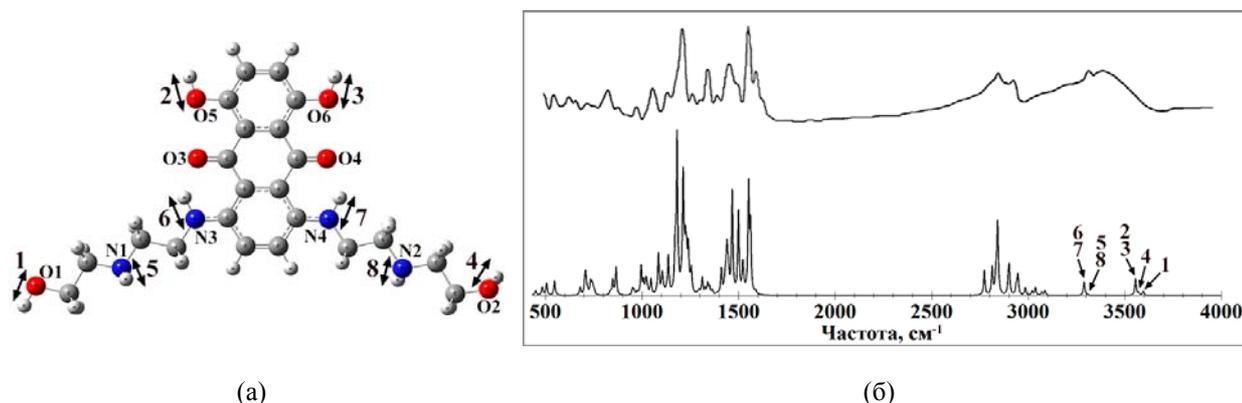


Рис. 3. Структура (а), рассчитанный ИК-спектр (б) (внизу) и экспериментальный ИК-спектр (б) (вверху) митоксантрона

Данное предположение требует численной проверки на основе анализа структуры образующегося комплекса и силы межмолекулярных водородных связей, предполагающей рассмотрение различных вариантов комплексообразования.

В исследованиях рассматривались различные варианты взаимного расположения АТКК и доксорубицина, АТКК и митоксантрона с целью проверки возможности образования водородных связей между атомами карбоксильной группы АТКК и всеми атомами молекул препаратов, которые могут выступать в роли донора или акцептора. По результатам проведенных процедур оптимизации геометрии различных вариантов взаимного расположения АТКК и препаратов было получено по десять вариантов комплексов АТКК-доксорубицин и АТКК-митоксантрон, в которых образуется минимум одна водородная связь. Для каждого комплекса был рассчитан ИК-спектр.

Сила образовавшихся водородных связей оценивалась по длине водородного мостика, сдвигу частоты валентных колебаний О-Н связей в ИК-спектрах молекулярных комплексов относительно ИК-спектра отдельных молекул, а также по энергии связи, которая рассчитывалась по эмпирической формуле Иогансена:

$$-\Delta H = 0,3 \cdot \sqrt{\Delta\nu - 40}, \quad (1)$$

где  $\Delta\nu$  - величина частотного сдвига для валентных колебаний О-Н связей ( $\Delta H$  в ккал/моль,  $\Delta\nu$  в  $\text{см}^{-1}$ ).

В таблице 1 представлены параметры водородных связей для молекулярного комплекса доксорубицин - 1,3,5,7-адамantanтетракарбонвая кислота.

Таблица 1.

Рассчитанные параметры водородных связей в десяти вариантах комплекса 1,3,5,7-адамantanтетракарбонвая кислота-доксорубицин

№ комп. / № связи	Длина Н-связи $R_{\text{H...O}}$ , Å	Длина водородного мостика $R_{\text{OH...O}}$ , Å	Частота $\nu$ , $\text{см}^{-1}$	Частотный сдвиг $\Delta\nu$ , $\text{см}^{-1}$	Энергия связи $-\Delta H$ , ккал/моль	Интенсивность $I_{\text{IR}}$ , км/моль
1/1	1,74	2,74 (ОН...О)	3150	373	5,474	1697,4
2/1	1,79	2,78 (ОН...О)	3207	316	4,984	1510,6
2/2	1,80	2,78 (ОН...О)	3376	96	2,245	1448,4
3/1	1,96	2,95 (ОН...О)	3350	173	3,460	1589,9
3/2	1,82	2,80 (ОН...О)	3350	241	4,253	1589,9
4/1	1,78	2,77 (ОН...О)	3314	209	3,900	1792,9
5/1	1,77	2,76 (ОН...О)	3191	332	5,126	1892,2
6/1	1,81	2,80 (ОН...О)	3251	272	4,570	1287,7
7/1	1,81	2,80 (ОН...О)	3213	310	4,930	1244,9
8/1	1,74	2,76 (ОН...N)	2797	726	7,857	2672,5
9/1	1,83	2,82 (ОН...О)	3187	336	5,161	1002,4
9/2	1,88	2,86 (ОН...О)	3362	248	4,327	1159,5
10/1	1,80	2,79 (ОН...О)	3243	280	4,648	1264,5

Из данных таблицы 1 следует, что наиболее сильной является водородная связь, которая образуется с участием связи О-Н в карбоксильной группе АТКК и атома азота из аминогруппы в доксорубине (восьмой комплекс), что проявляется в наибольшем частотном сдвиге её колебания в длинноволновую область ( $726 \text{ см}^{-1}$ ). При этом энергия данной водородной связи составляет 7,857 ккал/моль, а интенсивность спектрального пика – 2672,5 км/моль, что значительно превышает значения интенсивности для прочих связей. Данные параметры соответствуют средней водородной связи, приближающейся к сильной.

Согласно классификации [4], водородные связи для большинства молекулярных комплексов АТКК-доксорубицин можно охарактеризовать как связи средней силы, так как величина частотного сдвига для них варьируется от  $209 \text{ см}^{-1}$  до  $726 \text{ см}^{-1}$ , а энергия связи не превышает 8 ккал/моль.

Всего в десяти комплексах АТКК-доксорубицин образуется 13 водородных связей, 6 из которых по совокупности параметров можно отнести к средним по силе водородным связям, а 7 к слабым. Наиболее сильной является связь, образовавшаяся с участием атома азота молекулы доксорубина (N1 на рисунке 2а) и ковалентной связи О-Н в карбоксильной группе АТКК, что выражается наибольшим частотным сдвигом валентных колебаний данной связи на  $726 \text{ см}^{-1}$  в длинноволновую область. Среднее значение энергии связи для тринадцати водородных связей составляет 4,7 ккал/моль.

Результаты расчётов, представляющие собой суперпозицию ИК-спектров десяти комплексов АТКК-доксорубицин, на рисунке 4 сравниваются с экспериментальным ИК-спектром порошка комплекса НА-доксорубицин. Рассчитанный и экспериментальный ИК-спектры хорошо согласуются друг с другом, в частности, область валентных колебаний связей С-Н ( $2900$  до  $3000 \text{ см}^{-1}$ ), широкая область валентных колебаний связей О-Н ( $3150$  до  $3600 \text{ см}^{-1}$ ), пик на частоте  $2797 \text{ см}^{-1}$ , соответствующий валентным колебаниям связи О-Н мостика О-Н...N в комплексе АТКК-доксорубицин.

В таблице 2 представлены параметры водородных связей для молекулярного комплекса митоксантрон - 1,3,5,7-адамantanтетракарбонвая кислота. По данным из таблицы 2 можно заметить, что наиболее сильной является водородная связь, которая образуется с участием связи О-Н в АТКК и атома азота в митоксантроне (четвёртый комплекс), что проявляется в наибольшем частотном сдвиге её колебания в длинноволновую область ( $600 \text{ см}^{-1}$ ). При этом энергия данной водородной связи составляет 7,099 ккал/моль, а интенсивность спектрального пика – 2528,4 км/моль. Стоит отметить, что все водородные связи, образовавшиеся с участием атомов азота, являются более силь-

ными, чем все водородные связи, образованные с участием атомов кислорода в качестве акцепторов.

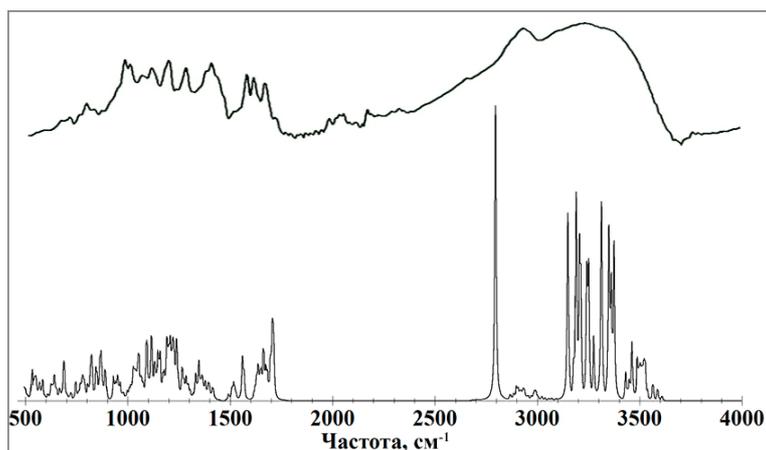


Рис. 4. Экспериментальный ИК-спектр комплекса наноалмаз-доксорубицин (вверху) и комбинированный ИК-спектр для десяти рассчитанных вариантов молекулярных комплексов АТКК-доксорубицин (внизу)

Водородные связи для большинства молекулярных комплексов АТКК-митоксантрон можно охарактеризовать как связи средней силы, так как величина частотного сдвига для них варьируется от  $233 \text{ см}^{-1}$  до  $600 \text{ см}^{-1}$ , а энергия связи не превышает  $7,1 \text{ ккал/моль}$ . Вторая водородная связь в девятом комплексе может быть охарактеризована как слабая связь, так как величина частотного сдвига для неё составляет  $158 \text{ см}^{-1}$ , а энергии связи  $3,259 \text{ ккал/моль}$ .

Можно предполагать, что в молекулярном комплексе НА-митоксантрон может быть одиннадцать водородных связей средней силы и одна слабая водородная связь.

Таблица 2.

Рассчитанные параметры водородных связей в десяти вариантах комплекса 1,3,5,7-адамнантетракарбонвая кислота-митоксантрон

№ комп. / № связи	Длина Н-связи $R_{\text{H...B}}$ , Å	Длина водородного мостика $R_{\text{OH...B}}$ , Å	Частота $\nu$ , $\text{см}^{-1}$	Частотный сдвиг $\Delta\nu$ , $\text{см}^{-1}$	Энергия связи $-\Delta H$ , ккал/моль	Интенсивность $I_{\text{IR}}$ , км/моль
1/1	1,74	2,74 (ОН...О)	3115	408	5,755	1346,6
2/1	1,74	2,74 (ОН...О)	3156	367	5,425	1450,0
3/1	1,79	2,80 (ОН...N)	2944	579	6,965	2479,7
4/1	1,78	2,80 (ОН...N)	2923	600	7,099	2528,4
5/1	1,84	2,84 (ОН...N)	3078	445	6,037	1707,1
6/1	1,84	2,84 (ОН...N)	3088	435	5,962	1857,1
7/1	1,77	2,76 (ОН...О)	3280	243	4,274	1620,7
8/1	1,75	2,75 (ОН...О)	3213	310	4,930	1984,4
9/1	1,87	2,86 (ОН...О)	3251	272	4,569	1575,6
9/2	1,89	2,87 (ОН...О)	3399	158	3,259	1773,8
10/1	1,86	2,86 (ОН...О)	3188	335	5,153	1653,0
10/2	1,87	2,86 (ОН...О)	3324	233	4,168	1919,5

Среднее значение энергии связи для двенадцати водородных связей составляет  $5,3 \text{ ккал/моль}$ , что превышает полученное среднее значение энергии связи для комплексов АТКК-доксорубицин.

В десяти комплексах АТКК-митоксантрон всего образуется 12 связей, 8 из которых по совокупности параметров можно отнести к средним по силе водородным связям, а 4 к слабым. Наиболее сильной является связь, образовавшаяся с участием атома азота молекулы митоксантрона (N2 на рисунке 3а) и ковалентной связи О-Н в карбоксильной группе АТКК, что выражается наибольшим частотным сдвигом валентных колебаний данной связи на  $600 \text{ см}^{-1}$  в длинноволновую область. Среднее значение энергии связи для тринадцати водородных связей составляет  $5,3 \text{ ккал/моль}$ .

На рисунке 5 суперпозиция рассчитанных ИК-спектров десяти комплексов АТКК - митоксантрон сравнивается с экспериментальным ИК-спектром порошка комплекса НА-митоксантрон.

Стоит отметить хорошее согласие между рассчитанным и измеренным ИК-спектрами, в частности, в области валентных колебаний связей С-Н (2800 до 3000  $\text{см}^{-1}$ ), широкой области валентных колебаний связей О-Н (3100 до 3600  $\text{см}^{-1}$ ), пиках на частотах 2923  $\text{см}^{-1}$  и 2944  $\text{см}^{-1}$ , соответствующих валентным колебаниям связи О-Н мостиков О-Н...N.

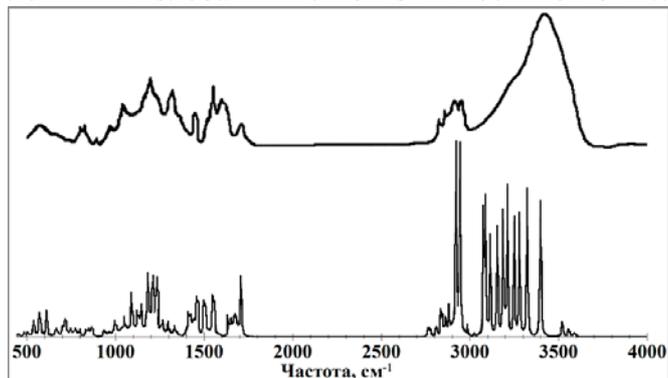


Рис. 5. Экспериментальный ИК-спектр комплекса наноалмаз-митоксантрон (вверху) и комбинированный ИК-спектр для десяти рассчитанных вариантов молекулярных комплексов АТКК-митоксантрон (внизу)

Широкие границы области валентных колебаний связей О-Н в рассмотренных экспериментальных ИК-спектрах комплексов наноалмазов с лекарственными препаратами могут быть обусловлены наличием большого количества водородных связей в полученных образцах, содержащих различные по структуре комплексы наноалмазов с доксорубицином и митоксантроном, в том числе и полученные в результате моделирования варианты.

Полученные результаты доказывают, что между лекарственными препаратами и карбоксилированными детонационными наноалмазами может осуществляться значительное супрамолекулярное взаимодействие, которое характеризуется наличием большого числа слабых и средних водородных связей, обеспечивающих высокую устойчивость супрамолекулярных ансамблей [4].

Образованные водородные связи могут рассматриваться как один из базовых механизмов в реализации адресной доставки лекарственных средств и удержания препарата в клетках организма, существенно повышая, таким образом, терапевтическую эффективность лекарств, на что было указано в экспериментальных работах [5] и [6].

#### Литература

1. Гонсалвес К., Хальберштадт К., Лоренсин К., Наир Л. Наноструктуры в биомедицине. - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2012. 519 с.
2. Долматов В.Ю. // Успехи химии. 2001. Т.70. №7. С.687-708
3. Яковлев Р.Ю., Соломатин А.С., Леонидов Н.Б. и др. //Российский химический журнал. 2012. Т. LVI. № 3-4. С. 114-125
4. Сид Дж. В., Этвуд Дж. Л. Супрамолекулярная химия. В двух томах. — М.: Академкнига, 2007, Том 1. 480 с. Том 2. 416 с.
5. Salaam A.D., Hwang P.T.J., Poonawalla A. et al. //Nanotechnology 2014. V. 25. № 42. P. 425103
6. Toh T.-B., Lee D.-K., Hou W. et al. //Molecular Pharmaceutics 2014. V. 11. № 8. P. 2683–2691
7. Бокарев А.Н., Пластун И.Л. // Известия СГУ. Нов. сер. Сер. Физика 2018. Т. 18. № 3. С. 177-188
8. Кон В. //Успехи физических наук 2002. Т.172. №3. С.336-348
9. Попл Дж. А. // Успехи физических наук 2002. Т.172. №3. С.349-356
10. Frisch M. J., Trucks G. W., Cheeseman J. R. et al. Gaussian 09, Revision A.02., Wallingford CT, Gaussian Inc., 2009. 450 p.
11. Carvalho C., Santos R.X., Cardoso S. et al. //Current Medicinal Chemistry 2009. V. 16. P. 3267-3285
12. Ma P., Mumper R.J. //Nano Today 2013. V. 8. № 3. P. 313-331

## СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ НОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ РЯДА АЗОЛОПИРИМИДИНОВ И АЗОЛОХИНАЗОЛИНОВ

М.А. Ивонин, Н.О. Василькова, А.В. Никулин, А.А. Мещерякова, В.В. Сорокин, А.П. Кривенько  
Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского

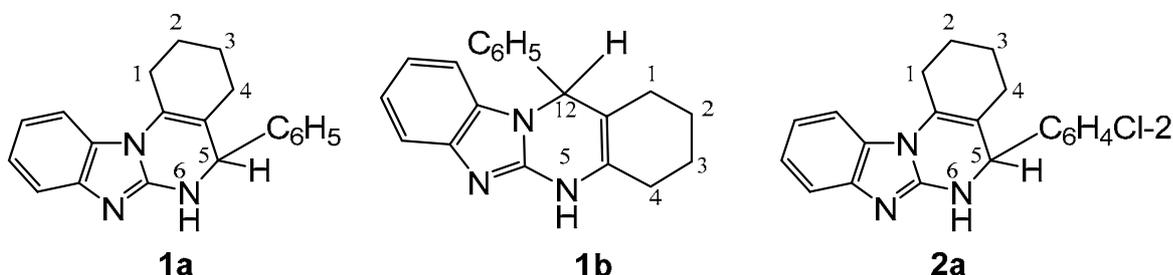
Предложены подходы, позволяющие с помощью одномерной и двумерной спектроскопии ЯМР установить строение и состав смеси продуктов конденсации азоламинов и карбонильных соединений.

Спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР) один из самых информативных методов исследования строения органических соединений, механизмов химических реакций. По мере

усложнения строения изучаемого соединения в его спектре ЯМР возникает все больше сигналов. Проанализировать такой спектр позволяют дополнительные исследования на ядрах  $^{13}\text{C}$  и двумерные спектры ЯМР (COSY, HSQC, HMBC, TOCSY и др.).

Ранее нами были синтезированы серии новых соединений ряда бензимидазоло-, тетразоло- и триазолохиназолинов, содержащие арильные и гетарильные заместители [1,2]. С помощью спектральных методов установлены их строение, соотношение изомеров. В продолжение этих исследований нами осуществлен синтез различными методами новых представителей ряда бензимидазолохиназолинов и триазолохиназолинов, содержащих орто-*R*-фенильные заместители, с целью выявления направления реакций в зависимости от строения реагентов и путей образования гетероциклических систем различного типа.

В зависимости от выбранного способа синтеза (двух-, трехкомпонентная конденсация бензимидазол-2-амина с карбонильными соединениями) образуется смесь позиционных изомеров 5-фенил-1,2,3,4,5,6-гексагидробенз [4,5] имидазоло [1,2-*a*] хиназолина (**1a**) и 12-фенил-1,2,3,4,5,12-гексагидробенз [4, 5] имидазоло [2,1-*b*] хиназолина (**1b**) в соотношении **1a** : **1b** = **1,5** : **1** (по интегральной интенсивности протонов Н-5 и Н-12 в спектрах ЯМР  $^1\text{H}$ ), либо индивидуальное соединение, что было показано на примере образования орто-хлорфенил-1, 2, 3, 4, 5, 6-гексагидробенз [4,5] имидазоло [1,2-*a*] хиназолина (**2a**) [1].



Состав и строение изомерной смеси **1a-1b** подтверждены данными элементного анализа, одномерных и двумерных ЯМР  $^1\text{H}/^{13}\text{C}$  спектров. В ЯМР  $^1\text{H}$  спектре (рис.1) имеются синглеты протонов Н<sup>5</sup> и Н<sup>12</sup> (5.63 м.д. и 5.41 м.д.), NH протонов (9.59 м.д., уш.с.), мультиплеты протонов алицикла (1.10-2.49 м.д.), бензольных колец (6.59-7.08 м.д.) и (7.24-7.67 м.д.).

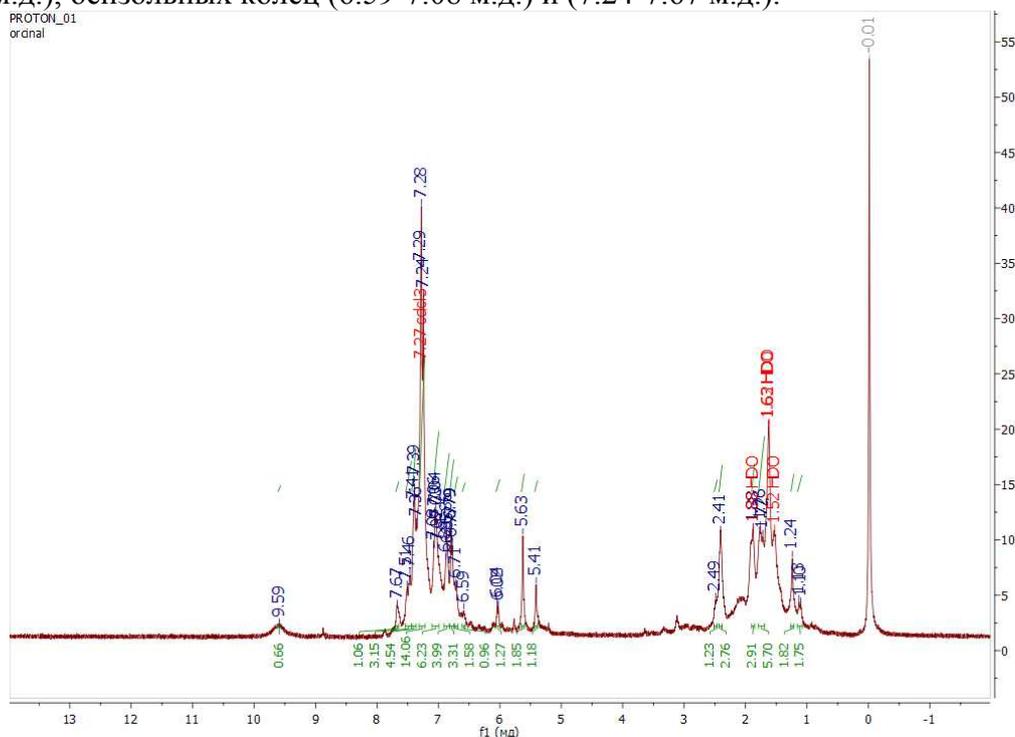


Рис.1. ЯМР  $^1\text{H}$  спектр 5-фенил-1,2,3,4,5,6-гексагидробенз [4,5] имидазоло [1,2-*a*] хиназолина (**1a**) и 12-фенил-1,2,3,4,5,12-гексагидробенз [4,5] имидазоло [2,1-*b*] хиназолина (**1b**)

В двумерных спектрах HSQC ( $^1\text{H}/^{13}\text{C}$ ) присутствует корреляция между атомами углерода  $\text{C}^5$  (для соед. **1a**),  $\text{C}^{12}$  (для соед. **1b**) и соответствующими протонами  $\text{C}^5/\text{H}^5$  (5,63/61,75 м.д.),  $\text{C}^{12}/\text{H}^{12}$  (5,41/64,71 м.д.), что подтверждает наличие в смеси двух позиционных изомеров (рис. 2).

Замена аминокомпоненты (бензимидазол-2-амин на 1,2,4-триазол-3-амин), использование ортозамещенных бензальдегидов и циклогексанона (трехкомпонентная конденсация), привели к иным результатам. Особенностью этих реакций является образование изомерных по типу сочленения колец триазологексагидрохиназолинов **3a-c** и **4a-c**. Формированию последних способствуют пространственные и электронные эффекты орто-заместителя, что отмечалось ранее для тетразольных аналогов [3]. В продуктах реакции зафиксированы гидроксильированные триазолооктагидрохиназолинолы **5a-c** и **6a-c**, что мы связываем с их стабильностью за счет меньшего акцепторного действия триазольного фрагмента в отличие от тетразольного.

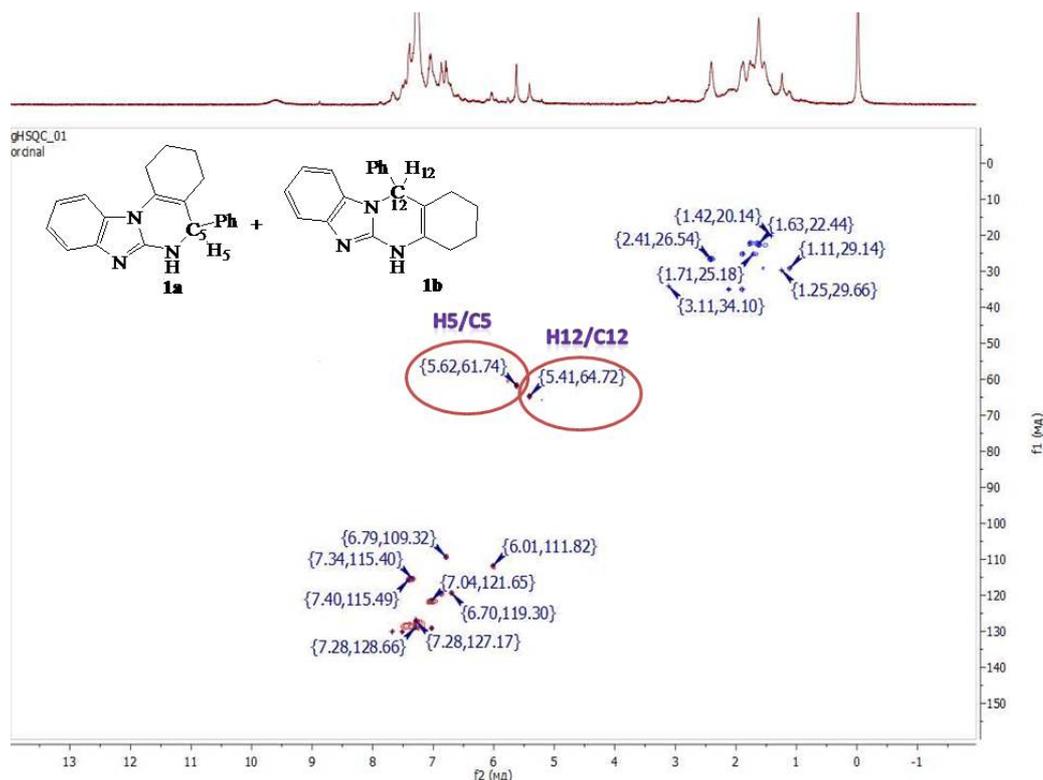
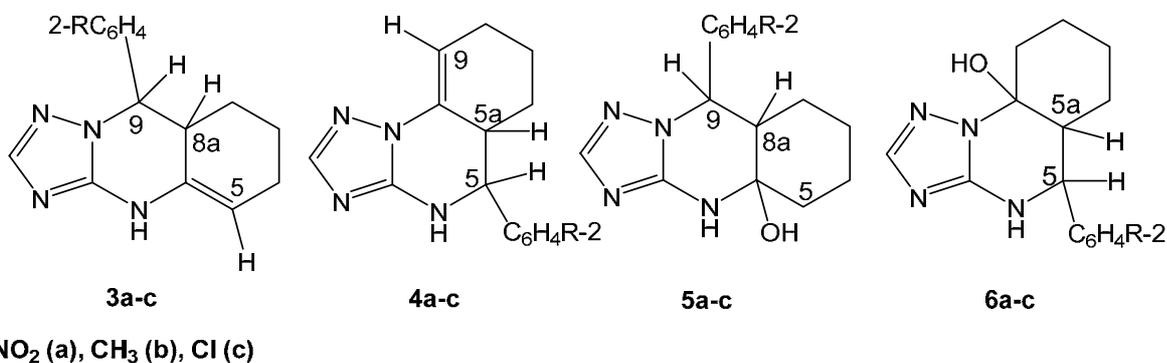


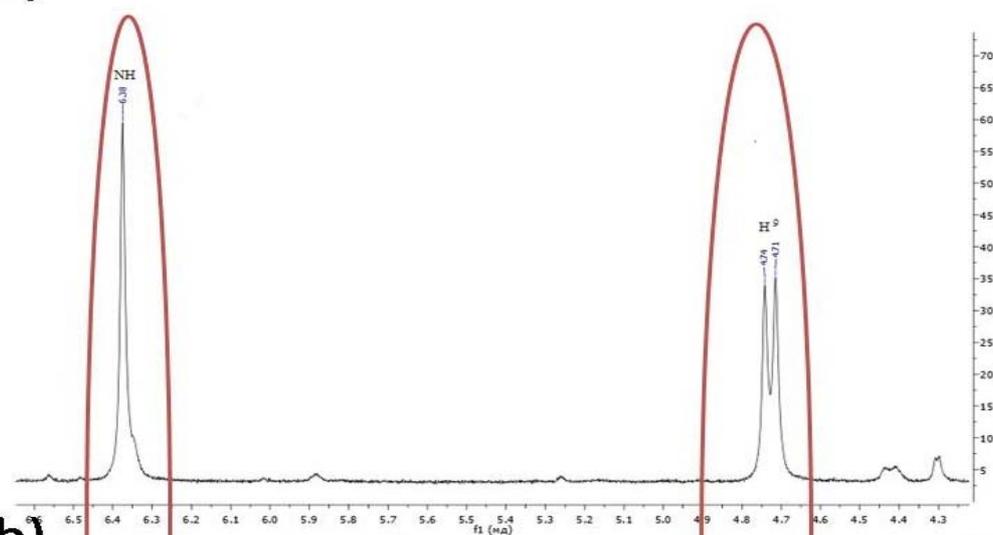
Рис.2. HSQC спектр 5-фенил-1,2,3,4,5,6-гексагидробенз [4,5]имидазола [1,2-a] хиназолина (**1a**) и 12-фенил-1,2,3,4,5,12-гексагидробенз [4,5] имидазола [2,1-b] хиназолина (**1b**)



Строение полученных систем установлено с помощью одномерной и двумерной спектроскопии ЯМР. В спектре ЯМР  $^1\text{H}$  соединений линейного строения **3a-c** характеристичными являются сигналы протонов  $\text{H}^9$  (д. 5.18-5.46 м.д.),  $\text{H}^5$  (т. 5.88 - 5.92 м.д.), NH (с. 6.56 - 6.65 м.д.). Спектры уг-

ловых систем **4a-c** содержат сигналы протонов  $H^5$  (д. 5.27 - 5.68 м.д.),  $H^9$  (т. 5.85 - 5.92 м.д.), NH (с. 9.49 - 10.23 м.д.). Для гидроксированных триазолооктагидрохиназолинов **5a-c** характеристичными являются сигналы протонов  $H^9$  (д. 4.73 - 4.98 м.д.), NH (с. 6.38 - 6.50 м.д.),  $H^{8a}$  (м. 1.83 - 2.75 м.д.), а в угловых изомерах **6a-c** - сигналы протонов  $H^5$  (д. 4.42 - 4.63 м.д.), NH (с. 8.57 - 8.66 м.д.),  $H^{5a}$  (м. 1.82 - 3.20 м.д.). 9-(2-Метилфенил)[1,2,4] триазоло [5,1-b] -4,4a,5,6,7,8,8a,9-октагидрохиназолин-4a-ол (**5b**) был выделен из смеси продуктов реакции в чистом виде посредством перекристаллизации из спирта и охарактеризован по наличию в спектре ЯМР  $^1H$  сигналов протонов  $H^9$  (д. 4.73 м.д.), NH (с. 6.38 м.д.),  $H^{8a}$  (м. 1.83-1.89 м.д.) (рис.3) и двумерными спектрами (HSQC, COSY, HMBC). В двумерном спектре HSQC ( $^1H/^{13}C$ ) присутствуют корреляции:  $H^5/C^5$  (2.58/34.23м.д.),  $H^8/C^8$  (2.48/40.18м.д.),  $H^7/C^7$  (1.56/34.17м.д.),  $CH_3/CH_3$  (2.28/19.59м.д.),  $H^{8a}/C^{8a}$  (1.86/48.95м.д.),  $H^9/C^9$  (4.73/48.48м.д.). В спектре COSY ( $^1H/^1H$ ):  $H^9/H^{8a}$  (4.73/1.86м.д.),  $H^{8a}/NH$  (1.86/6.38м.д.). В HMBC спектрах:  $NH/C^{4a}$  (6.38/81.13м.д.).

а)



б)

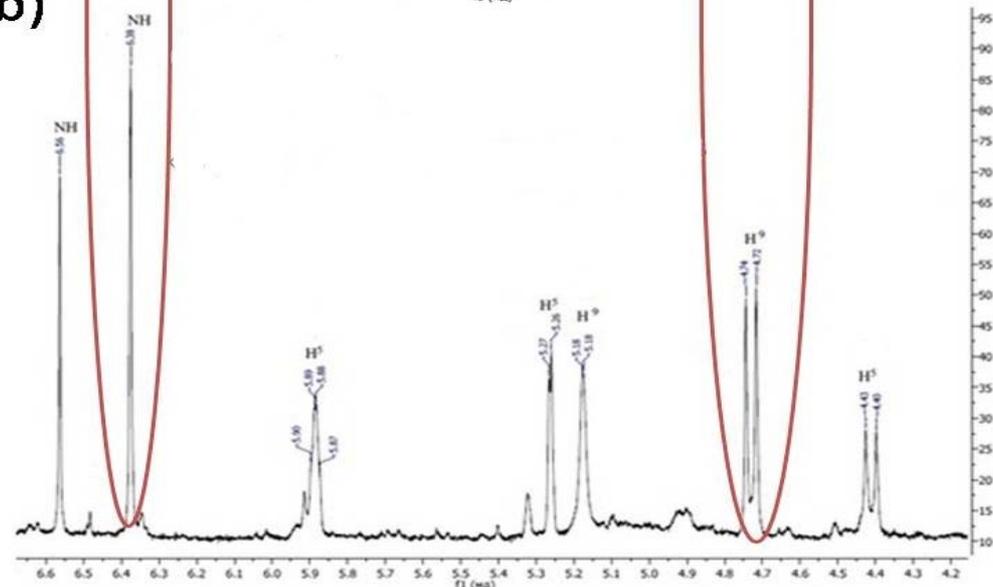


Рис.3. Фрагменты спектров ЯМР  $^1H$  а) индивидуального соединения **5b** б) смеси продуктов **3b-6b**.

Спектральные характеристики соед.**5b**, выделенного в чистом виде, подтверждают правильность отнесения сигналов этого соединения в смеси.

Анализ спектральных данных гетероциклических систем **3-6** позволил представить маршрут их образования в изучаемых реакциях и рассматривать гидроксированные триазолооктагидрохиназолинолы **5a-c** и **6a-c** как предшественники триазологексагидрохиназолинов **3a-c** и **4a-c** при дегидратации в процессе реакции, чему способствуют условия кислотного катализа.

Таким образом, с помощью спектроскопии ЯМР определено строение компонентов смесей бензимидазоло- и триазолохиназолинов и предложены обоснованные пути их образования.

## Литература

1. Ivonin M.A., Dymolazova D.K., Sorokin V.V. et al. // The Lett. of the Saratov university. New series: Chem. Bio. Eco. 2016. V. 4. P. 370–371
2. Vasil'kova N.O., Anis'kov A.A., Sorokin V.V. et al. // Russ. J. Org. Chem. 2018. V.54. № 6. P. 928–931
3. Ивонин М.А., Василькова Н.О., Дымолазова Д.К. и др. Установление строения n-, o-, s-содержащих гетероциклических соединений спектральными методами // Материалы 5-го Международного симпозиума и 21-ой Международной молодежной научной школы SaratovFallMeeting 2017. С. 80-83

## НЕСТАЦИОНАРНЫЕ ЭЛЛИПТИЧЕСКИ ПОЛЯРИЗОВАННЫЕ НОРМАЛЬНЫЕ МОДЫ ЭЛЕКТРОМАГНИТНО ИНДУЦИРОВАННОЙ ПРОЗРАЧНОСТИ

О. М. Паршков

*Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю. А.*

Приводятся результаты теоретического анализа процесса распространения коротких пробных импульсов электромагнитно индуцированной прозрачности при эллиптической поляризации управляющего излучения. Изучается ситуация, когда пробное излучение слабо по сравнению с управляющим. В этом случае поле пробного импульса представимо в виде суммы полей двух эллиптически поляризованных импульсов, распространяющихся в среде независимо друг от друга без изменения состояния поляризации, что позволяет трактовать их как нестационарные нормальные моды. Численное моделирование показало, что структура нормальных мод зависит от отношения ширины спектра входного пробного импульса к ширине спектра доплеровского разброса частот квантового перехода, резонансного пробному полю. При малой величине этого отношения каждая мода в среде представляет собой импульс, подобный входному пробному импульсу. При увеличении указанного соотношения структура нормальных мод в среде искажается. Описанная эволюция сопровождается увеличением поглощения энергии пробного излучения средой.

### ВВЕДЕНИЕ

Явление взаимного гашения амплитуд вероятностей квантовых переходов между энергетическими уровнями при резонансном возбуждении среды многочастотным когерентным лазерным излучением представляет значительный теоретический и практический интерес. Это явление лежит в основе таких эффектов, как эффект пленения населённостей [1, 2] и электромагнитно индуцированной прозрачности (ЭМИП) [3–5]. В частности, в связи с эффектом ЭМИП отметим, что его использование перспективно для создания систем оптической квантовой памяти [4], систем квантовых коммуникаций [4, 6, 7] и квантовой информации [3, 4, 5], устройств точных магнитных измерений [8] и хронометрии [9]. Эффект ЭМИП лежит в основе методов создания больших оптических нелинейностей [5, 10] и усиления излучения без инверсии населённостей [11].

Явление ЭМИП при наличии вырождения энергетических уровней квантовых переходов приводит к ряду эффектов, связанных с поляризационными характеристиками взаимодействующих излучений. В [12, 13] теоретически и экспериментально исследовалось сопровождающее ЭМИП вращение плоскости поляризации пробного поля при изменении напряжённости управляющего излучения, а в [14, 15] теоретически и экспериментально изучалось влияние постоянного магнитного поля на процесс эволюции круговых компонент пробного излучения. Линейное и круговое двойное лучепреломление пробного поля при ЭМИП исследовалось теоретически и экспериментально в [16].

В работе [17] теоретически рассматривалось явление ЭМИП в  $\Lambda$ -схема квантовых переходов между вырожденными уровнями  $^3P_0$ ,  $^3P_2$ ,  $^3P_1^0$  изотопа  $^{208}\text{Pb}$ , в парах которого экспериментально наблюдалось ЭМИП поляризованных по кругу лазерных полей [18, 19]. В [17] было показано, что в случае, когда пробное поле слабо по сравнению с управляющим и оба поля на входе в среду эллиптически поляризованы, в среде возникает двойное лучепреломление с эллиптически поляризованными нормальными модами пробного излучения. Если входное пробное поле представляет собой достаточно короткий импульс, то нормальные моды в среде также являлись импульсами, распространяющимися с различными групповыми скоростями. Это приводит к распаду пробного импульса на два, каждый из которых является нормальной модой.

Цель представленной работы заключается в описании зависимости характеристик нормальных мод пробного поля от длительности импульса входного пробного излучения. В частности, будут рассмотрены вопросы влияния указанной длительности на затухание нормальных мод в среде.

**НОРМАЛЬНЫЕ МОДЫ ПРОБНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ**

Изучаемая  $\Lambda$ -схема состоит из невырожденного нижнего ( $\boxed{\times}$ ), пяти и трёхкратно вырожденных среднего ( $^3P_2$ ) и трёхкратно вырожденного верхнего ( $^3P_1^0$ ) уровней изотопа  $^{208}\text{Pb}$ . Пусть  $\phi_k$  ( $k=1, 2 \dots 9$ ) – ортонормированный базис из общих собственных функций операторов энергии, квадрата и проекции момента импульса на ось  $z$  для изолированного атома, соответствующих нижнему ( $k=1, M=0$ ), верхнему ( $k=2,3,4, M=-1,0,1$ ) и среднему ( $k=5,6, \dots 9, M=-2,-1,0,1,2$ ) уровням. Обозначим через  $D_1$  и  $D_2$  приведённые электродипольные моменты переходов  $^3P_0 \rightarrow ^3P_1^0$  и  $^3P_2 \rightarrow ^3P_1^0$  соответственно, а через  $\omega_1$  и  $\omega_2$  ( $\omega_1 > \omega_2$ ) – центральные частоты этих переходов. Для учёта доплеровского уширения спектральных линий введём время неоднородного уширения  $T_1$ , определяемое формулой

$$T_1 = (c/\omega_1)\sqrt{M}/\sqrt{2kT},$$

где  $M$  – масса атома  $^{208}\text{Pb}$ ,  $T$  – абсолютная температура его паров,  $k$  – постоянная Больцмана. Ширина  $\Delta_1$  (по уровню  $e^{-1}$  высоты) контура линии неоднородного уширения перехода  $^3P_0 \rightarrow ^3P_1^0$  связана с величиной  $T_1$  соотношением  $\Delta_1=2/T_1$ .

Положим, что полное электрическое поле, создаваемое двумя лазерными излучениями, распространяющимися вдоль оси  $z$ , имеет вид

$$\mathbf{E}_l = \sum_{l=1}^2 \mu_l [\mathbf{i}E_{xl} \cos(\omega_l t - k_l z + \delta_{xl}) + \mathbf{j}E_{yl} \cos(\omega_l t - k_l z + \delta_{yl})], \quad (1)$$

где  $\mathbf{E}_l$  и  $\omega_l$  – напряжённость электрического поля и несущая частота пробного ( $l=1$ ) и управляющего ( $l=2$ ) полей,  $\mu_l = \hbar\sqrt{2l+1}/(|D_l|T_1)$ ,  $E_{xl}$ ,  $E_{yl}$  – неотрицательные действительные амплитуды, а  $\delta_{xl}$ ,  $\delta_{yl}$  – фазовые добавки  $x$  и  $y$  компонент пробного ( $l=1$ ) и управляющего ( $l=2$ ) полей,  $k_l = \omega_l/c$ .

Волновую функцию  $\Psi$  атома в поле (1) представим в виде разложения по базису  $\phi_k$  ( $k=1, 2 \dots 9$ ):

$$\Psi = \bar{c}_1 \phi_1 + \left( \sum_{k=2}^4 \bar{c}_k \phi_k \right) \exp(-i\xi_1) + \left( \sum_{k=5}^9 \bar{c}_k \phi_k \right) \exp[-i(\xi_1 - \xi_2)],$$

где  $\bar{c}_k$  ( $k=1,2,\dots 9$ ) – амплитуды вероятности заселения квантовых состояний, а  $\xi_l = \omega_l t - k_l z$ ,  $l=1,2$ . Введём величины  $c_i$  следующими соотношениями:

$$c_1 = p_1^* \bar{c}_1, \quad c_2 = \bar{c}_2, \quad c_4 = \bar{c}_4, \quad c_5 = p_2 \bar{c}_5, \quad c_7 = (1/\sqrt{6}) p_2 \bar{c}_7, \quad c_9 = p_2 \bar{c}_9,$$

где  $p_l = 2D_l/|D_l|$ ,  $l=1, 2$ . Определим нормированные независимые переменные  $s$  и  $w$ :

$$s = z/z_0, \quad w = (t - z/c)/T_1,$$

где  $z_0 = 3\hbar c / (2\pi N |D_1|^2 T_1 \omega_1)$ ,  $N$  – концентрация атомов.

Ниже используются параметры  $a_l$ ,  $\alpha_l$ ,  $\eta$  эллипса поляризации (ЭП) пробного ( $l=1$ ) и управляющего ( $l=2$ ) излучений. Здесь  $a_l$  – большая полуось ЭП, измеренная в единицах  $\mu_i$ ,  $\alpha_l$  – угол её наклона к оси  $x$  в радианах,  $\eta$  – параметр сжатия ( $0 \leq \alpha_l < \pi$ ,  $-1 \leq \eta \leq +1$ ) [20]. Величина  $|\eta|$  определяет отношение малой оси ЭП к его большой оси. Отрицательные значения величины  $\eta$  соответствуют правой эллиптической поляризации излучения, положительные – левой.

Будем полагать, что пробное поле настолько слабо по сравнению с управляющим, что его влияние может быть учтено в рамках метода последовательных приближений по степеням малого параметра  $\tilde{v} = \sqrt{E_{x1}^2 + E_{y1}^2} / \sqrt{E_{x2}^2 + E_{y2}^2}$ . Нулевое приближение этого метода предполагает, что  $\tilde{v} = 0$ , т. е. что пробное поле отсутствует. Тогда уравнения эволюции пробного поля в первом порядке метода последовательных приближений примут вид [17]:

$$\frac{\partial f_1}{\partial s} = \frac{2i}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} c_2^* \exp(-\varepsilon_1^2) d\varepsilon_1, \quad \frac{\partial g_1}{\partial s} = -\frac{2i}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} c_4^* \exp(-\varepsilon_1^2) d\varepsilon_1,$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial c_2}{\partial w} + i\varepsilon_1 c_2 &= -\frac{i}{2} f_1^* - \frac{i}{4} g_{20}^* (c_5 - \kappa_2 c_7) - \gamma c_2, & \frac{\partial c_4}{\partial w} + i\varepsilon_1 c_4 &= \frac{i}{2} g_1^* - \frac{i}{4} g_{20}^* (c_7 - \kappa_2 c_9) - \gamma c_4, \\
 \frac{\partial c_5}{\partial w} + i(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) c_5 &= -i g_{20} c_2, & \frac{\partial c_7}{\partial w} + i(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) c_7 &= \frac{i}{6} g_{20} (\kappa_2 c_2 - c_4), \\
 & & \frac{\partial c_9}{\partial w} + i(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) c_9 &= \frac{i}{6} \kappa_2 g_{20} c_2.
 \end{aligned} \tag{2}$$

Здесь  $f_1$  и  $g_1$  – левая и правая круговые компоненты пробного излучения,  $g_{20}$  – правая круговая компонента управляющего излучения,  $\gamma = T_1 / (2\tau)$ , где  $\tau$  – радиационное время жизни уровня  $^3P_1^0$ ,

$$\varepsilon_1 = (\omega'_1 - \omega_1) / \Delta_1, \quad \varepsilon_2 = (\omega_2 / \omega_1) \varepsilon_1, \quad \kappa_2 = (1 + \gamma_2) / (1 - \gamma_2).$$

Система (2) записана в предположениях, что  $g_2 = g_{20}$  – постоянная величина и что  $\alpha_2 = 0$ .

Введем в рассмотрение два пробных поля с напряжённостями  $\mathbf{E}_1^{(1)}$  и  $\mathbf{E}_1^{(2)}$ . Поле  $\mathbf{E}_1^{(1)}$  описывает эллиптически поляризованный пробный импульс со следующими характеристиками:

$$\alpha_1 = \alpha_1^{(1)} = 0, \quad a_1 = a_1^{(1)}, \quad \gamma_1 = \gamma_1^{(1)}, \quad \delta_{x1} = \delta_{x1}^{(1)}, \tag{3}$$

где  $a_1^{(1)}$  и  $\delta_{x1}^{(1)}$  могут зависеть от  $w$  и  $s$ , тогда как  $\gamma_1^{(1)}$  является постоянной величиной. Этот импульс будем называть параллельной модой, так как главная ось его ЭП параллельна главной оси ЭП управляющего поля. Поле  $\mathbf{E}_1^{(2)}$  описывает эллиптически поляризованный пробный импульс, для которого

$$\alpha_1 = \alpha_1^{(2)} = \pi/2, \quad a_1 = a_1^{(2)}, \quad \gamma_1 = \gamma_1^{(2)} = -\gamma_1^{(1)}, \quad \delta_{x1} = \delta_{x1}^{(2)}, \tag{4}$$

причём  $a_1^{(2)}$  и  $\delta_{x1}^{(2)}$  могут зависеть от  $w$  и  $s$ , тогда как  $\gamma_1^{(2)}$  постоянна. Этот импульс будем называть перпендикулярной модой, поскольку главная ось его ЭП перпендикулярна главной оси ЭП управляющего излучения. Отметим, что эксцентриситеты ЭП мод одинаковы, а направления вращения электрических векторов мод взаимно противоположны. Можно показать [17], что если  $f_1^{(i)}$ ,  $g_1^{(i)}$  – комплексные амплитуды лево поляризованной и право поляризованной круговых компонент параллельной ( $i=1$ ) и перпендикулярной ( $i=2$ ) моды, то

$$f_1^{(1)} = \kappa g_1^{(1)}, \quad f_1^{(2)} = -\frac{1}{\kappa} g_1^{(2)}, \quad \kappa = \frac{1 + \gamma_1^{(1)}}{1 - \gamma_1^{(1)}}.$$

Вектора Джонса параллельной и перпендикулярной мод взаимно ортогональны, и поэтому напряжённость  $\mathbf{E}_1$  пробного поля может быть представлена в виде  $\mathbf{E}_1 = \mathbf{E}_1^{(1)} + \mathbf{E}_1^{(2)}$  [21].

В [17] показано, что если величина  $\kappa$  определяется соотношениями

$$\kappa = -p + \sqrt{p^2 + 1}, \quad p = 10\gamma_2 / (1 - \gamma_2^2), \tag{5}$$

то эволюция величины  $g_1^{(1)}$  описывается следующей системой уравнений:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial g_1^{(1)}}{\partial s} &= \frac{2i}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} U_1^* \exp(-\varepsilon_1^2) d\varepsilon_1, \\
 \frac{\partial U_1}{\partial w} + i\varepsilon_1 U_1 &= -\frac{i}{2} g_1^{(1)*} - \frac{i}{4} g_{20}^* V_1 - \gamma U_1, \\
 \frac{\partial V_1}{\partial w} + i(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) V_1 &= -i g_{20} q_1 U_1.
 \end{aligned} \tag{6}$$

Входящие в (6) величины  $U_1$ ,  $V_1$  и  $q_1$  определяются формулами

$$U_1 = \frac{1}{\kappa^2 + 1} (\kappa c_2 - c_4), \quad V_1 = \frac{1}{\kappa^2 + 1} [\kappa c_5 - (\kappa_2 \kappa + 1) c_7 + \kappa_2 c_9], \quad q_1 = 1 + \kappa_2 [\kappa_2 + (1/\kappa)] / 6.$$

В свою очередь согласно [17] эволюция величины  $g_1^{(2)}$  определяется системой уравнений

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_1^{(2)}}{\partial s} &= \frac{2i}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} U_2^* \exp(-\varepsilon_1^2) d\varepsilon_1, \\ \frac{\partial U_2}{\partial w} + i\varepsilon_1 U_2 &= -\frac{i}{2} g_1^{(2)*} - \frac{i}{4} g_{20}^* V_2 - \gamma U_2, \\ \frac{\partial V_2}{\partial w} + i(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) V_2 &= -ig_{20} q_2 U_2, \end{aligned} \quad (7)$$

где

$$U_2 = -\frac{\kappa^2}{\kappa^2 + 1} \left( \frac{1}{\kappa} c_2 + c_4 \right), \quad V_2 = \frac{\kappa^2}{\kappa^2 + 1} \left( \frac{\kappa_2 - \kappa}{\kappa} c_7 - \frac{1}{\kappa_2} c_5 + \kappa_2 c_9 \right), \quad q_2 = 1 + \kappa_2 (\kappa_2 - \kappa) / 6.$$

Системы уравнений (6) и (7) не содержат общих зависимых переменных и, следовательно, могут решаться независимо друг от друга. Это означает, что при выполнении условия (5) параллельная и перпендикулярная моды пробного поля распространяются в среде независимо друг от друга. При этом согласно (3) и (4) поляризационные характеристики  $\alpha_1^{(l)}$  и  $\gamma_1^{(l)}$  этих мод остаются неизменными. Сказанное выше позволяет прийти к выводу, что перпендикулярная и параллельная моды представляют собой эллиптически поляризованные нормальные моды пробного излучения.

Нормальные моды возникают при распространении в среде пробного излучения, возбуждаемого входным пробным импульсом с произвольными поляризационными характеристиками. Будем называть ниже это излучение порождающим. Полагая, что на входе в резонансную среду порождающее поле поляризовано эллиптически, введём обозначения  $a_1, \alpha_1, \gamma_1, \delta_{x1}$  для величин, описывающих это поле при  $s=0$ . Ограничиваясь случаем отсутствия фазовой модуляции порождающего излучения на входной поверхности, без дальнейшего ограничения общности теории можно положить  $\delta_{x1}=0$ . Характеристики (3) и (4) нормальных мод на входной поверхности должны быть такими, чтобы сумма полей мод совпала на этой поверхности с полем входного порождающего излучения. Эти характеристики используются как граничные условия при решении систем уравнений (6) и (7). Формулы, определяющие характеристики нормальных мод на входной поверхности среды приведены в [17], и здесь обсуждаться не будут.

#### ЭВОЛЮЦИЯ НОРМАЛЬНЫХ МОД В СРЕДЕ

Предположим, что эллиптически поляризованное управляющее поле в среде имеет следующие поляризационные и фазовые характеристики:

$$\alpha_2 = 0, \quad a_2 = 6.65, \quad \gamma_2 = -0.3, \quad \delta_{x2} = 0. \quad (8)$$

Выбор нулевого значения величины  $\alpha_2$  диктуется изложенной выше теорией и не ограничивает общности результатов. Выбор величин  $a_2$  и  $\gamma_2$  означает, что при температуре насыщенного пара  $^{208}\text{Pb}$  равной 950К интенсивность управляющего поля во время нахождения в среде пробного излучения составляет около 20 kW/cm<sup>2</sup>. Это примерно соответствует условиям экспериментов, описанных в работах [18, 19]. Постоянство величины  $\delta_{x2}$  означает отсутствие фазовой модуляции управляющего поля. (Подробное обоснование выбора характеристик пробного и управляющего излучений на входе в среду, а также параметров квантовых переходов и резонансной среды содержится в работе [17])

Согласно [22], для выбранных переходов  $^{208}\text{Pb}$   $\omega_2/\omega_1=0.7$  и (при  $T=900 - 1000$  К)  $\gamma=1.5 \times 10^{-2}$ . В случае  $T=950$  К имеем  $T_1=1.63 \cdot 10^{-10}$  с. Выбирая для оценок насыщенные пары  $^{208}\text{Pb}$  и используя данные [23], находим при той же температуре  $N=3.4 \cdot 10^{13}$  см<sup>-3</sup> и  $z_0=0.03$  см.

Нормальные моды пробного излучения возникают в среде при падении на входную поверхность ( $s=0$ ) импульса порождающего излучения. Положим, что этот импульс имеет следующие характеристики:

$$\alpha_1 = \pi/6, \quad a_1 = 0.2 \exp\left[-(w-w_0)^2/\tau_p^2\right], \quad \gamma_1 = -0.5, \quad \delta_{x1} = 0. \quad (9)$$

Значения величин  $\alpha_1$  и  $\gamma_1$  постоянны и выбраны произвольно. Большая полуось ЭП импульса меняется во времени по закону, описываемому функцией Гаусса с временным параметром  $\tau_p$ , имеющим смысл половины длительности импульса по уровню  $e^{-1}$  высоты в единицах измерения времени  $w$ . Максимальное значение этой функции более чем в 30 раз меньше величины  $a_2$ , так что пробное поле можно считать слабым по сравнению с управляющим. Введём обозначения  $T_p$  и  $\Delta_p$  для размерных значений длительности и ширины спектра Фурье импульса, описываемого функцией  $a_1$  (по уровню  $e^{-1}$  высоты).

Используем описанный в [17] способ нахождения параметров нормальных мод на входной поверхности среды по известным параметрам входного пробного импульса. Тогда получим, что при условиях (8) и (9) параллельная нормальная мода при  $s=0$  описывается следующим образом:

$$\alpha_1 = 0, \quad a_1 = 0.0720 \exp\left[-(w-w_0)^2/\tau_p^2\right], \quad \gamma_1 = 0.7417, \quad \delta_{x1} = -0.4993, \quad (10)$$

а характеристики перпендикулярной моды при  $s=0$  таковы:

$$\alpha_1 = \pi/2, \quad a_1 = 0.1645 \exp\left[-(w-w_0)^2/\tau_p^2\right], \quad \gamma_1 = -0.07417, \quad \delta_{x1} = 0.2884. \quad (11)$$

Ниже для двух значений величины  $\tau_p$  будут представлены результаты численного решения системы (2) при условиях (9), (10) и (11). Сначала положим  $\tau_p=75$ , что соответствует  $T_p=25$  нс. В данном случае  $\Delta_p/\Delta_1=2/75$ , т.е. спектр входного пробного импульса значительно уже спектра разброса частот резонансного для пробного поля перехода. Кроме того  $T_p/\tau=4.5$ , т.е. длительность входного пробного импульса значительно превосходит время необратимой релаксации.

На рис.1 приведены графики интенсивности  $I_1$ , измеряемой в единицах  $c\mu_1^2/(8\pi)$ , а также величин  $\alpha_1$  и  $\gamma_1$  для порождающего излучения. Порождающий импульс на входе в среду эллиптически поляризован и в соответствии с (9) имеет постоянные значения величин  $\alpha_1$  и  $\gamma_1$  (рис.1,а). Однако на достаточно большом расстоянии (рис.1,б) этот импульс начинает распадаться, причём величины  $\alpha_1$  и  $\gamma_1$  существенно меняются со временем. На ещё больших расстояниях (рис.1,в,г) пробный импульс распадается на два импульса таким образом, что в области нахождения каждого из них поляризационные характеристики  $\alpha_1$  и  $\gamma_1$  постоянны. В частности, при  $s=4000$  (рис. 1,г) в области нахождения левого импульса  $\alpha_1=0$ ,  $\gamma_1=0.7417$ , что в пределах используемой точности расчёта совпадает со значением этих величин для параллельной нормальной моды. С подобной же точностью для правого импульса (рис. 1,г)  $\alpha_1=\pi/2$ ,  $\gamma_1=-0.7417$ . Такие поляризационные характеристики имеет перпендикулярная нормальная мода.

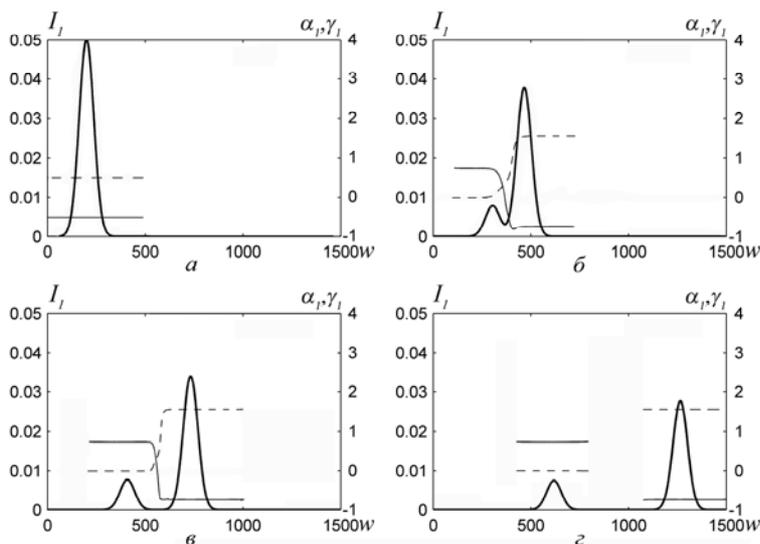


Рис.1. Эволюция характеристик порождающего пробного поля в среде при  $s=0$  (а),  $s=1000$  (б),  $s=2000$  (в) и  $s=4000$  (г);  $I_1$  – толстые линии,  $\alpha_1$  – пунктир,  $\gamma_1$  – тонкие линии.

На рис.2 представлены графики величин  $I_1$ ,  $\alpha_1$  и  $\gamma_1$  для нормальных мод, порождаемых описанным выше пробным излучением. При распространении нормальных мод в среде поляризационные характеристики  $\alpha_1$  и  $\gamma_1$  остаются постоянными, и их значения совпадают с таковыми на входе в резонансную среду. Таким образом, результаты численного моделирования согласуются с изложенной выше аналитической теорией нормальных мод. Кроме того, для каждой фиксированной пары значений  $s, w$  с ошибкой менее 0.1% выполняется условие

$$I_1^{(1)} I_1^{(2)} = I_1^2,$$

где  $I_1$  – интенсивность порождающего излучения, а  $I_1^{(1)}$  и  $I_1^{(2)}$  – интенсивности параллельной и перпендикулярной мод соответственно. Данное обстоятельство и постоянство величин  $\alpha_1$  и  $\gamma_1$  позволяют называть эти моды нормальными [21].

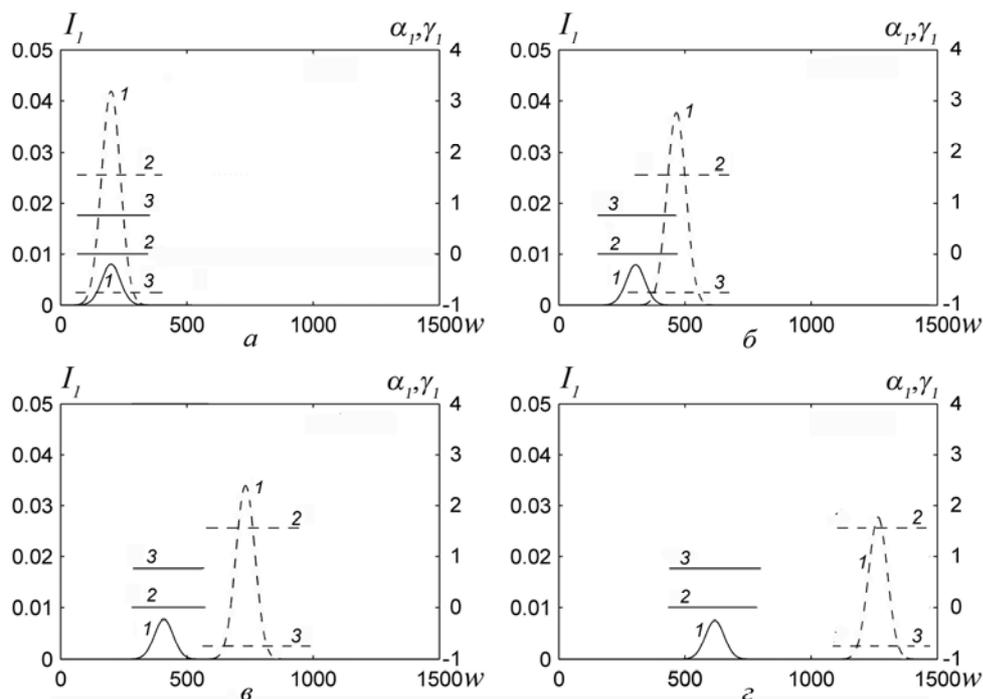


Рис.2. Эволюция характеристик нормальных мод в среде при  $s=0$  (а),  $s=1000$  (б),  $s=2000$  (е) и  $s=4000$  (z); сплошные линии – параллельная мода, пунктир – перпендикулярная мода;  $I_1$ – кривые 1,  $\alpha_1$ – кривые 2,  $\gamma_1$ – кривые 3.

Рассмотрим случай  $\tau_p=1$  ( $T_p=326$  пс). При этом  $\Delta_p/\Delta_1=2$ ,  $T_p/\tau=0.06$ . На рис.3,а-в представлены графики, описывающие эволюцию интенсивности  $I_1$  порождающего поля при трёх значениях расстояния  $s$ , а на рис.3,г-е представлены графики интенсивностей нормальных мод на тех же расстояниях. (На рис.3,г не изображено основание импульса 2, чтобы был заметен импульс  $I$ ).

Рис.3 показывает, что излучения параллельной и перпендикулярной нормальных мод на достаточно большом расстоянии распространяются в виде затухающего цуга субимпульсов. Общая длительность каждого такого цуга во много раз превосходит длительность входного импульса порождающего пробного поля.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сравнение результатов представленных выше расчётов позволяет заключить, что с уменьшением длительности входного пробного импульса составляющие его нормальные моды приобретают черты, свойственные нестационарным процессам взаимодействия излучения со средой. В первую очередь нестационарность проявляется в существенном искажении формы огибающей импульса и разбиении импульса на фрагменты. В условиях однофотонного резонанса подобные эффекты обнаруживаются в световых нутациях, связанных с затуханием поляризации квантового перехода [24], в явлениях самоиндуцированной прозрачности [25] и фотонного эха [26].

Дополнительные расчёты показывают, что заметные искажения формы импульсов нормальных мод происходят при условии  $\Delta_p / \Delta_1 \geq 0.5$ , т.е. в случае, когда спектр входного пробного импульса превосходит половину ширины доплеровского спектра квантового перехода, резонансного

пробному излучению. При пикосекундных длительностях входного пробного импульса форма графиков интенсивности нормальных мод в среде значительно искажается (см. рис.3,д,е) Общая длительность импульса с такой огибающей в десятки раз превышает длительность входного пробного импульса.

Отметим, что в случае расчёта при  $\tau_p=75$  на расстоянии  $s=2000$  среда поглощает только 3% энергии параллельной нормальной моды и 19% перпендикулярной. В случае  $\tau_p=1$  эти величины уже на расстоянии  $s=200$  составляют 7% и 60% соответственно. Таким образом, с уменьшением длительности входного лазерного импульса эффективность ЭМИП существенно падает.

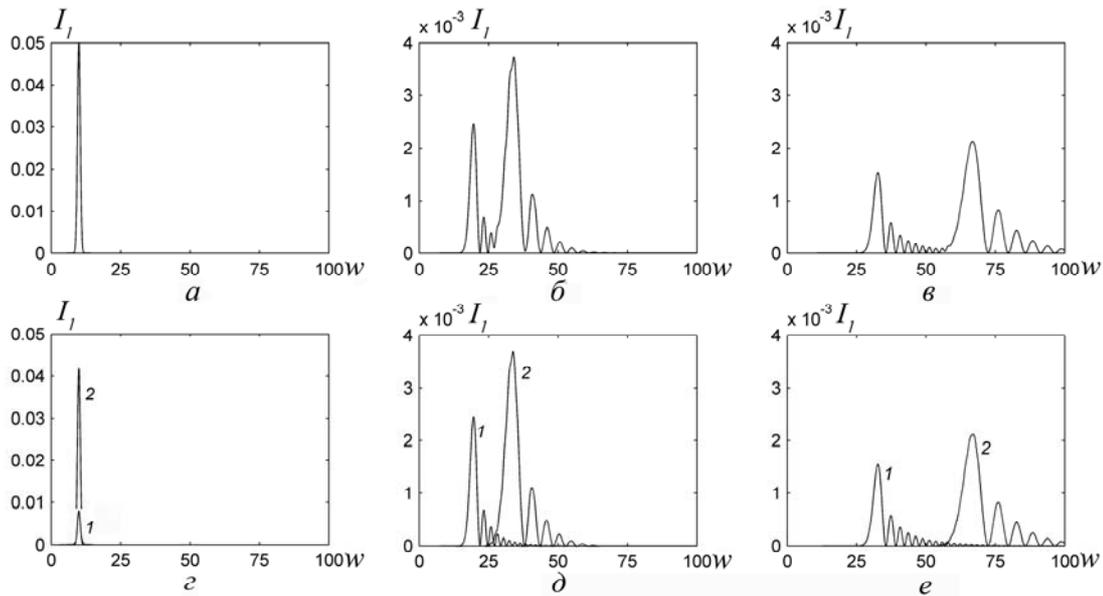


Рис.3. Эволюция интенсивности порождающего поля при  $s=0$  (а),  $s=80$  (б),  $s=200$  (в), а также интенсивностей нормальных мод при  $s=0$  (з),  $s=80$  (д),  $s=200$  (е). 1 – продольная мода, 2 – перпендикулярная мода.

### Литература

1. Агапьев Б.Д., Горный М.Б., Матисов Б.Г. и др. // УФН 1993. Т.163. №9. С.1
2. Vitanov N.V., Rangelov A. A., Shore B.W. et al. // Rev. Mod. Phys. 2017. V.89. №1. P.015006
3. Harris S.E. // Phys. Today. 1997. V.50. №7. P.36
4. Lukin M. D. // Rev. Mod. Phys. 2003. V. 75. № 2. P.457
5. Fleischhauer M., Imamoğlu A., Marangos J.P. // Rev. Mod. Phys. 2005. V. 77. № 2. P. 633
6. Duan L.-M., Lukin M.D., Cirac J.I., Zoller P. // Nature (London). 2001. V. 414. P. 413
7. Sinatra A. // Phys. Rev. Lett. 2006. V. 97. № 25. P. 253601
8. Martinelli M., Valente P., Failache H. et al. // Phys. Rev. A. 2004. V. 69. № 4. P. 043809
9. Godone A., Micallilizio S., Levi F. // Phys. Rev. A. 2002. V. 66. № 6. P. 063807
10. Lukin M.D., Imamoğlu A. // Nature (London). 2001. V. 413. P. 273
11. Kocharovskaya O., Mandel P. // Phys. Rev. A. 1990. V. 42. № 1. P.523
12. Wielandy S., Gaeta A.L. // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 81. № 16. P. 3359
13. Bo Wang, Shujing Li, Jie Ma, Hai Wang, Peng K.C., Min Xiao. // Phys. Rev. A. 2006. V. 73. № 5. P. 051801(R)
14. Agarwal G.S., Shubhrangshu Doss Gupta. // Phys. Rev. A. 2003. V. 67. № 2. P. 023814
15. Sautenkov V.A., Rostovtsev Y.V., Chen H. et al. // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 94. №23. P. 233601
16. Tai Hyun Yoon, Chang Yong Park, Sung Jong Park. // Phys. Rev. A. 2004. V. 70. № 6. P.061803(R)
17. Паршков О.М. // Квант.электр. 2018 (в печати)
18. Kasapi A., Maneesh Jain, Yin G.Y. et al. // Phys. Rev. Lett. 1995. V. 74. № 13. P. 2447.
19. Maneesh Jain, Kasapi A., Yin G.Y. et al. // Phys. Rev. Lett. 1995. V. 75. №.24. P. 4385.
20. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М.: Наука, 1970. 855с.
21. Салех Б., Тейх М. Оптика и фотоника. Принципы и применения. Долгопрудный: ИД «Интеллект». 2012. Т.1. 760 с.
22. De Zafra R.L., Marshall A. // Phys. Rev. 1968. V. 170. № 1. P. 28
23. Физические величины. Справочник. / Под. ред. Григорьева И. С., Мейлихова Е.З. М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.
24. Акулин В.М., Карлов М.В. Интенсивные резонансные взаимодействия в квантовой электронике. М.: Наука. 1987. 312 с.
25. McCall S.L., Hahn E.L. // Phys. Rev. 1969. V. 183. № 2. P. 457
26. Евсеев И.В., Рубцова Н.Н., Самарцев В.В. Когерентные переходные процессы в оптике. М.: Физматлит. 2009. 536 с.

## ДИСПЕРСИОННЫЕ СВОЙСТВА ЭВАНЕСЦЕНТНЫХ МОД ХАЛЬКОГЕНИДНЫХ СВЕТОВОДОВ

С.В. Корсакова<sup>1</sup>, Е.А. Виноградова<sup>1</sup>, Е.А. Романова<sup>1</sup>, В.С. Ширяев<sup>2</sup>  
<sup>1</sup>Саратовский Государственный Университет имени Н.Г. Чернышевского,  
<sup>2</sup>Институт химии высокочистых веществ им. Г.Г. Девятовых РАН,

В работе рассмотрены дисперсионные и эванесцентные свойства халькогенидных волоконных световодов. Была рассчитана дисперсия бесструктурных волоконных световодов из стекла состава  $As_{30}Se_{50}Te_{20}$ , а также дисперсия волоконного световода с сердцевинной из стекла состава  $As_{30}Se_{50}Te_{20}$  и оболочкой из стекла состава  $As_2Se_3$ . Показано, что использование дисперсионных свойств высших мод волоконного световода может управлять положением нуля дисперсии групповой скорости. Показано, что использование эванесцентных свойств высших мод волоконного световода, погруженного в водный раствора ацетона, позволит добиться большей чувствительности.

### ВВЕДЕНИЕ

В различных сферах жизнедеятельности человека востребованы датчики для определения химического состава газовых и жидких сред в целях мониторинга состояния окружающей среды и контроля технологических процессов. В среднем ИК диапазоне длин волн (3-15 мкм) находятся полосы поглощения колебательных спектров многих органических и неорганических веществ, в том числе опасных реагентов и примесей. Спектроскопия среднего ИК диапазона является эффективным средством химического анализа различных сред. Для дистанционного химического анализа в режиме реального времени подходят волоконные спектроскопические датчики на основе халькогенидных световодов. Такие световоды имеют малые оптические потери в среднем ИК [1].

Поскольку излучение в световоде распространяется не только по сердцевине, но частично проникает и в оболочку, световод может быть использован как сенсорный элемент волоконного спектроскопического датчика. Оболочкой бесструктурного световода, состоящего только из стеклянной сердцевины, является внешняя среда. Мощность излучения, распространяющегося по световоду, уменьшается на длинах волн, соответствующих полосам поглощения внешней среды (таковой может быть любая жидкая, газообразная среда или твердое вещество).

В работах авторов данной статьи был предложен новый для задач волоконной эванесцентной спектроскопии теоретический подход [2-4], основанный на представлении электромагнитного поля, распространяющегося в многомодовом световоде, погруженном в поглощающую жидкость, в виде суммы эванесцентных мод. На примере мод бесструктурного световода, погруженного в водный раствор ацетона, было установлено, что коэффициент затухания эванесцентных мод в области полос поглощения воды или ацетона больше у мод с высокими радиальными и азимутальными порядками. Для селективного возбуждения таких мод в световоде нужно когерентное излучение.

Метод волоконной эванесцентной спектроскопии обычно используется в лабораторных условиях в совокупности с Фурье-спектрометрами [5-8]. Источники суперконтинуума на основе халькогенидных световодов в спектральном диапазоне от 3 до более чем 10 мкм получены совсем недавно [9-11]. Поскольку в ближнем ИК халькогенидные стекла имеют большую нормальную ДГС, для ее компенсации и получения суперконтинуума с накачкой на длинах волн 1.5 – 2.5 мкм обычно используются маломодовые световоды или микроструктурированные световоды с подвешенной сердцевиной [11]. Однако, использование световодов с сердцевиной, размеры которой сравнимы с длиной волны в среднем ИК, приводит к большим потерям при вводе излучения.

В данной работе исследуются дисперсионные свойства высших мод многомодовых халькогенидных световодов и возможность компенсации дисперсии халькогенидного стекла в ближнем и среднем ИК. Задача о генерации суперконтинуума в высших модах волноводных структур привлекает интерес исследователей, что нашло отражение в работах по изучению дисперсионных свойств высших мод маломодовых халькогенидных световодов с размерами сердцевины порядка длины волны [12]. Однако, для волоконного сенсорного элемента эванесцентного датчика используют многомодовые световоды с размерами сердцевины на 2 порядка больше, чем длина волны. Ниже приводятся спектральные зависимости параметра ДГС, полученные в компьютерной модели для высших мод световода с диаметром сердцевины 300 мкм в области ближнего и среднего ИК диапазонов, и обсуждается возможность генерации суперконтинуума в этих модах. Далее представлены

спектральные зависимости коэффициентов затухания высших эванесцентных мод такого же световода, частично погруженного в поглощающую среду.

**ДИСПЕРСИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ВЫСШИХ МОД МНОГОМОДОВОГО ХАЛЬКОГЕНИДНОГО СВЕТОВОДА**

Для расчета дисперсионных характеристик использовался метод численного решения характеристического уравнения [13]:

$$\boxed{\text{[Blank box with a small red 'x' icon]}} \tag{1}$$

где  $\nu$  – азимутальный порядок моды,  $J_\nu, K_\nu$  – функции Бесселя и Макдональда,  $J'_\nu$  и  $K'_\nu$  – производные функций Бесселя и Макдональда,  $u$  и  $w$  – параметры моды в сердцевине и оболочке, соответственно,  $\beta = \sqrt{k^2 n_1^2 - u^2 / R^2}$  – продольная постоянная распространения,  $V = k \cdot R \cdot \sqrt{n_1^2 - n_2^2}$  – параметр волокна,  $k = 2\pi/\lambda$ ,  $\lambda$  – длина волны,  $R$  – радиус сердцевины,  $n_1$  – показатель преломления сердцевины,  $n_2$  – показатель преломления оболочки.

В компьютерной модели рассматривался многомодовый световод с сердцевиной из стекла состава  $As_{30}Se_{50}Te_{20}$ , как бесструктурный, находящийся в воздухе, так и с бесконечной оболочкой из стекла состава  $As_2Se_3$ . Показатели преломления стёкол рассчитывались по формуле Зельмейера [14]:

$$n^2 = 1 + \sum_i \frac{A_i \cdot \lambda^2}{\lambda^2 - B_i^2} \tag{2}$$

При  $\nu = 0$  решения (1) соответствуют  $TE_{0m}$  и  $TM_{0m}$  модам, где  $m$  – радиальный порядок моды. При  $\nu \geq 1$  принято классифицировать решения (1) как  $HE_{\nu m}$  и  $EH_{\nu m}$  моды в приближении слабонаправляющего световода [13]. Однако, это приближение неприменимо в рассматриваемой задаче, так как показатель преломления сердцевины из стекла состава  $As_{30}Se_{50}Te_{20}$  (~ 3 в ИК диапазоне) значительно больше показателя преломления как воздуха, так и стекла состава  $As_2Se_3$  (~ 2.8 в ИК диапазоне). Вместе с тем, значения  $u$  и  $w$ , полученные из решений приближенных характеристических уравнений для  $HE_{\nu m}$  и  $EH_{\nu m}$  мод, задавались нами как начальные приближения решений (1). Поэтому в дальнейшем обсуждении используется классификация мод, принятая в теории слабонаправляющих световодов.

Параметр  $D = -(2 \cdot \pi \cdot c \cdot \beta_2) / \lambda^2$ , где  $\beta_2 = d^2 \beta / d\omega^2$ , рассчитывался для мод рассматриваемых световодов с  $R = 150$  мкм и  $R = 100$  мкм в диапазоне длин волн  $\lambda = 1.5 - 8$  мкм (Рис.1). Оказалось, что значения  $\beta$  и параметра  $D$ , полученные для  $TE_{0m}$ ,  $TM_{0m}$  и  $HE_{1m}$  и  $EH_{1m}$  мод с одинаковым индексом  $m$ , имеют близкие значения при малых  $m$ , поскольку в этом случае  $k^2 \cdot n_1^2 \gg u^2 / R^2$ . У мод с большим  $m$ , близких к отсечке, когда  $u \rightarrow V$ , различия значений  $D$  растут. Однако, длина волны  $\lambda_0$ , соответствующая  $D = 0$ , у этих мод различается не более чем на 1 - 2 %. Поэтому в дальнейшем изложении результаты представлены для  $HE_{1m}$  мод, а также  $HE_{\nu m}$  мод с  $\nu > 1$ .

Поскольку число направляемых мод уменьшается с ростом  $\lambda$ , в задаче о генерации суперконтинуума в отдельно взятой моде необходимо выбрать спектральный интервал, в котором рассматриваемая мода не уйдет за отсечку при нелинейном преобразовании частоты. Для этого в рассматриваемой спектральной области для каждой длины волны  $\lambda_{max}$  определялась мода с наибольшим  $m$  ( $m_{max}$ ), а дисперсионная характеристика рассчитывалась для этой моды в интервале от 1.5 мкм до  $\lambda_{max}$ . Оказалось, что любая направляемая мода рассматриваемых световодов в той или иной степени позволяет уменьшить  $\lambda_0$ . Как показано на Рис.1, при фиксированном  $\nu$  с увеличением  $m$  происходит смещение  $\lambda_0$  в область более коротких  $\lambda$ , как и с увеличением  $\nu$  при фиксированном  $m$ .

На Рис.2 представлены результаты расчета  $\lambda_0$  для  $HE_{1m}$  мод, при заданном  $\nu$  имеющих значение  $m_{max}$  на длине волны  $\lambda_{max}$ , значения которой также отмечены на графике. Видно, что в диапазоне  $\lambda_{max}$  от 3 мкм до 7 мкм в значение  $\lambda_0$ , полученное для мод бесструктурного световода, уменьшается от 2.4 мкм до 1.46 мкм, а в случае световода со стеклянной оболочкой  $\lambda_0$  уменьшается от 3.2 мкм до 2.3 мкм. Моды бесструктурного световода с большими  $m_{max}$ , имеющие  $\lambda_0$  в области  $\lambda < 1.56$  мкм (длина волны генерации эрбиевого лазера), могут распространяться как направляемые в облас-

ти  $\lambda < 4$  мкм и не подходят для генерации суперконтинуума в среднем ИК. Выбирая моды с меньшими  $m_{\max}$ , можно продвинуться в область больших  $\lambda$ , но ценой некоторого увеличения  $\lambda_0$  и, соответственно, увеличения  $\lambda$  накачки до 2 мкм.

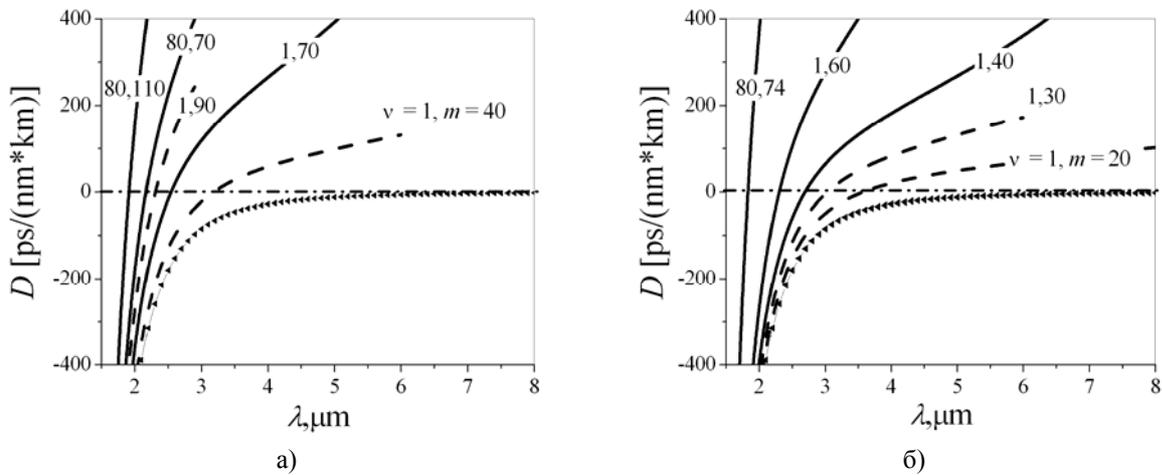


Рис.1. Спектральная зависимость параметра  $D$  для мод  $HE_{vm}$  световода с  $R = 150$  мкм (а),  $R = 100$  мкм (б) из стекла состава  $As_{30}Se_{50}Te_{20}$  в воздухе (сплошные линии) и с оболочкой из стекла состава  $As_2Se_3$  (штриховые линии). Треугольниками показана спектральная зависимость для стекла состава  $As_{30}Se_{50}Te_{20}$ .

При использовании световода с меньшим  $R$  длина волны  $\lambda_0$  у каждой моды становится меньше, но при этом уменьшается число мод на каждой  $\lambda$ .

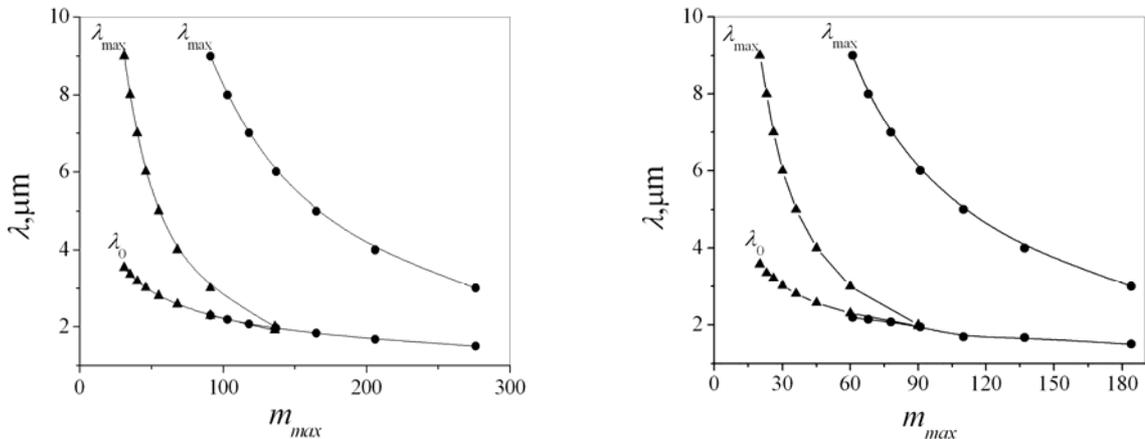


Рис.2. нули ДГС  $\lambda_0$  для  $HE_{1m}$  мод с индексом  $m_{\max}$  на длине волны  $\lambda_{\max}$  световода с  $R = 150$  мкм (а),  $R = 100$  мкм (б) из стекла состава  $As_{20}Se_{50}Te_{20}$  в воздухе (кружки) и с оболочкой из стекла состава  $As_2Se_3$  (треугольники).

Рассмотренный бесструктурный световод может быть использован и как сенсорный элемент волоконного спектроскопического датчика. Если часть световода погружена в поглощающую среду, направляемые моды на этом участке становятся эванесцентными, т.к. их мощность постепенно уменьшается при распространении из-за поглощения во внешней среде.

### ЭВАНЕСЦЕНТНЫЕ МОДЫ БЕССТРУКТУРОГО МНОГОМОВОДОГО ХАЛЬКОГЕНИДНОГО СВЕТОВОДА

Согласно электромагнитной теории, поглощающая среда описывается комплексным показателем преломления:  $n_2 = n_2' + i \cdot n_2''$ , где мнимая часть  $n_2''$  определяется коэффициентом поглощения среды. Тогда продольная постоянная распространения  $\beta = \beta' + i \cdot \beta''$  каждой моды световода также является комплексной, а величина ее мнимой части зависит от доли мощности излучения, распространяющегося в поглощающей среде за пределами сердцевины световода. Коэффициент затухания эванесцентной моды вдоль оси световода  $\eta_m = 2 \cdot \beta_m''$ , где  $\beta_m''$  – мнимая часть постоянной распространения, которая определяется из решения (1).

Рассчитаем коэффициенты затухания эванесцентных мод многомодового бесструктурного световода из стекла состава  $As_{30}Se_{50}Te_{20}$  в области  $\lambda = 2 - 10$  мкм. В качестве внешней поглощающей среды рассмотрим воду или ацетон, спектры молярного поглощения которых показаны на вставках к Рис.3 а,б.

Сравнение кривых на Рис.3 а,б показывает, что коэффициент затухания зависит от типа моды. Мода  $HE_{1m}$  сильнее распространяется в оболочку, чем мода  $TE_{0m}$  с таким же  $m$ , и, соответственно, имеет больший коэффициент затухания на заданной длине волны. Коэффициент затухания каждой моды растет с длиной волны, так что, например,  $\eta_m$  мод световода, погруженного в воду, имеют максимальные значения на больших длинах волн, в отличие от коэффициентов молярного поглощения, определенных для объемных образцов воды. Коэффициент затухания больше у мод с большим  $m$ .

**ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ВЫВОДЫ**

Нули ДГС халькогенидных стекол находятся в области полос поглощения колебательных спектров различных веществ, что показано в данной работе на примере стекла из селенида мышьяка и спектров воды и ацетона. Высшие моды многомодового халькогенидного световода имеют дисперсионные характеристики с  $\lambda_0$  в области меньших длин волн, что важно при накачке суперконтинуума импульсами на длинах волн 1.5 - 2 мкм. В отличие от маломодовых световодов с тонкой сердцевиной, использование многомодовых световодов имеет технологические преимущества. Однако, для селективного возбуждения высших мод нужны соответствующие методики. Ранее в работе [6] использовались специальные маски, перекрывающие часть пучка излучения теплового источника, сфокусированного на торец световода, что позволяло осуществлять ввод излучения под углом к оси волокна. Были проведены измерения поглощательной способности многомодового халькогенидного волокна из стекла состава  $As_2Se_3$ , погруженного в изопропиловый спирт, при различных углах ввода излучения в торец волокна и было показано, что при увеличении угла ввода растет поглощательная способность.

В работе [13] для селективного возбуждения высших мод халькогенидного световода было предложено специальное устройство, а в расчетах были получены спектры суперконтинуума при накачке на длине волны 1950 нм отдельно в каждой из первых трех высших мод бесструктурного световода с диаметром сердцевины 4.8 мкм.

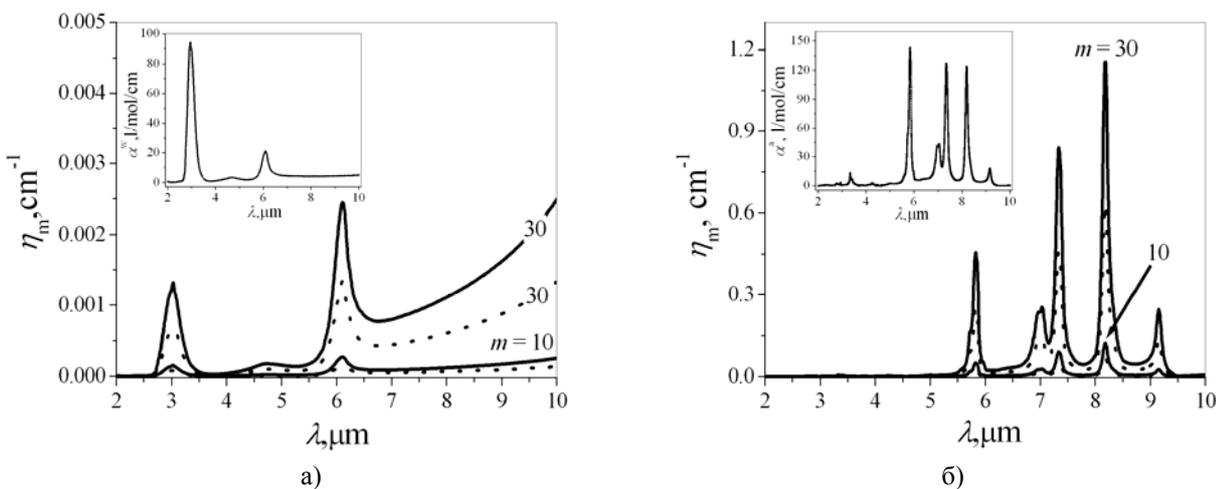


Рис.3. Спектральные зависимости коэффициентов затухания  $\eta_m$  мод  $HE_{1m}$  (сплошные линии) и  $TE_{0m}$  (пунктирные линии) бесструктурного световода с  $R = 150$  мкм из стекла состава  $As_{30}Se_{50}Te_{20}$ , погруженного: а) в воду (вставка: молярный коэффициент поглощения воды), б) в чистый ацетон (вставка: молярный коэффициент поглощения ацетона).

Эффективность нелинейной модуляции фазы электромагнитной волны с интенсивностью  $I$  в волоконном световоде определяется величиной  $I \cdot n_K / A_{эфф}$ , где  $n_K$  – керровская постоянная,  $A_{эфф}$  – эффективная площадь моды. Величина  $n_K$  в халькогенидных стеклах на 2-3 порядка больше, чем у кварцевого стекла. При использовании одномодовых световодов  $A_{эфф}$  уменьшается за счет уменьшения диаметра волокна. В рассматриваемых здесь многомодовых световодах доля мощности из-

лучения, распространяющегося в сердцевине, меньше у мод с большим  $m$ . Моды  $HE_{vm}$  имеют внутренние каустики, при больших  $v$  и  $m$  локализованы в сердцевине вблизи ее границы с оболочкой и, соответственно, имеют малую величину  $A_{эфф}$ . Поскольку часть поля моды распространяется вне сердцевины, нелинейная модуляция будет эффективнее в световоде с оболочкой из халькогенидного стекла.

Выявленные особенности высших мод многомодовых световодов указывают на то, что можно создавать гибридные волоконные устройства, объединяющие функции нелинейного преобразователя частоты и сенсорного элемента. Эффективность таких разработок основана на возможности варьировать составы халькогенидных стекол и подбирать многомодовый световод с сердцевиной нужного диаметра.

Использование высших мод многомодового халькогенидного световода для получения широкополосного когерентного излучения и химического анализа различных веществ позволяет оптимизировать метод волоконной эванесцентной спектроскопии среднего ИК диапазона.

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (проект № 16-13-10251).*

#### Литература

1. Shiryaev V.S., Churbanov M.F. // J. Non-Cryst. Solids. 2013. V. 377. P. 225-230
2. Romanova E.A., Korsakova S., Komanec M. et al. // IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron. 2017. V. 23. №2. P.1-7
3. Korsakova S., Romanova E., Velmuzhov A. et al. // J. Non-Cryst. Solids. 2017. V. 475. P.38-43
4. Корсакова С.В., Романова Е.А., Вельмузов А.П. и др. // Оптика и спектроскопия. 2018. № 9. С.402-410
5. Heo J., Monica Rodrigues M., Saggese S.J. et al. // J. of Appl. Opt. 1991. V. 30. № 6. P.3944-3951
6. Katz M., Katzir A., Schmitzer I. et al. // J. of Appl. Opt. 1994. V. 33. № 25. P.5888 – 5894
7. Sanghera J. S., Kung F. H., Pureza P. C. et al. // J. of Appl. Opt. 1994. V.33. №27. P. 6315 – 6322
8. Sanghera J.S., Kung F.H., Busse L.E. et al. // J. Am. Ceram. Soc. 1995. V. 78. №8. P. 2198 – 2202
9. Kubat I., Agger C.S., Møller U. et al. // Optics Express 2014. V.22. № 16. P. 19169- 19182
10. Petersen C.R., Møller U., Kubat I. et al. // Nature Photonics 2014. V.8. P.830-834
11. Møller U., Yu Y., Kubat I. et al. // Optics Express. 2015. V. 23. № 3. P.3282 - 3291
12. Wang N., Habib M.S., et al. // Proceedings of the Conference 2018 IEEE Photonics Society Summer Topical Meeting Series (SUM), 2018.
13. Snyder W. and Love J. D., Optical Waveguide Theory. Chapman and Hall, London, 1983
14. Zakery A., Elliot S.R, Optical nonlinearities in chalcogenide glasses and their applications. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2007.

### РАСЧЕТ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ В АНГАРМОНИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ ПОЛИХЛОРО-ЗАМЕЩЕННЫХ ДИБЕНЗОЛ-N-ДИОКСИНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ ДЛЯ АНАЛИЗА КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ

В.Ф. Пулин<sup>1</sup>, Е.В. Рыжова<sup>2</sup>, Т.Ю. Суринская<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Саратовский государственный технический университет им. Ю. А. Гагарина,

<sup>2</sup>Саратовский государственный аграрный университет им. Н.И. Вавилова

В работе выяснена результативность квантовых методов в предсказательных расчетах как структуры, так и спектров полихлорзамещенных дибензо-п-диоксинов. Дана интерпретация РСДД в ангармоническом состоянии.

#### ВВЕДЕНИЕ

Как известно, шестичленные циклические соединения (сопряженные) – это известные экотоксиканты, очень токсичны. Они представляют большую опасность для биологических объектов. Анализ их адиабатических потенциалов весьма затруднителен, и он связан с отнесением фундаментальных колебаний, которые имеют сходство с дейтерозамещенными. Теоретические исследования с использованием полуэмперических методов при анализе электронной структуры дают только качественную оценку, а квантовые методы расчета адиабатического потенциала в ангармоническом приближении в публикациях отсутствуют. Высокая степень опасности токсичного вещества позволила заострить внимание исследований на решение актуальных задач при разработке надежных методов по обнаружению и количественному анализу токсичных соединений на молекулярном уровне. При идентификации токсичных соединений, фрагменты которых содержатся в различных средах, спектроскопические методы исследования незаменимы, а также очень важны при установлении связи их строения с их физико-химическими свойствами. Базовыми молекулами являются шестичленный циклический диоксин ( $C_4H_4O_2$ ) и дибензо-п-диоксин, состоящий из двух бен-

зольных колец, соединенных кислородными мостиками (рис. 1). Имеется ограниченная информация (экспериментальная по ИК и КР) по колебательным спектрам. Проводилась теоретическая интерпретация по колебательным спектрам [1] в гармоническом приближении с учетом масштабирующих множителей, имеющая сходство с экспериментом. Итак, дан анализ ангармоническим колебаниям 1,4-диоксина и ДД-диоксина, которые имеют плоскую конфигурацию и симметрию  $D_{2h}$ .

#### РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Дан анализ ангармоническим колебаниям. Сделано отнесение частот, расчет электронной структуры и колебательного спектра. Родственным по электронной структуре соединением является молекула антрацена, по которой есть надежный экспериментальный материал (по колебательным спектрам). Проведен ангармонический анализ с учетом резонансов Ферми [2] и Дарлинг-Деннисона [3]. В таблицах 1 - 6 дано сравнение результатов квантовых расчетов геометрической структуры с экспериментом. Имеется незначительное различие в углах (0,1) и в длинах связей (0,04 Å). При исследовании указанных объектов использован квантовый метод функционала плотности DFT/B3LYP/G( $\alpha$ ). Он эффективен в расчетах шестичленных циклических соединений в ангармоническом приближении. Имеется хорошее согласие с экспериментом [5] в гармоническом приближении. В случае расхождения расчетных данных с экспериментом используется масштабирование [6]. Расчеты по молекулярным соединениям отражены в таблицах 2 и 3. Учет ангармонизма приводит к лучшему согласию с экспериментом. Проведены расчеты ангармонических постоянных. Таблицы 4 и 6. Они вносят поправки в пределах  $5 \text{ см}^{-1}$  для обертонов [7,8].

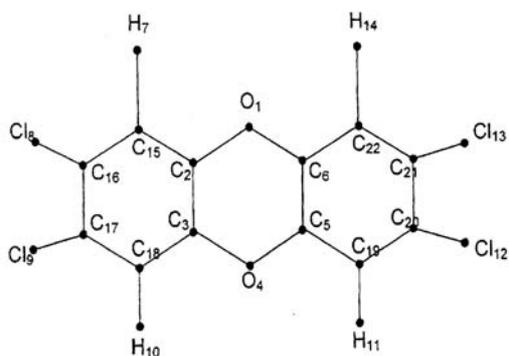


Рис. 1. Молекула диоксина

Проведен анализ колебательных состояний полихлорзамещенных дибензо-*n*-диоксина (РСДД). Они являются спутниками промышленного производства, представляющие большую опасность для экологии. Данные токсичные вещества могут накапливаться в живых организмах, представляя угрозу для существования. Особенно опасен тетрахлордибензо-*n*-диоксин ( $\beta$ -ТСДД). Имеется скупая информация по данному соединению [5], в частности по колебательным спектрам ДД и его хлорпроизводным (октахлордиоксина ОСДД и другим (моно, ди, тетра, гекса)). По ним отсутствует отнесение фундаментальных полос. Большинство исследователей считают, что РСДД имеет плоскую структуру, опираясь на результаты экспериментальной геометрии.

Целью данной работы является – выяснить результативность квантовых методов (*ab initio*) в предсказательных расчетах как структуры, так и спектров полихлорзамещенных дибензо-*n*-диоксинов. (симметрия  $D_{2h}$ ). Дана интерпретация РСДД в ангармоническом состоянии.

1,4-диоксина ( $C_8H_6O_2$ ), дибензо-*n*-диоксин ( $C_{12}H_8O_2$ ) и родственный по электронной структуре антрацен ( $C_{14}H_{10}$ ) являются основанием для выбора квантового метода для исследования. Функционал плотности DFT/B3LYP/G3/G( $\alpha$ ) (см. таблица 6). Этот метод апробирован в [5,6].

Только для валентных и деформационных частот (для связей СН) имеются расхождения (от  $100$  до  $200 \text{ см}^{-1}$ ). Для устранения расхождений используется масштабирующее соотношение:

$$\nu_{\text{анг}} = 0,9813 - 8,35 \cdot 10^{-6} \nu_{\text{гарм.}}$$

Расчеты геометрии ТСДД и ОСДД квантовым методом отражены в таблице 6 и имеется незначительное различие с экспериментом. отсюда следует, что учет ангармонизма приводит к лучшему согласию с экспериментом (валентные и деформационные колебания СН. Ангармонические постоянные используются при анализе обертоновых состояний.

Для ОСДД-молекулярного соединения ангармонизм оказывает влияние на высокочастотные колебания. Квантовые расчеты приводят к пересмотру отнесения частот колебаний ОСДД по типам симметрии В1 и В2.

Валентные и деформационные колебания связей лежат в низкочастотном диапазоне (С-Сl). Плоские низкочастотные колебания являются характеристичными и лежат ниже диапазона 350 см<sup>-1</sup>.

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

Впервые проведены исследования в ангармоническом приближении.

Получены следующие результаты:

1. Решение в ангармоническом приближении колебательных задач позволяет получать результаты параметров, имеющие хорошее согласие с экспериментом (ангармонизму подвержены валентные и деформационные колебания связей СН).
2. Масштабирующие соотношения позволяют проводить предсказательные расчеты фундаментальных колебаний
3. Резонанс Ферми подтверждает расщепление спектральных линий в ДД-диоксине [5]

При переходе от антрацена к ДД-диоксину с заменой углеродного мостика на кислородный мало сказывается на изменении частот фундаментальных колебаний. Имеется малое изменение интенсивностей линий. К сожалению, учет резонансов Ферми и Дарлинг-Деннисона не приводит к лучшему согласию расчетных данных с экспериментом

**Таблица 1.**

Геометрические параметры центрального кольца в молекулах 1,4-диоксина, антрацена, дибензо-п-диоксина.

Длины связей, углы	1,4-диоксин	Антрацен [2]*	DD-диоксин [1]
R <sub>оо/сс</sub>	1,39	1,40(1,40)	1,39(1,38)
R <sub>сс</sub>	1,33	1,45(1,44)	1,40
A <sub>соо/ссс</sub>	112,02	121,8(121)	116,43(116)
A <sub>ооо/ссс</sub>	123,99	119,1(119,3)	121,78(122)
A <sub>ссн/ссс</sub>	112,61	118,6(118,4)	118,13(118)

В скобках приведены экспериментальные данные из [1,2]

**Таблица 2.**

Интерпретация колебательного спектра 1,4-диоксина (C<sub>4</sub>H<sub>4</sub>O<sub>2</sub>)

№/№.	Тип сим.	Форма	V <sub>сxp</sub>	V <sub>h</sub>	V <sub>anh</sub>	V <sub>m**</sub>	КР (A <sup>4</sup> /a.e.m.)
1	AG	q <sub>сн</sub>	3121	3280	3139	3129	257,6
2	AG	Q <sub>со</sub> , Y <sub>соо</sub>	1686	1789	1747	1729	10,07
3	AG	Q <sub>сс</sub> , β, Y <sub>ссс</sub>	1211	1253	1227	1217	23,90
4	AG	Q <sub>сс</sub> , β, Y <sub>ссс</sub>	938	941	925	916	24,56
5	AG	Y <sub>соо</sub>	516	526	519	514	0,69
6	BIG	P <sub>сн</sub>	748	757	747	739	11,52
7	B2G	P <sub>сн</sub> , X <sub>сс</sub>	857	869	853	847	0,34
8	B2G	P <sub>сн</sub> , X <sub>сс</sub>	542	544	539	531	7,97
9	B3G	q <sub>сн</sub>	3121	3257	3139	3107	123,3
10	B3G	Q <sub>сс</sub> , β, Y <sub>ссс</sub>	1312	1349	1317	1308	1,70
11	B3G	Q <sub>сс</sub> , β, Y <sub>ссс</sub>	1078	1067	1034	1037	3,68
12	B3G	Q <sub>со</sub> , Y <sub>соо</sub>	697	705	698	687	5,32
13	AU	P <sub>сн</sub> , X <sub>сс</sub>	-	876	861	853	0
14	AU	P <sub>сн</sub> , X <sub>сс</sub>	-	443	439	433	0
15	BIU	q <sub>сн</sub>	3130	3260	3168	3110	004
16	BIU	Q <sub>сс</sub> , β, Y <sub>ссс</sub>	1395	1443	1404	1398	4,69
17	BIU	Q <sub>сс</sub> , β, Y <sub>ссс</sub>	990	1079	1057	1049	3,08
18	BIU	Q <sub>со</sub> , Y <sub>соо</sub>	901	911	894	887	123,1
19	B2U	q <sub>сн</sub>	3121	3277	3137	3126	21,37
20	B2U	Q <sub>со</sub> , Y <sub>соо</sub>	1640	1733	1673	1675	107,3

Продолжение таблицы 2							
21	B2U	Q <sub>cc</sub> , β, Y <sub>ccc</sub>	1201	1322	1291	1283	118,5
22	B2U	Q <sub>cc</sub> , β, Y <sub>ccc</sub>	1011	1043	1023	1014	101,8
23	B3U	P <sub>CH</sub> , X <sub>cc</sub>	739	757	748	738	64,66
24	B3U	X <sub>cc</sub>	124	89	95	87	23,87

\*\* С учетом масштабирующего соотношения

Таблица 3.

Интерпретация колебательного спектра антрацена и DD-диоксина

№	Форма колеб.	V <sub>экс</sub> [2]	V <sub>h</sub>	V <sub>ah</sub>	KP	V <sub>экс</sub> [1,11]	V <sub>h</sub>	V <sub>ah</sub> KP	
			Антрацен			DD-Диоксин			
Тип симметрии Ag									
1	q <sub>ch</sub>	3088	3209	3077	755,4	-	3224	3081	575,1
2	q <sub>ch</sub>	3044	3183	3048	315,7	-	3209	3066	252,7
3	q <sub>ch</sub>	3044	3174	3027	44,18	-	-	-	-
4	Q,β,y	1561	1609	1573	86,20	1621	1673	1636	59,01
5	Q,β,y	1480	1535	1501	110,8	1500	1552	1521	5,70
6	Q,β,y	1414	1444	1408	737,8	-	1374	1341	16,98
7	Q,β,y	1261	1304	1281	52,13	1226	1259	1237	155,7
8	Q,β,y	1165	1200	1185	4,87	1154	1186	1171	7,88
9	Q,β,y	1007	1040	1026	49,73	1030	1060	1042	48,18
10	Q,β,y	755	766	755	60,37	726	742	733	18,70
11	y	601	642	636	1,31	564	574	566	1,56
12	y	396	399	395	25,45	398	399	395	28,49
Тип симметрии B1g									
13	p,x	949	958	953	0,28	-	929	925	3,10
14	p,x	755	776	764	10,37	748	765	757	2,54
15	p,x	480	489	480	0,64	450	458	452	2,02
16	p,x	217	239	234	6,38	278	274	270	11,86
17	p,x	986	991	975	0,23	-	963	964	0,02
18	p,x	894	920	899	3,65	-	-	-	-
19	p,x	848	851	836	3,30	-	858	849	10,84
20	p,x	755	783	771	12,50	-	696	709	0,37
21	p,x	577	591	582	0,10	-	556	553	0,08
22	p,x	255	273	267	0,25	223	232	230	4,32
Тип симметрии B3g									
23	q <sub>ch</sub>	3044	3196	3053	251,2	-	3197	3063	112,5
24	q <sub>ch</sub>	3044	3178	2969	10,72	-	3218	3072	71,44
25	Q,β,y	1634	1685	1648	1,69	-	-	-	-
26	Q,β,y	1596	1641	1608	8,75	1586	1639	1604	50,53
27	Q,β,y	1403	1428	1401	3,14	-	1496	1467	2,28
28	Q,β,y	1304	1308	1293	0,01	-	1303	1283	0,14
29	Q,β,y	1181	1223	1206	40,94	1192	1214	1192	11,49
30	Q,β,y	1130	1135	1116	0,74	1094	1120	1100	0,70
31	Q,β,y	929	928	918	0,17	-	904	895	4,47
32	y	523	534	532	11,31	534	543	540	5,63
33	y	369	394	393	4,06	-	442	440	2,76
№	Форма	V <sub>экс</sub> [2]	V <sub>h</sub>	V <sub>ah</sub>	ИК	V <sub>экс</sub> [1,11]	V <sub>h</sub>	V <sub>ah</sub>	ИК
Тип симметрии Au									
34	P <sub>CH</sub> , X <sub>cc</sub>	979	989	975	0	-	962	964	0
35	P <sub>CH</sub> , X <sub>cc</sub>	860	872	857	0	843	858	853	0
36	P <sub>CH</sub> , X <sub>cc</sub>	778	759	748	0	700	681	713	0
37	P <sub>CH</sub> , X <sub>cc</sub>	488	508	501	0	543	551	549	0
38	XX <sub>cc</sub>	126	124	119	0	-	126	123	0
39	q <sub>ch</sub>	3058	3196	3055	72,95	-	3218	3072	21,04
40	q <sub>ch</sub>	3026	3179	3033	16,73	-	3197	3061	3,07
41	q <sub>ch</sub>	3026	3172	3009	11,09	-	-	-	-

Продолжение таблицы 3									
Тип симметрии $B_{1u}$									
42	Q,B,y	1623	1688	1651	6,85	1628	1687	1647	1,60
43	Q,B,y	1462	1501	1472	1,22	1462	1517	1489	5,70
44	Q,B,y	1316	1348	1329	4,22	1290	1321	1299	0,57
45	Q,B,y	1269	1298	1283	8,22	-	1221	1202	9,29
46	Q,B,y	1148	1182	1166	4,67	1120	1141	1125	21,59
47	Q,B,y	906	918	908	1,73	854	862	850	19,98
48	y	650	662	654	0,80	-	683	673	0,18
49	y	234	235	234	1,29	242	241	236	1,51
Тип симметрии $B_{2u}$									
50	$q_{en}$	3058	3209	3066	77,44	-	3224	3082	18,19
51	$q_{en}$	3040	3182	3050	0,00	-	3209	3075	28,99
52	Q,B,y	1536	1597	1557	4,46	1590	1644	1605	43,49
53	Q,B,y	1447	1501	1468	1,87	1495	1543	1508	655,3
54	Q,B,y	1398	1433	1402	0,59	1305	1348	1318	98,59
55	Q,B,y	1344	1394	1374	3,99	1300	1338	1308	557,5
56	Q,B,y	1165	1200	1182	1,64	-	-	-	-
57	Q,B,y	1126	1175	1163	1,32	1154	1186	1171	0,74
58	Q,B,y	999	1036	1023	3,94	1030	1061	1044	9,54
59	Q,B,y	811	826	816	0,00	830	855	841	51,88
60	y	620	618	609	8,18	610	624	619	1,90
Тип симметрии $B_{3u}$									
61	p,x	954	963	958	6,54	922	929	926	9,15
62	p,x	883	893	886	54,55	-	-	-	-
63	p,x	727	746	735	60,32	748	763	755	121,79
64	p,x	468	486	476	12,76	452	466	458	1,77
65	p,x	386	389	381	0,08	300	304	302	0,16
66	p,x	108	93	90	0,86	-	36	38	1,66

Таблица 4.

Постоянные ангармоничности для молекулы DD-диоксина (в  $cm^{-1}$ )\*

$i;j$	$X_{ij}$	$i;j$	$X_{ij}$	$i;j$	$X_{ij}$	$i;j$	$X_{ij}$
1;1	-7,99	31;22	-3,03	40;4	-3,26	47;38	14,38
2;1	-30,52	32;21	-3,07	40;23	-6,29	47;39	-3,49
2;2	-8,02	33;12	3,55	40;24	-3,12	47;42	-3,36
3;2	-3,27	33;14	13,04	40;38	-5,28	47;46	-13,05
5;3	-5,76	33;31	3,17	40;39	-3,13	47;47	-12,47
14;12	4,89	35;30	-4,17	42;7	3,17	48;1	-6,93
14;13	3,68	36;1	-32,00	42;22	-3,38	48;4	-18,06
14;14	6,17	36;2	-30,56	46;1	-35,48	48;5	-4,79
15;14	4,30	36;4	4,00	46;2	-27,45	48;21	12,59
17;14	3,61	36;21	-35,40	46;4	14,56	48;22	9,92
21;1	-35,49	36;22	-27,69	46;13	-3,14	48;24	-5,73
21;2	-27,39	36;36	-7,99	46;21	-49,87	48;25	-3,28
21;4	-17,66	37;1	-30,55	46;22	-12,89	48;39	-25,46
21;13	-3,14	37;2	-32,09	46;23	-28,03	48;40	-4,22
21;21	-12,49	37;4	4,42	46;32	-3,06	48;46	16,49
22;1	-27,55	37;21	-27,52	46;36	-35,37	49;3	-17,78
22;2	-36,02	37;22	-35,92	46;37	-27,56	49;5	-3,60
22;7	-3,21	37;23	3,49	46;39	-30,77	49;22	7,26
22;12	-3,04	37;36	-30,59	46;46	-12,42	49;23	-6,58
22;21	-12,72	37;37	-8,01	47;1	-27,59	49;24	-6,66
22;22	-12,56	38;3	-3,11	47;2	-35,99	49;37	4,17
23;4	16,54	38;4	-7,80	47;3	14,08	49;38	-11,82
23;5	-3,96	38;5	-5,83	47;7	-3,21	49;47	13,93
23;21	-15,36	38;22	7,19	47;12	-3,03	49;48	-5,26
23;22	-3,42	38;24	-18,37	47;21	-12,89	50;23	-3,32
24;3	-3,78	39;4	-7,33	47;22	-50,11	50;48	-3,08
24;5	-3,58	39;21	10,16	47;23	-3,91	51;41	-4,44
24;23	-4,22	39;22	10,92	47;24	14,11	56;14	3,56
25;23	-3,68	39;23	30,04	47;31	-3,01	56;17	3,10

Продолжение таблицы 4.							
31;12	6,44	39;38	-4,23	47;36	-27,72	58;29	-3,15
31;14	4,72	40;3	-5,03	47;37	-35,88	59;10	-5,54

\*Нумерация нормальных колебаний соответствует тому же порядку следования по типам симметрии

Таблица 5.

Оптимизированные геометрические параметры полихлор замещенных тетрахлордibenзо-п-диоксина

Длины связей	β-		Валентные углы	β-	
	TCDD	OCDD		TCDD	OCDD
R(1,2)	1,378	1,373	A(2,1,6)	116,18	117,20
R(2,3)	1,394	1,387	A(1,2,3)A(3,2,1)	121,40	120,07
R(2,15)	1,398	1,406	5)A(2,15,7)	120,42	119,30
R(15,16)	1,399	1,404	A(2,15,16)A(8,	18,49	120,14
R(16,17)		1,733	16,17)	119,67	121,78
R(7,15)	1,745	1,734	A(15,16,17)	119,79	119,91
R(8,16)					

Таблица 6.

Ангармонические постоянные  $X_{ij}$  (в  $\text{см}^{-1}$ )  $\beta$  – TCDD\*

$i,j$	$X_{ij}$								
1;1	-15,23	24;21	-4,16	36;36	-15,23	46;22	14,58	47;47	5,50
12;1	-4,25	31;1	-4,19	37;2	-6,53	46;24	-4,17	49;1	-4,93
13;12	8,17	31;12	4,48	38;3	-7,22	46;31	-4,16	49;21	-5,21
13;13	7,78	31;13	6,19	38;21	5,16	46;36	-61,00	49;36	-4,82
14;13	6,61	31;21	-4,18	38;22	-17,96	46;38	12,41	49;46	-5,17
17;1	-4,16	32;12	4,36	40;2	-4,06	46;46	-15,24	56;1	-4,09
21;1	-60,99	32;13	16,49	40;39	-4,39	47;1	-27,75	56;21	-4,10
21;3	20,41	36;1	-60,92	42;18	-5,73	47;3	-12,11	56;36	-4,10
21;12	-4,22	36;12	-4,24	46;1	-61,01	47;21	7,50	56;46	-4,10
21;17	-4,16	36;17	-4,16	46;3	6,62	47;23	-4,17	57;18	6,12
21;21	-15,24	36;21	-61,00	46;12	-4,23	47;36	-4,35	57;42	-5,36
22;3	-24,87	36;22	-4,69	46;17	-4,15	47;38	-10,30	60;59	-4,66
22;21	22,02	36;31	-4,19	46;21	-60,97	47;46	8,33		

\* Приведены значения ангармонических постоянных, превышающих по модулю  $4 \text{ см}^{-1}$

### Литература

1. Свердлов Л.М., Ковнер М.А., Крайнов Е.П. Колебательные спектры многоатомных молекул, М. Наука, 1970, стр. 560
2. Гастилович Е.А. // Успехи химии 2000. Т.69. №12. С. 1128-1148
3. Beresin, V.I. Elkin M.D. // J. Mol. struct.1992. V.272. P.95-109
4. Элькин М.Д., Пулин В.Ф., Костерина Э.К. // Журнал прикл. спектр. 2005. Т.17. №4. С.450-453
5. Элькин П.М., Пулин В.Ф. Молекулярная динамика и колебательные спектры аденина, гуанина, пурина, цитозина, урацила 5-я Всероссийская конференция. Молекулярное моделирование. Тезисы докладов, МГУ, Москва, 2007 г., С. 106
6. Березин К.В. // Журнал физической химии 2005. Т.79. №3. С. 508-517
7. Элькин П.М., Пулин В.Ф. // Вестник СГТУ 2006. Т. 1. № 2. С.53-59
8. Элькин М.Д., Пулин В.Ф. // Известия вузов. Физика. 1998. № 2. С.53-64

## МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ ФИЗИКИ

ФИЗИКА ЛАЗЕРОВ НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ  
В САРАТОВСКОМ УНИВЕРСИТЕТЕ

В. И. Цой, В. М. Аникин

*Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского*

Представлен обзор работ Б. Г. Цикина и его учеников, которые были выполнены в Саратовском государственном университете в первые годы разработки лазеров на свободных электронах.

В 2017 году праздновалось столетие учрежденного в 1917 г. физико-математического факультета Саратовского университета, из которого в 1945 г. был выделен физический факультет [1, 2]. В 2019 г. Саратовский университет отметит 110-летнюю годовщину со дня открытия в 1909 г. как десятого университета России [3, 4]. В связи с этими датами естественно отдавать должное исследованиям прошлых лет на физическом факультете. Данные заметки посвящены пионерскому вкладу небольшой группы Бориса Геннадиевича Цикина, работавшей на кафедре электроники, в развитие физики лазеров на свободных электронах в первые годы усилий физиков различных стран по их созданию.

Источники на свободных электронах обладают уникальными возможностями генерации мощного электромагнитного излучения, управляемого по длине волны, длительности и частоте следования импульсов, в широчайшем спектральном диапазоне, что недоступно другим отдельным типам лазеров. Этот диапазон простирается от длин волн микроволнового излучения до жесткого когерентного рентгеновского излучения с длиной волны порядка нанометра и гамма-излучения с энергией фотона в десятки МэВ.

Действие источников излучения на свободных электронах состоит в вынужденном излучении модулированного по плотности пучка электронов, что можно осуществить различными способами. Теория показывает, что многие выводы, сделанные для одной схемы лазерных источников, применимы и к другим схемам. Наиболее близкая аналогия существует между схемой с излучением ондулятора и схемой с обратным комптоновским рассеянием [5]. Ондуляторное излучение электронного пучка в периодическом поперечном магнитном поле играет ключевую роль в лазерной генерации свободными электронами (FEL), в том числе в рентгеновском диапазоне [6, 7], тогда как мощные источники гамма-излучения на свободных электронах (LSR) удалось успешно осуществить с помощью обратного комптон-эффекта [8].

1 сентября 2017 года в **Германии** (Гамбург) был запущен самый крупный в мире Европейский рентгеновский лазер на свободных электронах (ЕРЛСЭ, EXFEL) [9]. Длина волны, длительность и частота следования импульсов этого мощного лазера позволяют осуществить исследования физико-химических процессов с атомным разрешением. Российским ученым предоставлены приоритетные возможности работы с ЕРЛСЭ, что обусловлено как материальным вкладом России в разработку этого проекта, так и значительным вкладом российских исследователей в физику лазеров на свободных электронах во все годы ее развития. Нельзя, прежде всего, не сказать, что основополагающие принципы, которые лежат в основе рентгеновских и гамма-источников на свободных электронах, установлены отечественными учеными. Вынужденное излучение при комптоновском рассеянии теоретически открыли П. Л. Капица и П. А. М. Дирак (1933) [10], ондуляторное излучение и его уникальные свойства открыл В. Л. Гинзбург (1947) [6, 10], возможность получить рентгеновское и гамма-излучение при комптоновском рассеянии на встречном пучке электронов обосновали Ф. Р. Арутюнян и В. А. Туманян из Физического Института Госкомитета Совета министров СССР по использованию атомной энергии (1963) [11]. Только позже Р. Х. Пантелл с сотрудниками обосновали возможность использования вынужденного комптоновского рассеяния для создания лазера (1968, Стэнфорд) [12]. Первым прототипом FEL считается ондуляторный микроволновый усилитель Р. Филлипса (1960) [7], а первый инфракрасный лазерный усилитель на свободных электронах и генератор осуществили Дж. Мэйди с сотрудниками (1976–1977, Стэнфорд) [7].

Центральной проблемой в первые годы на пути к реализации лазера на свободных электронах было отыскание таких условий, при которых достигалось бы достаточное для генерации

усиление. Почти одновременно с выходом работы Пантелла [12] в конце шестидесятых годов на кафедре электроники и в лаборатории квантовой электроники НИИ механики и физики СГУ начал теоретические исследования по физике комптон-лазера доцент Борис Геннадиевич Цикин. Вскоре появились публикации возглавляемой им научной группы в центральных журналах, в частности, работы [13–16]. Одной из главных мотиваций этих работ авторы считали возможность плавной перестройки частоты излучения при комптоновском рассеянии. Для выяснения условий, обеспечивающих максимальное усиление сигнальной волны, минимальный порог генерации, плавную перестройку частоты, была разработана полуклассическая нерелятивистская теория комптон-лазера и получены согласующиеся результаты при корпускулярном и волновом подходах к его описанию. Успешному достижению этих результатов способствовали оригинальные приемы сведения нестационарного уравнения Шредингера к стационарному уравнению и использования теории эффекта Капицы-Дирака отражения электронов от стоячей электромагнитной волны.

В обзоре В. Л. Кузнецова, в журнале УФН [17], были отмечены и обсуждены предложенные и теоретически обоснованные саратовской группой способы стимулирования процессов усиления излучения нерелятивистскими электронными пучками в комптон-лазерах. Один из этих способов – существенное увеличение модуляции электронного пучка за счет гашения импульса отдачи электрона волной на разностной частоте волн накачки и сигнала. Другой отмеченный результат – увеличение усиления при переходе от коллинеарной схемы к неколлинеарной схеме волн сигнала и накачки с различающимися направлениями волн и электронного потока. В названном обзоре на основании этих результатов была поставлена общая задача оптимизации углов между направлениями волн сигнала и накачки, а также их ориентации относительно электронного потока. Эта задача была решена для релятивистских электронов Д. Ф. Зарецким, Э. А. Нерсесовым, М. В. Федоровым, сотрудниками двух академических институтов – Физического института имени П. Н. Лебедева и Института общей физики (1981) [18, 19]. К сожалению, они не отметили предваряющего характера работ саратовской группы. С другой стороны, в обзоре [20] ссылка на работу группы Б. Г. Цикина следует сразу за ссылкой на пионерскую работу по комптон-лазерам Р. Х. Пантелла с сотрудниками.

Существенно отметить, что с исследованиями по теории комптон-лазера в группе Б. Г. Цикина был сопряжен серьезный общий анализ процессов электронно-волнового взаимодействия в приборах СВЧ, разработаны оригинальные эффективные методы лазерной диагностики и СВЧ диагностики электронных пучков и плазмы. Результаты этих работ представлены в центральных научных журналах и защищены рядом патентов. Это обстоятельство отмечено в [21].

#### Литература

1. Аникин В. М. // Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика. 2018. Т. 18. № 1. С. 64–79
2. Аникин В. М. // Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика. 2018. Т. 18. № 2. С. 149–157
3. Аникин В. М. // УФН. 2016. Т. 186. № 2. С. 169–173
4. Аникин В. М. // Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика. 2014. Т. 14. № 1. С. 53–58
5. Федоров М. В. // УФН. 1981. Т. 135. № 2. С. 213–236
6. Кулипанов Г. Н. // УФН. 2007. Т. 177. № 4. С. 384–392
7. Винокуров Н. А., Шевченко О. А. // УФН. 2018. Т. 188. № 5. С. 493–507
8. Hajima R. LINAC-based laser Compton scattering X-ray and gamma-ray sources. // Proceeding of LINAC 2012. Tel-Aviv. Israel. WE1A05. P. 734–737
9. В Германии открыли самый мощный рентгеновский лазер на свободных электронах. URL: <http://tass.ru/nauka/4525693> (дата обращения 02.12.2017)
10. Мухин К. Н., Суставнов А. Ф., Тихонов В. Н. Российская физика Нобелевского уровня. М: Физматлит, 2006. 228 с.
11. Arutyunian F. R., Tumanian V. A. // Phys. Lett. 1963. V.4. P.176–178
12. Pantell R. H., Soncini G., Puthoff H. E. // IEEE J. Quantum. Electron. 1968. V.4. P.905–907
13. Дубровский В.А., Цикин Б.Г. // Радиотехника и электроника. 1972. Т. 17. №7. С. 1433–1439
14. Дубровский В. А., Лернер Н.Б., Цикин Б.Г. // Квант. электрон. 1975. Т. 2. С. 2292–2302
15. Соловьев А.П., Цикин Б.Г. // Письма ЖТФ. 1977. Т. 3. С. 307–309
16. Дубровский В. А., Цикин Б.Г. // Квант. электрон. 1977. Т. 4. С. 1473–1481
17. Кузнецов В.Л. // УФН. 1979. Т.129. № 3. С. 541–547
18. Zaretskii D. F., Nersesov E. A., Fedorov M. V. // Sov. Phys. JETP. 1981. V. 53. P. 508–512
19. Fedorov M. V., Nersesov E. A., Zaretskii D. F. // Phys. Lett. 1981. V. 82A. P. 227–228
20. Gover A., Yariv A. // Appl. Phys. 1978. V.16. P. 121–138
21. Аникин В. М., Цой В. И. // Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Физика. 2018. Т. 18. № 2. С. 144–148

## ИДЕИ ОТ ЛУКРЕЦИЯ В ЗАКОНАХ ФИЗИКИ

В.И.Цой

*Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского*

Статья служит теме переключки гипотез античных мыслителей с идеями физики: механики, статистической физики, акустики, оптики. Еще С.И. Вавилов отметил поразительную действенность идей древних атомистов, собранных в поэме Тита Лукреция "О природе вещей". Среди них идеи об атомах в пустоте, о времени как неотъемлемом свойстве движения, об исчезающей для наблюдения неопределенности в траекториях атомов, о независимости скорости падающих тел от их веса, правильный эскиз броуновского движения.

В данной статье этот список пополнен ссылками на стихи, в которых зарождаются идеи энтропии в статистической физике, конечной скорости света в пустоте и пространственно подобных событий в релятивистской теории, частиц-квантов акустических и тепловых полей.

Предложены некоторые реконструкции развития гипотез Лукреция. В частности, на пути отказа от идеи Эпикура об универсальной однонаправленной тяжести, физика Лукреция прямо приводит к картине инерциального движения тел в пустоте.

## ВВЕДЕНИЕ

Свежесть и действенность идей древних философов всегда привлекала, и будет привлекать, естествоиспытателей. Поразительно, что многие гипотезы древности созвучны с физическими законами, открытыми через тысячелетия. В особенности это касается первых известных нам античных атомистов – Левкиппа, Декарта, Эпикура (5-4 в.в. до н.э.) и Лукреция (1 в.н.э.). Как известно, в наиболее целостном виде древняя атомистика сохранилась в гениальной поэме Лукреция "О природе вещей" [1]. Вероятно, соответствие идей, собранных в этой книге, с научными физическими законами лучше всего раскрыто в замечательной статье С. И. Вавилова "Физика Лукреция" [2]. Были и более поздние опыты прочтения Лукреция в свете современной физики, например в статье [3].

Нельзя не упомянуть, что у атомистов были серьезнейшие оппоненты, прежде всего Аристотель [4]. Все основные идеи и положения атомистического учения были им исследованы, и во многих случаях эти идеи совпадают с идеями самого Аристотеля, но в самом главном, в существовании неделимых плотных тел (атомов) и пустоты, в которой движутся тела, – нет. Поэтому атомистической структуре материи и взаимодействия созвучны идеи, воспринятые, выдвинутые и собранные именно атомистами.

Можно по-разному относиться к вычитыванию у античных натурфилософов идей, действенных в современной науке: считать это случайными совпадениями, или пророчествами, или схоластическими подтасовками, или привнесением современных знаний переводчиками, или чем-то другим. Но можно руководствоваться такими свойствами познания, прочувствованными уже Аристотелем, как его непрерывность, преемственность, тем, что по выражению М. Планка, "...законы нашего мышления совпадают с закономерностями, имеющими место в процессе получения впечатлений от внешнего мира, и, следовательно, человек может судить об этих закономерностях при помощи чистого мышления..." [5]. С этой точки зрения носящая качественный характер физика древности служит органически неотделимым началом современной физики, держащейся на экспериментальных измерениях и прочном математическом каркасе. Данная статья служит продолжению темы переключки физики древних атомистов, в интерпретации Лукреция, с современностью.

## С. И. ВАВИЛОВ О ФИЗИКЕ ЛУКРЕЦИЯ

С.И. Вавилов в первую очередь отмечает, что нередко читатель "Природы вещей" находит в ней то, что считает основой своего собственного мировоззрения. Тут же следует предостережение о том, что мы часто вычитываем у Лукреция больше, чем он в действительности намеревался сказать. Например, строки

"Так производит детей жеребёвкой Венера и предков

Волосы, голос, лицо возрождает она у потомков,

Ибо ведь это всегда из семян возникает известных

Так же, как лица у нас и тела, да и все наши члены" ( Кн.4; 1223)

вовсе не означают статистических соотношений Менделя в современной генетике.

Однако удивительно, что все же есть возможность увидеть в гипотезах древних атомистов зародыши идей современной физики и что таких идей так много. С.И. Вавилов выделил целую россыпь вполне соответствующих физической науке положений из атомистического учения от Лукреция. Приведем некоторые из этих положений, со ссылками на стихи, цитированные С.И. Вавиловым (см. Приложение):

- принцип сохранения тел-атомов; (кн. 1; 248)
- принятие понятия пустоты, которая обеспечивает место телам и их движению; (кн. 1; 426)
- положение о времени как свойстве тел в их движении; (кн. 1; 459)
- безграничность пространства и бесконечность вселенной; (кн. 1; 964)
- вывод о конечности предела делимости тел, то есть об атомах; (кн. 1; 615)
- заключение об ограниченности разнообразия атомов; (кн. 2; 479)
- предположение о малых случайных отклонениях в движениях первоначал, движущихся по непересекающимся линиям "сверху вниз", для образования вещей. С. И. Вавилов сопоставляет это свойство с квантово-механическим принципом неопределенности; (кн. 2; 216)
- эскиз вполне правильной теории броуновского движения, предваряющей на два тысячелетия М. Смолуховского, А. Эйнштейна и Ж. Перрена; (кн. 2; 80), (кн. 2; 133)
- утверждение о независимости скорости падающих тел в пустоте от веса, за тысячелетие до Н. Галилея; (кн. 2; 231)
- допустимость разных учений для объяснения одного явления; (кн. 5; 529), (кн. 5; 729)
- принятие того, что фундаментальные явления природы недостижимы для наших чувств; (кн. 2; 312)

#### НЕКОТОРЫЕ ДОБАВЛЕНИЯ В СПИСКИ ДЕЙСТВЕННЫХ ИДЕЙ ИЗ ЛУКРЕЦИЯ

Списки перекликающихся с сегодняшним днем идей из Лукреция можно пополнять. Например, можно увидеть, что Лукреций за десятки веков до Л. Больцмана понимал, что представление об атомах тесно связано с преобладанием возможности разрушения по сравнению с возможностью воссоздания - с энтропией:

Ибо, мы видим, скорей что угодно разрушиться может,  
 Чем восстановленным быть; поэтому то, что доселе  
 Долгие дни и века бесконечных времен миновавших  
 Врозь разнесли, раздробив и на мелкие части расторгнув,  
 Вновь в остальные века никогда не могло б воссоздаться.  
 Но, несомненно, предел раздробленью известный положен,  
 Так как мы видим, что вещь возрождается каждая снова. (кн.1; 556)

Одно из естественных созвучий древних гипотез и современной физики касается корпускулярной стороны любого физического поля. Действительно, в физике Лукреция есть только тела и пустота, поэтому

Звуки идут через стены домов и замкнутые двери,  
 Внутри пролетая; мороз до костей проникает жестокий.  
 Если б пустот никаких, по каким бы тела проходили,  
 Не было, ты бы никак явлений таких не увидел. (Кн.1; 354)

Здесь на современном языке речь идет о фононах.

Естественно, что в атомистической картине мира допустимы предположение о материальном происхождении жизни и космологическая гипотеза о том, что земля не является единственным местом во вселенной, пригодным для существования жизни:

Если вещей семена неизменно способна природа

Вместе повсюду сбивать, собирая их тем же порядком,  
 Как они сплочены здесь,- остается признать неизбежно,  
 Что во вселенной еще и другие имеются земли,  
 Да и людей племена и также различные звери. (кн. 2; 1072)

### НЕКОТОРЫЕ РЕКОНСТРУКЦИИ РАЗВИТИЯ ГИПОТЕЗ ИЗ ЛУКРЕЦИЯ

Значительной трудностью в прочтении Лукреция и препятствием к серьезному восприятию его идей является допущение им различных, трудно совместимых друг с другом свойств физического мира. С одной стороны, Лукреций допускает различные объяснения одного и того же явления теми, кто "ощупью путь пролагает", хотя "из этих причин непременно одна побуждает", (кн. 5; 529). С другой стороны, Лукреций утверждает безграничность вселенной, например во фрагменте "всё бесконечной она остаётся во всех направлениях" (кн. 1; 967), но одновременно безоговорочно принимает трудно совместимую с этим картину Эпикура с "верхом" и "низом" на неподвижной земле:

Тут одного берегись и не верь утверждению, Меммий,  
 Что устремляется всё к какому-то центру вселенной,  
 Будто поэтому мир и способен держаться без всяких  
 Внешних толчков; и никак никуда разложиться не может  
 Верх или низ у него, ибо всё устремляется к центру  
 (Если, по-твоему, вещь на себя опираться способна),  
 Что, находясь под землей, стремятся к ней тяжести снизу  
 И пребывают на ней, обернувшись кверху ногами,  
 как отраженья, что мы на поверхности вод наблюдаем:  
 Будто бы вниз головой и животные также под нами  
 Бродят, и будто с земли упасть им никак невозможно  
 В нижние своды небес, как и наши тела не способны  
 Сами собой улететь к высоким обителям неба;  
 Будто бы солнце у них, в то время как ночи светила  
 Мы созерцаем; что мы взаимно меняемся с ними  
 Сменой времен, а их дни ночам соответствуют нашим.  
 Но лишь надменным глупцам допустимо доказывать это,  
 Ум у которых всегда к извращению истины склонен. (кн. 1; 1052)

Вероятно, чтобы избавиться от возражения Аристотеля против принятия пустоты, как одного из начал физики, по той причине, что пустота не создает движения, Лукреций вслед за Эпикуром предполагает, что все тела весомы и движутся тяжестью сверху вниз. Но если отказаться от эпикурейской всепроникающей силы тяжести, в физике Лукреция остается один шаг до движения по инерции. Достаточно просто убрать слова о тяжести в соответствующих стихах (выделено курсивом). Это как бы отложенная идея движения по инерции между толчками:

Всё ведь пространство и место, что мы пустотой называем,  
 Иль через центр или не через центр уступает дорогу  
 Всяким *весомым* телам, куда б ни влекло их движенье.  
 Нет и места к тому ж, куда бы тела попадая,

*Тяжесть теряли свою и могли в пустоте удержаться;*

И пустота не должна служить для другого опорой,

В силу природы своей постоянно всему уступая. (кн.1; 1074)

Ведь, в пустоте находясь и витая по ней, неизбежно

Первоначала вещей уносятся *собственным весом или толчками других*" (кн. 2; 80)

В частности, в плоскости земли тяготение не может быть причиной движения, если тяготение направлено отвесно к плоскости (догадка Галилея). Но тогда это горизонтальное движение в пустоте без причин между толчками – инерция.

Более того,

Но и тот жар, что идет от солнца, и свет его ясный

Не в пустоте совершают свой путь; и двигаться тише

Свет принужден, пока он рассекает воздушные волны. (Кн.2;150)

Но замедление скорости света по сравнению со скоростью в пустоте безусловно означает, что скорость света в пустоте ограничена. Остается еще много до эйнштейновского озарения, что ничто не распространяется быстрее света в пустоте, но то, что его скорость ограничена, Лукреций полагал задолго до измерений Ремера.

Приведем еще пример, показывающий, насколько глубоко продумывали античные мыслители свои предположения. Лукреций создает ощущение, что ничего не может быть быстрее света и что бесконечность пространства и конечность скорости света приводят к выводу о событиях, между которыми, связь никогда не может быть установлена:

Но бесконечной всегда остается вселенная в целом.

И по природе своей настолько бездонно пространство,

Что даже молнии луч пробежать его был бы не в силах

В долгом теченьи чреды бесконечных веков ускользя

Дальше вперед, и никак он не смог бы приблизиться к цели (кн. 1; 1002)

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Искать близость древней физики к современной физике не кажется очень полезным делом, так как первая основана только на чувственных восприятиях и использовании самых примитивных инструментов, тогда как вторая использует точнейшие измерители кинематических и динамических характеристик физических объектов, физических явлений, а также законы, сформулированные с помощью совершенных математических методов. Однако мышление не могло сформироваться иначе, как под впечатлениями, создаваемыми органами чувств. Следовательно, с одной стороны основы окружающего мира лежат за пределами чувств, с другой стороны они могут быть познаны и выражены только в процессе мышления, законы которого вряд ли сильно изменились от древних греков до наших дней. Поэтому соответствия древних гипотез законам современной физики столь точны, столь многочисленны и столь впечатляющи. Можно сказать, что носящая качественный характер физика древности не только явилась первым и необходимым этапом зарождения научных физических теорий, но и присутствует в них в снятом виде.

## Литература

1. Лукреций Кар Тит. О природе вещей. М.: изд. Художественная литература, 1983. 386 с.
2. Вавилов С.И. // УФН 1946. Т. 29. № 1-2. С. 161-178

3. Pisent G. // Open Journal of Philosophy 2012. V. 2. №. 4. P. 268-271

4. Аристотель. Физика. М.: КомКнига, 2007. 236 с.

5. Планк М. Избранные труды. М.: Наука, 1975. 788 с.

**Приложение: Стихи из Лукреция, цитированные С.И. Вавиловым.**

"...Отнюдь не в ничто превращаются вещи,  
Но разлагаются все на тела основные обратно" (кн. 1; 248)

"Если ж пространства иль места, что мы пустотой называем,  
Не было б вовсе, тела не могли бы нигде находиться  
И не могли б никуда и двигаться также различно" (кн. 1; 426)

"Также и времени нет самого по себе, но предметы  
Сами ведут к ощущению того, что в веках совершилось,  
Что происходит теперь и что воспоследует позже;  
И неизбежно признать, что ничем ощущаться не может  
Время само по себе, вне движения тел и покоя" (кн. 1; 459)

"Нет и краёв у неё и нет ни конца ни предела.  
И безразлично, в какой ты находишься части вселенной:  
Где бы ты ни был, везде, с того места, что ты занимаешь,  
Всё бесконечной она остаётся во всех направлениях" (кн. 1; 964)

"Если не будет затем ничего наименьшего, будет  
Из бесконечных частей состоять и мельчайшее тело.  
У половины всегда найдётся своя половина,  
И для деления нигде не окажется вовсе предела.  
Чем отличишь ты тогда наименьшую вещь от вселенной?  
Ровно, поверь мне, ничем. Потому что, хотя никакого  
Нет у вселенной конца, но ведь даже мельчайшие вещи  
Из бесконечных частей состоять одинаково будут.  
Здравый, однако же, смысл отрицает, что этому верить  
Может наш ум, и тебе остаётся признать неизбежно  
Существование того, что совсем неделимо, являясь  
По существу наименьшим" (кн. 1; 615)

"Первоначала вещей .....  
Лишь до известных границ разнородны бывают по формам" (кн. 2;479)

"Я бы желал, что бы ты был осведомлён здесь точно так же,

Что уносясь в пустоте, в направлении книзу отвесном,  
Собственным весом тела изначальные в некое время  
В месте неведомом нам начинают слегка отклоняться,  
Так что едва и назвать отклонением это возможно.  
Если ж, как капли дождя, они вниз продолжали бы падать,  
Не отклоняясь ничуть на пути в пустоте необъятной,  
То никаких бы ни встреч, ни толчков у начал не рождалось,  
И ничего никогда породить не могла бы природа" (кн.2; 216)

"Если же думаешь ты, что стать неподвижно способны  
Первоначала вещей и затем возродить в них движение,  
бродишь от истины ты далеко в заблуждени глубоком.  
Ведь, в пустоте находясь и витая по ней, неизбежно  
Первоначала вещей уносятся собственным весом или толчками других" (кн. 2; 80)

"Знай же, идёт от начал всеобщее это блужданье.  
Первоначала вещей сначала движутся сами,  
Следом за ними тела из малейшего их сочетания,  
Близкие, как бы сказать, по силам к началам первичным,  
Сами к движенью, затем побуждая тела покрупнее,  
Скрыто от них получая толчки, начинают стремиться  
Так, исходя от начал, движение мало по-малу  
Наших касается чувств и становится видимым также  
Нам и в пылинках оно, что движутся в солнечном свете,  
Хоть незаметны толчки, от которых оно происходит ", (кн. 2; 133)

"Падать быстрее должно в соответствии с собственным весом  
Лишь потому, что вода или воздуха тонкая сущность  
Не в состоянии вещам одинаковых ставить препятствий,  
Но уступают скорей имеющим большую тяжесть.  
Наоборот, никогда никакую нигде не способна  
Вещь задержать пустота и явиться какой-то опорой,  
В силу природы своей постоянно всему уступая.  
Должно поэтому всё, проносясь в пустоте без препятствий.  
Равную скорость иметь несмотря на различие веса" (кн. 2; 231)

"Я объясняю и ряд излагаю причин, по которым  
Может движенье светил совершаться в пространстве вселенной.  
Всё же из этих причин непременно одна побуждает  
Звёзды к движенью и здесь, но какая — предписывать это

Вовсе не должен тот, кто исследует всё постепенно" (кн. 5; 529)

"Будто нельзя допустить, что возможно и то и другое,

Иль что учение то нисколько не хуже, чем это" (кн. 5; 729)

"Ибо лежит далеко за пределами чувства

Вся природа начал" (кн. 2; 312)

## ИЗОБРАЖЕНИЕ ЛИ ИЗОБРАЖЕНИЕ

М.А. Старшов

*Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского*

В рамках лучевой оптики отсутствует определение одного из важнейших понятий изображение точки и это приводит к большим проблемам в усвоении учащимися не только этого раздела курса оптики.

В одной из первых книг по проблемам зрения и света великий математик древнего мира Евклид рассматривает отражение света и зеркала, но там есть и единственная задача или описание мысленного опыта с переходом света через границу двух прозрачных веществ.



Такую монету сбоку никто не видел никогда, и никому не доказать, что «изображение» монеты смещается туда и настолько.

Во «Всемирной истории физики» Я. Дорфмана об этом сказано лаконично: «Частный случай преломления света в воде рассмотрен в «Оптике» Евклида». Скажем, не в «Оптике», а в VI постулате «Катоптрики», не в воде, а на границе вода-воздух, и не рассмотрен, а лишь упомянут. Не объяснён же этот случай до сих пор, что видно уже по приведённому типичному изображению на рисунке. Правда, можно встретить рисунки, где предмет изображён просто приподнятым, и даже такие, на которых изображение приближено к наблюдателю! Художники склонны фантазировать, но их произведения в книгах по физике могли бы отражать явления природы более адекватно. Проблема именно в том, что учебники по физике избегают формулировки, что такое изображение точки в оптике. А те, что можно найти в авторитетных книгах, выглядят совершенно бесполезными для практики, ничего не добавляя и к теории.

**«Оптическое изображение** — картина, получаемая в результате прохождения через оптическую систему световых лучей, распространяющихся от объекта, и воспроизводящая его контуры и детали» [2].

**«ИЗОБРАЖЕНИЕ ОПТИЧЕСКОЕ** – распределение в пространстве, полученное преобразованием лучей, идущих от предмета [3].

БСЭ 2 изд.

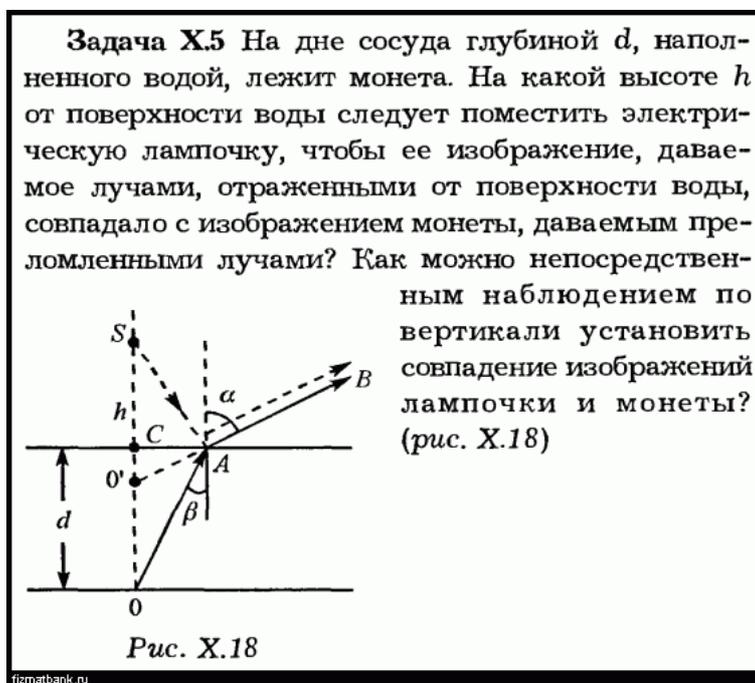
**«Изображение оптическое, картина, получаемая в результате действия оптической системы на лучи, испускаемые объектами, и воспроизводящая контуры и детали объекта» [4].**

**«ИЗОБРАЖЕНИЕ ОПТИЧЕСКОЕ, изображение объекта, получаемое в результате действия оптич. системы на световые лучи, испускаемые или отражаемые объектом» [5].**

На самом деле полный свод основных принципов лучевой оптики получим при дополнении пяти известных законов именно определение изображения точки. Тогда всё остальное логично строится и объясняется.

***Изображением точки в оптической системе называется такая точка в пространстве изображений, в которой система собирает все лучи от данной точки, попавшие в систему, или продолжения всех этих лучей.***

Теперь мы сможем построить даже любое изображение в плоском зеркале, что затрудняет практически каждого студента первого курса. И можем понять, что в задаче Евклида, а следовательно, и в оконном стекле, а также в камере-обскуре изображения точки не существует. Не случайно же Пьер Бугер заметил, что сам Ньютон считал задачу Евклида таинственной и неразрешимой. И это верно до сих пор: самоуверенные педагоги могут предложить школьникам на просторах интернета вариации всё той же трудности Евклида-Ньютона-Бугера, в которой сами не могут добраться до истины:



Любопытно представить себе экзаменатора, которому абитуриент сообщит и докажет, что эта задача принципиально не имеет решения.

#### Литература

1. Дорфман Я.Г. Всемирная истории физики. М., 1974.
2. Физическая энциклопедия, Т. II. М., «Советская энциклопедия», 1990. (Статья «Изображение оптическое».)
3. БСЭ 2 изд. Ред. Вавилов С.И. Т.XVII. М., 1952.
4. БСЭ 3 изд. Ред. Прохоров А.М. Т.X. М., 1972.
5. СЭС п/р акад. Прохорова А.М. 1980, С.485

## НЕКОТОРЫЕ АСПЕКТЫ ПРОБЛЕМЫ БЕСКОНТАКТНОГО ТРЕНИЯ НЕЙТРАЛЬНАЯ ЧАСТИЦА-ПОВЕРХНОСТЬ

С.В. Чурочкина, И.Я. Демин

*Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского*

В данной работе кратко представлена историческая ретроспектива проблематики взаимодействия нейтральной частицы с поверхностью. Рассмотрена физическая причина возникновения статической и динамической сил Казимира-Полдера. Качественно объяснено происхождение силы бесконтактного трения, как следствие существования динамической силы Казимира-Полдера. Представлены асимптотические зависимости сил Казимира-Полдера от расстояния нейтральная частица-поверхность.

Для развития познавательной, исследовательской и творческой деятельности студентов необходимо создание особой, побуждающей к творчеству, обстановки учебного процесса. Для этого на занятиях используют исследовательскую модель обучения. В результате использования этой модели обучаемый ставится в ситуацию, в которой он сам овладевает понятиями и подходами, необходимыми для решения поставленной проблемы. Следствием этого является формирование у студентов общепрофессиональных и профессиональных компетенций, что на сегодняшний день

является основной целью всего образовательного процесса [1-3]. А от того насколько успешно будут усвоены эти компетенции будет зависеть глубина, фундаментальность и результативность их научно-исследовательской работы и, как следствие, грамотное представление ее результатов в выпускной квалификационной работе и ее автореферате [4].

Поэтому на занятиях наряду с общепринятыми задачами рассматриваются вопросы, которые до сих пор являются дискуссионными. В частности, бесконтактное трение, которое возникает или наоборот не возникает при взаимодействиях нейтральная частица-поверхность, представляет собой одну из таких тем [5-11].

Проблематика взаимодействия нейтральных объектов (атомов, молекул и т.д.) с протяженными средами различной природы (металлами, диэлектриками) становится особенно актуальной в связи с бурным развитием нанотехнологий. Эта проблема носит не только прикладной характер, но и фундаментальный, в частности, в основе этой проблематики лежит вопрос о взаимодействии атома с вакуумом, который в простейшем случае рассматривался в 1910 году на заре развития квантовой механики – Эйнштейном и Хопфом [12]. Ими была рассмотрена задача о классической заряженной частице, имеющей заряд  $e$  и массу  $m$ , и движущейся в одномерном гармоническом потенциале, и находящейся в тепловом равновесии при температуре  $T$  электромагнитным полем. Уравнение движения для этой частицы, включающее силу радиационного трения Абрагама-Лоренца и связь с напряженностью электрического поля  $E_x$ , дается выражением:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega_0^2 x - \sigma \frac{d^3x}{dt^3} = \frac{e}{m} E_x, \quad (1)$$

где  $\sigma = e^2 / 6\pi\epsilon_0 mc^3$ . Условие теплового равновесия между атомом и «тепловой баней» подразумевает неисчезающую силу трения Эйнштейна-Хопфа  $F_{EH}$ , если центр масс гармонического потенциала находится в движении со скоростью  $v$  по отношению к полю. В пределе нерелятивистского движения зависящая от скорости сила трения Эйнштейна-Хопфа согласно [13] равна

$$F_{EH} = \frac{e^2 \hbar \omega_0^4}{15 m c^5 \pi \epsilon_0} v \frac{\partial \eta(\omega_0; T)}{\partial \omega_0}, \quad (2)$$

где  $\eta(\omega; T) = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}$ ,  $\beta = \frac{1}{kT}$ ,  $k$  – постоянная Больцмана,  $\eta(\omega; T)$  – число заполнения теплового фотона,  $\hbar$  – постоянная Планка,  $c$  – скорость света,  $\epsilon_0$  – электрическая постоянная.

Качественно природа трения Ван-дер-Ваальса может быть понята на основе эффекта Доплера. Действительно, при движении нейтральной частицы в электромагнитном поле происходит обмен фотонами между ними. Атом поглощает движущиеся ему навстречу фотоны с «голубым» сдвигом частоты, тогда как налетающие сзади фотоны атом поглощает с «красным» сдвигом частоты, в то же время атом испускает фотоны во всех возможных направлениях. Это приводит к потере энергии нейтральной частицей, что эффективно соответствует возникновению силы бесконтактного трения.

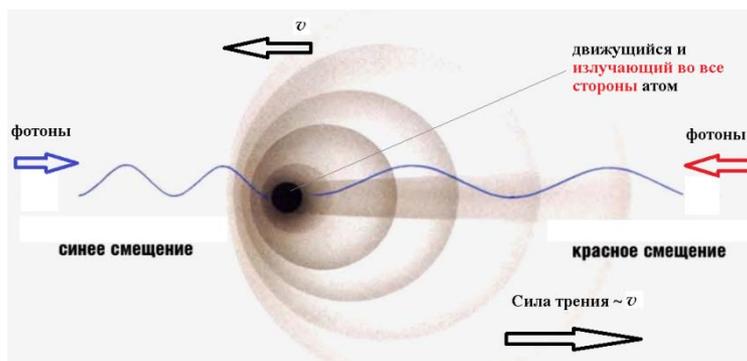


Рис. 1. Интерпретация бесконтактного трения на основе эффекта Доплера.

Следует подчеркнуть, что хотя при низких скоростях бесконтактное трение исчезает при нулевой температуре, в высшем порядке теории возмущений существует кубический по скорости вклад, который в этом случае не исчезает. Это связано, в частности, с ненулевой относительной скоростью движения нейтральной частицы и поверхности. Однако в этой статье мы не будем на нем останавливаться.

Следующим шагом на пути к возникновению понятия бесконтактного трения нейтральная частица-поверхность при 0 К явилось открытие в 1948 году гипотетического явления, которое впоследствии было названо эффектом Казимира [14].

Этот эффект заключается во взаимном притяжении проводящих незаряженных тел под действием квантовых флуктуаций в вакууме. Чаще всего речь идет о двух параллельных незаряженных зеркальных поверхностях площадью  $S$ , размещенных на близком расстоянии (порядка нескольких десятков или сотен нанометров) друг от друга.

Физическая природа этого эффекта объясняется возникновением давления вакуума. Как известно, в вакууме всегда рождаются виртуальные фотоны с различными длинами волн  $\lambda$ . Два зеркала представляют собой потенциальную яму для электромагнитных волн. Если на расстоянии  $z$  между зеркалами укладывается целое число половин длин волн

$$\text{при } \lambda = \lambda_0 \quad z = n \frac{\lambda_0}{2} \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (3)$$

то эти длины волн соответствуют резонансу потенциальной ямы. Тогда как длины волн, отличные от резонансных при  $\lambda \neq \lambda_0$ , подавляются. В то время как вне пластин рождаются любые виртуальные фотоны.

Отталкивание между пластинами возникает, если давление излучения на резонансных частотах внутри полости сильнее, чем снаружи, а притяжение, когда давление излучения вне резонанса меньше внутри, чем снаружи. Притяжение и отталкивание существуют одновременно. Доминирование притяжения обусловлено тем, что в нем участвует практически весь спектр частот за исключением области резонанса, в которой преобладает отталкивание.

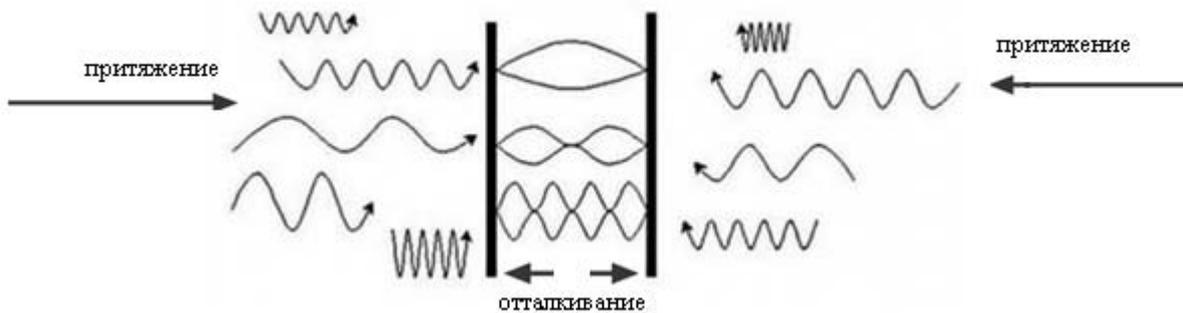


Рис. 2. Эффект Казимира.

Для данного случая была вычислена сила Казимира [14]. Оказалось, что сила притяжения между двумя зеркальными поверхностями обратно пропорциональна четвертой степени расстояния между ними

$$F_c = -\hbar c \frac{\pi^2}{240} \frac{1}{z^4} S, \quad (4)$$

и, следовательно, с уменьшением расстояния резко возрастает. Соответствующее «отрицательное» давление вакуума оказалось равным

$$P_c = \frac{F_c}{S} = -\hbar c \frac{\pi^2}{240} \frac{1}{z^4}. \quad (5)$$

Если в (5) подставить расстояние порядка 10 нм, то давление, создаваемое из-за эффекта Казимира, окажется сравнимым с атмосферным.

Из-за того, что сила Казимира даже на субмикронных расстояниях мала, экспериментально обнаружить эффект Казимира удалось только через десять лет после его предсказания, а провести непосредственные измерения смогли лишь в 1996 году.

Сейчас создаются так называемые микроэлектромеханические системы (МЭМС), приборы микронных размеров (крохотные сенсоры, микродвигатели, вырезанные на кремневой подложке). И оказалось, что элементы МЭМС «слипаются» из-за силы Казимира.

Известны две вариации силы Казимира.

### 1. Сила Казимира-Полдера (статическая)

Рассмотрим нейтральную частицу (например, атом), находящуюся рядом с плоским макроскопическим телом при нуле температур. Она нейтральна и не обладает ни электронным, ни магнитным постоянным дипольным моментом. Распределение заряда, обеспечиваемое ее составляющими, однако, подвержено квантовым флуктуациям, которые дают вклад в электрическую поляризуемость атома. Электрическая поляризуемость макроскопического тела, которое предполагается металлом или диэлектриком, эффективно учитывается через его диэлектрическую проницаемость  $\epsilon(\omega)$ . Поле, индуцированное атомными нулевыми дипольными флуктуациями, поляризует тело и, таким путем, приводит к созданию зеркального заряда внутри него. Т.е., поле, отраженное поверхностью, равно полю, индуцированному распределением флуктуирующего заряда, которое для идеального проводника идентично таковому для атома, но противоположно по знаку, и зеркально отображенному по отношению к границе раздела. По мере того, как атомный диполь осциллирует, зеркальный атомный диполь также зеркально осциллирует. Так как оба волновые движения скоррелированы, возникает конечное диполь-дипольное взаимодействие и отсюда сила притяжения, т.е. сила Казимира-Полдера. Направление силы задается осью между атомом и его зеркальным изображением. Для атома в покое перед плоской поверхностью она направлена перпендикулярно к этой поверхности и является ничем иным, как силой Казимира-Полдера  $F_{\text{Ср}}$ .

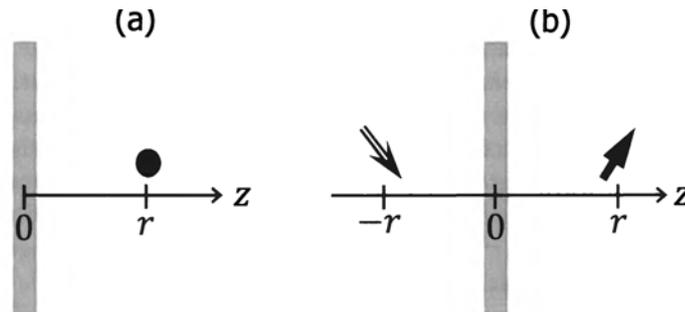


Рис. 3. На рисунке 3а показана нейтральная частица, находящаяся на расстоянии  $r$  от плоского макроскопического тела.

На рисунке 3б показан возникающий за счет квантовых флуктуаций дипольный электрический момент нейтральной частицы в произвольный момент времени, который приводит к возникновению зеркального заряда внутри макроскопического тела. Напомним, что зеркальные заряды имеют противоположный знак по сравнению с реальными зарядами.

Явный вид силы Казимира-Полдера [15] сильно зависит от расстояния между нейтральной и частицей и поверхностью. На расстояниях  $z$ , удовлетворяющих условию сильного запаздывания флуктуационно-электромагнитного взаимодействия  $\omega_0 z/c \gg 1$ , где  $\omega_0$  — характерная частота в спектре поглощения атома, сила Казимира-Полдера определяется, как

$$F_z = -\hbar c \frac{3}{2\pi} \frac{\alpha(0)}{z^5}, \quad (6)$$

где  $\alpha(0)$  статическая поляризуемость атома, а отрицательный знак свидетельствует о притяжении атома к поверхности.

В случае отсутствия запаздывания флуктуационно-электромагнитного взаимодействия  $\omega_0 z/c \ll 1$  сила Казимира-Полдера между нейтральной частицей и идеально проводящей поверхностью определяется, как

$$F_z = -\hbar \frac{3}{8} \frac{\alpha(0)\tilde{\omega}_0}{z^4}, \quad \tilde{\omega}_0 = \omega_0. \quad (7)$$

Зависимость от расстояния  $F_z \sim z^{-4}$  характеризует силу Ван-дер-Ваальса. Она может быть получена из формулы Лифшица [16] для флуктуационно-электромагнитного взаимодействия двух плоскопараллельных пластин, разделенных вакуумной щелью путем предельного перехода к разреженной среде для вещества одной из пластин [17].

## 2. Динамическая сила Казимира-Полдера

Как показано на рис. 4, в случае движущегося атома, поля, индуцированные зеркальными изображениями, в предыдущие времена достигают реального атома и накладываются в его текущей позиции, приводя к наклону силы. В дополнении к всегда присутствующей силе Казимира-Полдера, перпендикулярной к поверхности, там тогда существует конечная компонента силы, направленная противоположно движению атома, вызывающая его торможение. Эта сила – это то, что называется силой бесконтактного трения в нашем контексте.

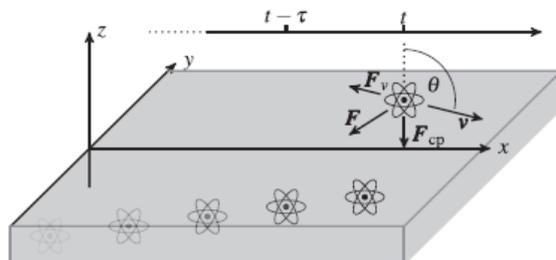


Рис. 4. Атом, движущийся рядом с макроскопическим телом при нулевой температуре со скоростью  $v$ . Атомное распределение заряда флуктуирует, что приводит к реконфигурации заряженных составляющих в теле и посредством этого к созданию распределений зеркального заряда. Для покоящегося атома, это взаимодействие с зеркальным зарядом приводит к силе Казимира-Полдера  $F_{CP}$ , притягивающей атом к поверхности. В случае относительного движения, пространственное распределение первых зеркальных зарядов приводит к наклону полной силы  $F$ . Дополнительно к нормальной силе Казимира-Полдера  $F_{CP}$ , атом тогда испытывает силу  $F_v$ , которая препятствует относительному движению.

В случае относительного движения нейтральная частица-поверхность наблюдается сложная зависимость силы от скорости (энергии), расстояния и материальных свойств поверхности.

Флуктуационная природа взаимодействия между нейтральной частицей и поверхностью приводит к силе бесконтактного трения с зависимостью вида  $1/z^5$  (где  $z$  – расстояние от нейтральной частицы до поверхности). Однако, кроме только что упомянутого «прямого» вклада в эту силу, существует вклад, связанный с обратным действием (экранированием) поверхности на нейтральную частицу. А именно, флуктуации атомного дипольного момента нейтральной частицы экранируются полями поверхности, индуцированными этими флуктуациями. Это приводит к дополнительному вкладу в силу бесконтактного трения, пропорциональному  $1/z^8$ , который доминирует при малых расстояниях между нейтральной частицей и поверхностью [18,19].

Следует также отметить, что в большинстве исследований рассматривается упрощенная ситуация параллельного взаимного движения либо плоских поверхностей, либо нейтральной частицы и плоской поверхности. Однако, к примеру, как недавно было выяснено, сила трения, возникающая при взаимном параллельном и вертикальном движениях, могут отличаться на порядок величины [20]. По мнению ряда исследователей, возможной физической причиной такого различия в поведении силы трения является фундаментальная разница в трактовке параллельного движения, как стационарного, с точки зрения квантовой механики, и вертикального, как не допускающего простого стационарного квантово-механического описания. Кроме того, представляется интересным вопрос об общем характере зависимости силы трения от скорости взаимного движения нейтральных объектов как в релятивистском, так и в нерелятивистском случаях. Поскольку все отмеченные трудности при описании эффектов квантового трения являются дискуссионными, в смысле теоретического описания, вплоть до того, что разные исследовательские группы получают качественно отличные теоретические результаты, да и само существование квантового трения при нуле температур является предметом дебатов, то представляется интересным рассмотреть вопрос о влиянии квантового трения на спектроскопию нейтрального объекта (к примеру, атома водорода), находящегося во взаимном движении с нейтральной поверхностью произвольной геометрии. Так как достигнута чрезвычайно высокая точность в определении спектров атомов. Следовательно, все эффекты, связанные с квантовым трением, в принципе могут быть проинтерпретированы на основе поправок к уровням энергии атомов, движущихся относительно указанной нейтральной поверхности. На данный момент нам известна только одна работа, посвященная этому вопросу [21]. Иными словами тематика находится в

начальной стадии разработки и допускает применение методов теоретической физики, используемых для описания атомных спектров, которые в течение многих лет разрабатывались в СГУ в сотрудничестве с другими исследовательскими центрами.

#### Литература

1. Черкасова О.А., Чурочкина С.В. // Гетеромагнитная микроэлектроника 2014. Вып.17. С.121-127
2. Черкасова О.А., Чурочкина С.В. // Образование в современном мире 2015. Вып.10. С.202-208
3. Старшов М.А., Чурочкина С.В. // Методика и практика преподавания в XXI веке 2015. С.71-75
4. Черкасова О.А., Чурочкина С.В. // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика 2016. Т.16. №3. с.243-247
5. Levitov L.S. // Europhysics Letters 1989. V. 8. № 6. P.499-504
6. Høyе J.S., Brevik I. // Physica A 1992. V.181. P.413-426; Physica A 1993. V.196. P.241-254
7. Mkrtchian V.E. // Physics Letters A 1995. V.207. № 5. P.299-302
8. Tomassone M.S., Widom A. // Physical Review B 1997. V.56. №8. P.4938-4943
9. Persson B.N. J., Zhang Z. // Physical Review B 1998. V. 57. № 12. P.7327-7334; Dedkov G.V., Kyasov A.A. // Physics Letters A 1999. V. 259. №1. P.38-42; Technical Physics Letters 2001. V. 27. № 4. P.338-340; Technical Physics Letters 2002. V. 28. №4. P.346-348.
10. Volokitin A.I., Persson B.N. J. // Physical Review B 2002. V.65. № 11. P.115419
11. Volokitin A.I., Persson B.N. J. // Physical Review B 2003. V.68. № 15. P.155420; Physical Review Letters 2005. V.94. № 8. P.086104; Physical Review B 2006. V.74. № 20. P.205413; Reviews of Modern Physics 2007. V.79. № 4. P.1291-1329; Physical Review B 2008. V.78. № 15. P.155437
12. Einstein A., Hopf L. // Annalen der Physik (Leipzig) 1910. V.33. P.1105-1115
13. Lach G., DeKieviet M., Jentschura U.D. // Central European Journal of Physics 2012. V.10. № 4. P.763-767
14. Casimir H.B.G., Polder D. // Physical Review 1948. V.73. № 4. P.360-372
15. Дедков Г.В., Кясов А.А. // Физика твердого тела 2012. Т.54. № 4. С.782- 790
16. Лифшиц Е.М. // Журнал экспериментальной и теоретической физики 1955. Т.29. № 1. С.94-110
17. Antezza M., Pitaevskii L.P., Stringari S. // Physical Review A 2004. V.70. № 5. P.053619; Bimonte G., Klimchitskaya G.L., Mostepanenko V.M. // Physical Review A 2009. V.79. № 4. P.042906
18. Jentschura U.D., Janke M., DeKieviet M. // Physical Review A 2016. V.94. № 2. P.022510
19. Чурочкина С.В., Демин И.Я. // Вопросы прикладной физики 2018. № 25. С.60-64
20. Klatt J., Belén Fariás M., Dalvit D.A.R. et al. // Physical Review A 2017. V.95. № 5. P.052510
21. Klatt J., Bennett R., Buhmann S.Y. // Physical Review A 2016. V.94. № 6. P.063803

### ПРИНЦИПИАЛЬНАЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ СХЕМА ЛАБОРАТОРНОГО МАКЕТ АРС-ТРИГГЕРА

Г.Н. Колесов, П.П. Нелюбов, К.А. Гребенюк

*Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г.Чернышевского*

Последовательностные цифровые устройства строятся на основе триггеров, а различные триггеры – на основе RS-триггера. Поэтому изучение устройства и функционирования RS-триггера является одной из ключевых учебных задач в рамках курса «Основы цифровой электроники».

Для наиболее эффективного выполнения данной задачи мы предлагаем при проведении занятий по цифровой электронике дополнить традиционный теоретический анализ логической схемы RS-триггера практическим изучением его лабораторного макета. При этом помимо соблюдения обязательных требований техники безопасности данный лабораторный макет должен удовлетворять следующим дополнительным требованиям:

- 1) быть достаточно простыми надежным для того, чтобы студенты могли самостоятельно собирать и изучать его во время занятия;
- 2) обеспечивать возможность удобной демонстрации основных особенностей устройства и функционирования RS-триггера;
- 3) состоять только из недорогих и доступных компонентов.

Целью данной работы было построение принципиальной электрической схемы лабораторного макета RS-триггера, удовлетворяющего указанным выше требованиям. Логическая схема RS-триггера имеет вид, представленный на рис.1 [1]-[3]. Для создания лабораторного макета RS-триггера на элементах И-НЕ нами была предложена соответствующая принципиальная электрическая схема, которая

- 1) учитывает технические особенности практической реализации логических элементов И-НЕ, задействованных в работе триггера;
- 2) содержит дополнительные элементы, обеспечивающие питание логических элементов;
- 3) содержит дополнительные элементы, обеспечивающие возможность удобной демонстрации особенностей функционирования RS-триггера.

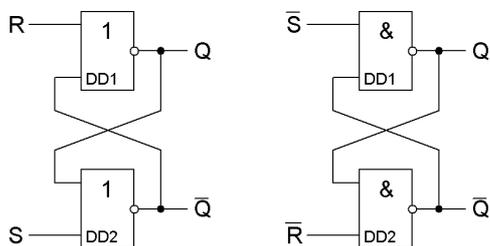


Рис. 1. Два варианта логической схемы RS-триггера (на элементах ИЛИ-НЕ и на элементах И-НЕ) [1]-[3].

Предложенная принципиальная электрическая схема представлена на рис. 2.

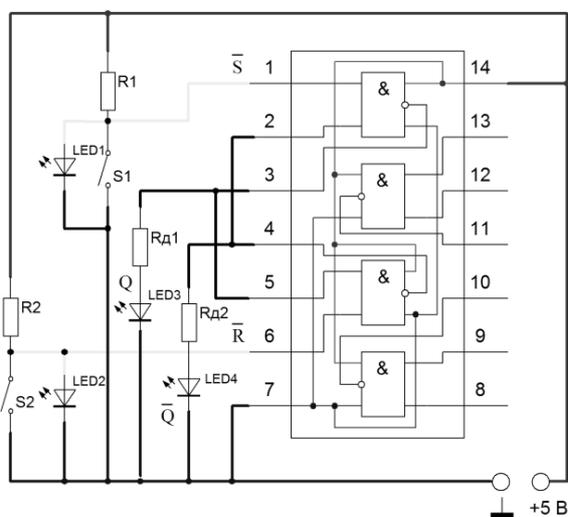


Рис. 2. Предложенная в данной работе принципиальная электрическая схема лабораторного макета RS-триггера.

На рис. 2 реализация логических элементов И-НЕ осуществляется с помощью интегральной микросхемы (ИМС), в которой, в соответствии с рис. 1, из четырех независимых элементов И-НЕ в работе триггера задействуются лишь два. Для работы ИМС необходимо подать питание на её выводы 7 и 14. Номинальное напряжение питания ИМС предполагается равным 5 В и подается на ИМС с помощью общей для всей схемы шины питания.

Наличие в схеме на рис. 2 дополнительных управляющих и пассивных элементов связано с функциями управления и индикации, выполняемыми входной и выходной цепями RS-триггера.

В таблице (см. ниже) представлен перечень компонентов, достаточных для сборки лабораторного макета RS-триггера по предложенной схеме. Все эти компоненты недороги и легко доступны. Таким образом, построенная принципиальная электрическая схема удовлетворяет требованиям, сформулированным в начале данной работы, и рекомендуется нами в качестве схемы лабораторного макета для практического изучения устройства и функционирования RS-триггера на занятиях по цифровой электронике.

Тип компонента	Название / характеристики	Количество, шт.
Макетная плата	SYB-170 Mini Solderless	1
Набор перемычек	140PCS Jumper Wires	1
Кнопка		2
Диод (красный)		3
Диод (зеленый)		1
Резистор	0,25 Вт 1КОм	4
ИМС (И-НЕ)	K555LA3	1
Провод соединительный двойной	Диаметр жилы 0,5мм длина 1м	1
Блок питания	$U_{\text{Вых}}=5\text{В}; I_{\text{max}}=500\text{mA}$	1

## Литература

1. Платт, Ч. Электроника для начинающих. 2-е издание. БХВ-Петербург 2017.
2. Токхейм, Р. Основы цифровой электроники. Пер. с англ.- М.: Мир, 1988.
3. Хоровиц П., Хилл У. Искусство схемотехники. -1: Пер. с англ.- Изд. 6-е. М.: Мир, 2003.

**ЗВУЧАЩЕЕ ЧИСЛО: ОТ ПИФАГОРА ДО ГУБАЙДУЛИНОЙ**

В.Д. Генин

*Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского*

«Всё есть число!», - заявил Пифагор две с половиной тысячи лет назад. Текло время, сменяли друг друга эпохи, а данный постулат не единожды подвергался нападкам скептиков. И вот сегодня, когда не подлежит сомнению тот факт, что окружающий нас мир говорит на языке математики, мысль античного философа кажется потрясающе прогрессивной. В наш цифровой век власть числа распространяется не только на науку, но и на ее, казалось бы, антипод - искусство, в том числе, на самую абстрактную из его разновидностей – музыку. В работе рассмотрены и проанализированы взгляды наиболее ярких мыслителей и музыкантов разных эпох, считавших музыку точной дисциплиной, пытавшихся объяснить ее феномен научным языком, а при сочинении вдохновлявшихся законами физики и математики.

Начнем с колыбели европейской цивилизации – с античной Греции.

Древние эллины под словом «музыка» понимали некое «мусическое искусство» - «искусство муз» - то есть всякое занятие, находившееся под покровительством муз. Та воспроизводимая голосом и музыкальными инструментами музыка, которую слушали греки, под которую они танцевали и декламировали стихи, отражает лишь малую часть смыслов, вкладываемых ими в гораздо более широкий термин «музыка». Развиваясь, античная музыкальная эстетика, взяв за основу древнюю мифологию и основательно ее переработав, создала совершенно новую, рациональную систему понимания музыки. Первые научные принципы музыкальной эстетики были заложены Пифагором (570 - 490 гг. до н.э.) и его последователями. С Пифагора начинается история научной эстетики, опирающейся на законы естественнонаучного познания. Пифагорейцы считали, что в основе всех вещей лежит число. Этим самым была высказана догадка о закономерности, связывающей устройство мира с математикой [1].

Сегодня мы привыкли считать математическое антиподом мистического, но в те времена математика шла рука об руку с заблуждениями. Математическое знание казалось определенным, точным и применимым к реальному миру; более того, казалось, что это знание является продуктом чистого размышления, не требующего предварительных наблюдений. Будничное эмпирическое знание казалось несостоятельным в сравнении с идеалом математического. На основе математики было сделано предположение, что мысль выше чувства, интуиция выше наблюдения. Если же чувственный мир не укладывается в математические рамки, то тем хуже для чувственного мира [2].

В трактате «О пифагорейской жизни» философ Ямвлих (ок. 245 – ок. 325 гг.) выдвигает на первый план учение Пифагора о музыкальном катарсисе, а также о нравственном и прикладном медицинском значении музыки. По словам Ямвлиха, Пифагор «установил в качестве первого – воспитание при помощи музыки, тех или иных мелодий и ритмов, откуда происходит врачевание человеческих нравов и страстей и восстанавливается гармония душевных способностей... Существовали те или иные мелодии, математически рассчитанные и применимые против страстей души, против уныния и внутренних язв... Другие в свою очередь – против раздражения, против гнева, против всякой душевной перемены» [3].

Другая характерная особенность пифагорейской эстетики – идея о космическом значении музыки, описанная в учении о гармонии сфер. Согласно представлениям пифагорейцев, движение небесных тел создает прекрасную музыку. Весь космос представляет гармонически устроенное и музыкально звучащее тело. В одном из источников это учение излагается следующим образом: «Когда же несутся солнце, луна и еще столь великое множество таких огромных светил со столь великою быстротою, невозможно, чтобы не возникал некоторый необыкновенный по силе звук. Предположив это и [приняв], что скорости [движения их, зависящие] от расстояний, имеют отношения созвучий, они говорят, что от кругового движения светил возникает гармонический

звук. А так как казалось странным, что мы не слышим этого звука, то [в объяснении этого] они говорят, что причиной этого является то, что тотчас по рождении имеется этот звук, так что он вовсе не отличается от противоположной [ему] тишины... Таким образом, подобно тому, как медникам, вследствие привычки, кажется, что нет никакого различия [между тишиной и стуком при работе их], так и со [всеми] людьми бывает то же самое [при восприятии гармонии сфер]» [3].

Учение о музыке сфер – самый туманный, и одновременно самый популярный мотив пифагорейской эстетики. Он имел тысячи вариантов и модификаций, начиная с раннего пифагореизма, через неопифагореизм, патристику, средневековые музыкальные теории, эстетику Ренессанса и вплоть до музыкальной эстетики нового времени [1].

С гибелью античного мира в истории мировой культуры начинается новая эпоха, которую позднее историки Возрождения называли средними веками. Средневековая идеология, основанная на развалинах древнего мира, начала с переосмысления наследия античной культуры. С самого своего возникновения она стремилась подчинить музыку своему влиянию, поставить ее на службу интересам христианской религии.

При знакомстве с музыкальной эстетикой средневековья необходимо постоянно иметь в виду тот важный факт, что средневековыми теоретиками музыка понималась не как искусство, а прежде всего как наука. Действительно, если мы обратимся к традиционным средневековым определениям музыки, то почти всюду столкнемся с убеждением, что музыка – это наука о правильной модуляции, то есть о правильной пении. Известно, что музыка входила в состав семи «свободных искусств», делившихся на «trivium» (грамматика, риторика, логика) и «quadrivium» (арифметика, геометрия, астрономия, музыка) по терминологии римского государственного деятеля, философа, теолога и музыкального теоретика Боэция (ок. 480 – ок. 524 гг.). Характерно, что музыка относилась именно к «квадривиуму», так как рассматривалась как одна из областей математических знаний, наряду с арифметикой, геометрией, астрономией, и, прежде всего, понималась как наука о числах – спекулятивная дисциплина, имеющая дело с числовыми отношениями. Так, например, ученый, богослов и поэт Алкуин (ок. 735 – 804 гг.), давая определение музыки, называет ее «наукой, говорящей о числах, которые в звуках обретаются». По мнению средневековых авторов, именно число составляет вечную и нерушимую основу музыки в преходящем мире звуков. «Если что есть приятное в музыке, - говорит анонимный автор средневекового трактата, - это от числа зависит; то же и в ритмах, как музыкальных, так и иных. Звуки быстро проходят, числа же, телесным существом звуков и движений украшенные, останутся» [1].

Дело в том, что музыкальная эстетика средневековья формировалась под сильным влиянием эстетических и философских учений позднего эллинизма. Особенное воздействие на нее оказали неопифагорейство и неоплатонизм. От этих учений средневековая эстетика перенимает склонность к аллегорическому истолкованию музыки и числовой символике. Однако средневековые авторы не ограничились признанием пифагорейской идеи об универсальном значении числа и его роли в музыке. Они интерпретировали пифагорейское учение в духе своеобразной числовой мистики, приписывая самостоятельное символическое значение каждому из чисел. Единица, например, рассматривалась как символ бога или церкви. Подобно тому, как Бог является источником всего сущего, число один является источником всех других чисел. Число два считалось несовершенным числом. Означая начало и конец, оно не имеет середины и к тому же не делится на три. Особенное значение имело число три. Это совершенное число, так как оно имеет начало, середину и конец. Не случайно его связывали с триединством Бога. Число четыре символизировало гармонию. Оно проявляется и в жизни природы: существуют четыре первоэлемента, четыре времени года, четыре человеческих темперамента. В музыке этому числу соответствуют четыре нотные линейки, которые для средневековых теоретиков ассоциируются с четырьмя евангелистами, а также четыре тетрахорда (четырёхзвучные модальные лады), которые символизируют четыре периода в жизни Иисуса Христа (очеловечивание, смерть, воскрешение и вознесение на небо). Особое значение для средневекового мирозерцания имело число семь. Свидетельством его совершенства является его неделимость на другие числа. Оно выражало мистическую связь музыки со Вселенной. Семь тонов соответствуют семи планетам или семи дням недели. Семь струн лиры символизируют гармонию сфер. Между сферами семи планет находятся все музыкальные консонансы [1].

Ко времени окончательного формирования эстетики эпохи Возрождения происходит эмансипация музыки как вида искусства от сверхчувственной небесной и человеческой (влияющей на состояние человека) музыки. Критику неопифагорейского понимания музыки мы встречаем уже у французского теоретика музыки конца XIII века Иоанна де Грокейо (ок. 1255 – ок. 1320 гг.), высказывавшего сомнение по поводу существования небесной гармонии. В XV веке немецкий теоретик Адам из Фульды (ок. 1445 – 1505 гг.), продолжая традиционное деление музыки на небесную и человеческую, предлагал первую передать математикам, а вторую – медикам, оставив музыкантам собственно музыкальную сферу – инструментальную и вокальную музыку. С критикой «гармонии сфер» выступает фламандский теоретик музыки и композитор Иоанн Тинкторис (1446 – 1511 гг.): «Никто никогда не убедит меня, что музыкальные консонансы, немислимые без звучания, происходят от движения "небесных сфер"» [1].

В своем трактате «Обобщение о действии музыки» Тинкторис систематизирует высказывания по этому вопросу почти всех музыкальных авторитетов, как античных, так и средневековых и современных Тинкториусу авторов. Для Тинкториса характерна просветительская точка зрения, стремление все истолковать, объяснить, классифицировать. Он перечисляет и подробно разбирает около двадцати пунктов самых различных значений музыки. Среди них: музыка прогоняет тоску, смягчает жестокость, изгоняет дьявола, вызывает восторг, побеждает злую волю, радует людей, исцеляет их, побуждает дух к борьбе, облегчает труд, вызывает любовь, увеличивает радость на пирах и т.д. Здесь смешаны мнения о музыке и античных, и средневековых философов, но преимущество, тем не менее, отдается античным авторам, развивающим гедонистический и социально-педагогический взгляд на музыку. Таким образом, Тинкторис отвергает метафизические концепции музыки, признавая лишь слышимую, реальную музыку [1].

На смену Ренессансу приходит XVII век с его сложностью и противоречивостью, вошедший в историю музыки как эпоха барокко. Несмотря на пестроту и парадоксальность идей музыкального барокко, трактаты того времени нередко учили о связях музыки с риторикой и математикой, не порывая со средневековой системой семи свободных искусств. По выражению музыковеда М.Н. Лобановой, «"музыка" барокко – нечто и большее, и меньшее, чем собственно "музыка", – к ней относятся явления космологического характера, подчёркивается её "риторическая" и "математическая природа"» [4].

Из барочной музыкальной эстетики не исчезает идея о существовании мировой гармонии, которая определяет собой как строение мира, так и законы музыки, но идею эту XVII век развивает на совершенно иной философской основе. Наиболее полно концепция мировой гармонии была развита немецким ученым, математиком, физиком, астрономом и философом Иоганном Кеплером (1571 – 1630 гг.).

Среди астрономических работ Кеплера наибольшую популярность получил трактат «Гармония мира», написанный в 1619 году и состоящий из пяти книг. Основная идея трактата Кеплера состоит в том, что гармония представляет собою универсальный мировой закон. Она придает целостность и закономерность устройству вселенной. Этому закону подчиняется все – и музыка, и свет звезд, и человеческое познание, и движение планет [1].

Другой, в гораздо большей степени прикладной подход к рассмотрению связей музыки с математикой продемонстрировали просветители XVIII столетия. Важное влияние на его формирование оказал известный французский композитор Жан-Филипп Рамо (1683 – 1764 гг.). Он принадлежал к тому типу композиторов, у которых сочинительская практика являлась органичным претворением в жизнь теоретических взглядов. Сочиняя произведения, в которых доминирующее значение принадлежит гармоническому началу, Рамо одновременно и теоретически разрабатывал принципы гармонии, ее эстетику и теорию.

Данной проблеме посвящен целый ряд теоретических трудов Рамо: «Трактат о гармонии» (1722), «Новая система музыкальной теории» (1726), «Гармонические основы музыки» (1737), «Доказательство принципа гармонии» (1750). В своих работах Рамо исходил из убеждения в том, что музыка подчинена строгим законам, изучение которых требует от композиторов знания математических наук: «Музыка есть наука, которая должна обладать определенными правилами; эти правила должны вытекать из определенного принципа, и этот принцип не может быть изучен без помощи математики. Я должен признаться, что, несмотря на весь опыт, который я приобрел в

музыке за достаточно долгий срок моей практической деятельности, только математика помогла мне развить мои идеи и пролила свет там, где раньше была тьма, которой я даже не замечал» [5].

Значительную роль в развитии французской музыкальной культуры и эстетики сыграли младшие современники Рамо, просветители и энциклопедисты Руссо, Дидро, Д'Аламбер, люди широких взглядов, в равной степени увлекавшиеся искусством и наукой.

Яркий пример сплетения музыки с математикой мы встречаем в художественном произведении Дени Дидро (1713 – 1784 гг.) под названием «Племянник Рамо». Этот философско-сатирический диалог, написанный предположительно в 1760-е годы и опубликованный уже после смерти автора в 1805 г., многими исследователями признается вершиной художественного творчества писателя.

Сочинение представляет собой беседу автора с племянником композитора Жана-Филиппа Рамо. В ходе диалога персонажи делятся своими представлениями о беспокоящих их аспектах жизни, в том числе об искусстве. В определенный момент речь заходит о современной музыке и Рамо-младший делится своим взглядом на то, какой должна быть в его представлении идеальная мелодия: «Мелодия есть подражание голосом или инструментом – с помощью звуковой скалы, созданной искусством, или, если угодно, внушенной природой, - физическим шумам или интонациям страстей, и вы видите, что, внося в это определение соответственные изменения, его можно применить целиком к живописи, ораторскому искусству, скульптуре и поэзии. Перейдем теперь к вашему вопросу: что служит образцом для музыканта или мелодии? Декламация, если образец живой и мыслящий; шум, если образец неодушевленный. Декламацию надо рассматривать как линию, а мелодию – как другую линию, обвивающую первую. Чем сильнее и вернее будет эта декламация – прообраз мелодии, тем в большем числе точек пересечет ее соответствующий ей напев, тем ближе к правде и тем прекраснее он будет...» [6].

В приведенном отрывке, как мы видим, что естественные звуки, такие как речь или шум, представляются в виде графика некоторой функции, в то время как музыкальная мелодия, призванная изобразить их, выступает в качестве как можно более близкого приближения к этому графику.

Романтическое искусство XIX века не обнаруживает близких связей с точными науками. Это было время, когда музыканты прислушивались больше к сердцу, чем к разуму, искали вдохновение в фольклоре, основывали национальные музыкальные школы и всячески старались выработать собственный уникальный стиль, а не подчиненный строгим математическим правилам и общий для всей Европы музыкальный язык.

Новый, невиданный доселе всплеск интереса к точному, математическому подходу к искусству музыки произошел в XX веке, в эпоху неукротимого научного прогресса.

Принципы комбинаторики активно использовались изобретателями так называемой серийной техники музыкальной композиции – представителями Новой венской школы: Арнольдом Шенбергом (1874 – 1951 гг.), его учениками Альбаном Бергом, Антоном Веберном и их последователями. Наиболее распространенной разновидностью серийной техники стала додекафония, использующая серии из 12 неповторяющихся тонов. В методе додекафонии не существует понятий консонанса и диссонанса, устоя и неустоя: все 12 тонов октавы используются совершенно равноправно, образуя в своей серии уникальную последовательность звуков. Основная серия имеет только три строго установленные модификации, созданные Шёнбергом по принципу композиции полифонической музыки, применявшейся композиторами эпохи барокко - техники контрапункта. Первой из таких модификаций является «инверсия»: звуки серии движутся по одним и тем же интервалам, но в противоположных направлениях (движение вниз заменяется движением вверх и наоборот). Второй тип модификации - «ракоход»: звуки серии следуют в обратном порядке, от конца к началу. Третий тип – комбинированный - «ракоход-инверсия», объединяющий два предыдущих типа преобразований [7].

К наиболее ранним опусам Арнольда Шенберга, полностью опирающимся на додекафонную технику, можно отнести Сюиту для фортепиано, ор. 25 (1921-1923), и Квintет для духовых, ор. 26 (1923-1924). Эти экспрессивные произведения, полные диссонансов, - явный ответ искусства на трагедию Первой мировой войны.

После сброса американских атомных бомб на Японию, человечество уяснило, что не умерь оно пыла сейчас же, планета очень скоро станет необитаемой. Искусство незамедлительно

отреагировало новой волной экспериментов, пытаясь отразить невиданный ужас ситуации, в которую цивилизация целенаправленно себя загоняла.

Два мощнейших произведения для струнных польского композитора Кшиштофа Пендерецкого (1933 г.р.) – «Плач по жертвам Хиросимы» (1960) и «Полиморфия» (1961). В них нет ничего привычного: ни мелодии, ни гармонии, ни ритма - только движущиеся звуковые массы, пласты. Нет даже тактовых черт - длительность разделов определяется временным отрезком и измеряется в секундах. Техника игры тоже далека от привычной: музыканты стрекочат, стуча по корпусам инструментов, бьют по струнам тростью смычка, елозят за подставкой. Второе из этих двух сочинений - перенесенные на ноты энцефалограммы людей, слушавших первое - графики активности их мозга во время прослушивания «Плача».

Тенденция обращения композиторов к математике - графикам, формулам, прогрессиям - стала одной из основных для послевоенного авангарда. Новая музыка сочинялась посредством точных расчетов, с применением вычислительных машин и синтезаторов. В этой сфере преуспела представительница прогрессивного московского авангарда София Губайдулина (1931 г.р.). Творчество Губайдулиной называют «музыкальной бездной», «погружением в природу звука», мистикой, религиозностью и чудесами математики одновременно. Продолжительным увлечением композитора стали числа Фибоначчи. Это элементы последовательности 0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, 55, 89, 144, 233, 377, 610, 987, 1597, 2584, 4181, 6765, 10946, в которой каждое последующее число равно сумме двух предыдущих (названы в честь средневекового математика Леонардо Пизанского, известного как Фибоначчи). То, как композитор переводит числовую последовательность на язык музыки – его личное дело и часто секрет. Именно так обстоит дело и с сочинением Губайдулиной «Чет и Нечет» для ударных и клавишных (1991).

#### Литература

1. Шестаков В.П. От этоса к аффекту. История музыкальной эстетики от античности до XVIII века. М.: Музыка, 1975, 352 с.
2. Рассел Б. История западной философии [В 2 т.] Т. I. кн. 1, 2. М: Издательство АСТ, 2017, 768 с.
3. Античная музыкальная эстетика. Вступительный очерк и собрание текстов профессора А.Ф. Лосева / Ред. В.П. Шестаков. М.: Музгиз, 1960, 304 с.
4. Лобанова М.Н. Западноевропейское музыкальное барокко: проблемы эстетики и поэтики. М.: Музыка, 1994, 320 с.
5. Музыкальная эстетика Западной Европы XVII-XVIII веков: [Сборник переводов] / Сост. текстов и общая вступ. статья В.П. Шестакова // М.: Музыка, 1971, 688 с.
6. Дидро. Д. Собрание сочинений в десяти томах. Том IV. Диалоги, повести, стихи / Ред. И.К. Луппол. М.-Л.: Academia, 1937, 572 с.
7. Баженова Л.М., Некрасова Л.М., Курчан Н.Н., Рубинштейн И.Б. Мировая художественная культура. XX век. Кино, театр, музыка / Ред. Е.П. Кабкова. СПб.: Питер, 2008, 432 с.

# АНГЛИЙСКИЙ ЯЗЫК КАК СРЕДСТВО МЕЖДУНАРОДНОГО НАУЧНОГО ОБЩЕНИЯ

## ABSTRACTS OF SCIENTIFIC ARTICLES AS THEY ARE AND AS THEY SHOULD BE WRITTEN

Dina A. Alexeeva

*Saratov State University (National Research University of Russia)*

The article is dedicated to writing scientific article abstracts of different length in accordance with the requirements of the scientific journals. The tips are given taking into account the criteria for evaluating the quality of the abstracts. The report also suggests the ways of applying the already obtained data to the teaching process in order to prevent errors in works of Bachelor, Master and PhD students.

### INTRODUCTION

Working with Bachelor, Master and PhD students I face the necessity to teach them how to write and edit scientific papers in English for various journals. For the purpose of training this skill our Department of English Language and Intercultural Communication holds an annual scientific conference for young scientists “Presenting Academic Achievements to the World” with the following proceedings published in English every year.

Currently the ability of writing an abstract in English becomes an issue not only when it comes to foreign journals, but even if the article itself is written in Russian, because it still needs an abstract and keywords in English according to the present rules and requirements.

### METHODOLOGY AND DATA

It is well-known that an abstract should be written as the summary of the main ideas after the article itself is ready. Methodology, data, results and conclusion are described and only then comes the time to write an abstract, which is usually a one-paragraph section of about 250 words.

The limited volume dictates that the words in the abstract should convey the precise meaning within a research. The objective, perspective, purpose and outcomes are covered with the minimum information of experimental details.

Together with the title, the abstract becomes the “advertisement” of an article, it influences whether or not the work will be further considered and valued. To attract readers’ attention it should contain information on what has been done and what the main findings are.

The tutorials for authors are plenty, but I would recommend students to start with the work of Robert Day [1]. The appropriate choice of lexis is essential as I have stated in my previous works [2-3]. Some authors warn young scholars to keep it simple when they work on their first articles in order not to confuse the reader, although students sometimes do not feel comfortable with this tip as they do not feel that their own texts seem respectable enough without complex grammar structures and fancy words as ‘in a considerable number of cases’ or ‘sufficient’ or ‘terminate’. They are advised to substitute those with ‘often’, ‘enough’, and ‘end’ respectively [4].

I want to remind every student that sounding smart is definitely not the main goal of publishing your article, since: “As we know the one can truly say that he understands the topic if he is capable to explain it to both a university professor and a three-years-old child. That means that bringing scientific concepts down to earth is a good tool to express your thoughts in an easy-to-be-acquired way” [5] (p. 171).

The appropriate choice of lexis is essential and it concerns terminology that should be double-checked before sending your article in. Terms are created by inventing or borrowing, i.e.: “The nuclear atom theory and the quantum theory of radiation had borrowed a lot of terminology from astronomy and classical physics” [6] (p. 201).

The common tip on writing an article is to give one sentence to each of the points:

1. Introduction. I assume that your readers are the examiners or the peer reviewers, so they already possess the background information and need to know specifically what topic is covered in your paper.
2. Key research question. While your first sentence introduces the overall topic, now it is high time to focus on one main question within that topic.

3. Absence of an answer to the key research question in previous works and investigations. That proves the necessity and value of your work.
4. Your opinion on how to deal with the key research question.
5. The work done. Describe your experiments, tests, etc.
6. The impact of your research. It does not mean that you need to show all your results, just a brief conclusion on the importance and further perspectives.

Keep in mind that there are several types of abstracts: descriptive, informative, structured, semi-structured, non-structured [7]. Descriptive abstracts are usually shorter (50–100 words) and do not include points 4 and 5 from the list above. Informative abstracts cover them all, but not necessarily in the stated order, unlike structured abstracts, that have them all as separate paragraphs. Semi-structured abstracts are a shorter version with all the six points in this order, but in one paragraph. Not much can be said about the last type of abstracts as it is obvious from its name that it lacks any structure and may not include the six key points.

## CONCLUSION

Being a language adviser for students in past five years I would point out several difficulties we faced while working on their abstracts and articles. That would be correct terminology, grammar structures and nouns as the attributes, for example, a Russian term ‘метод последовательного возмущения параметров’ transforms into English ‘method of subsequent parameters perturbation’ rather than ‘method of a subsequent perturbation of the parameters’, which also covers the topic of nouns as an attribute.

Grammar structure ‘в работе проводится разбор’ (*разбор* – analysis – is the subject) changes in accordance with English grammar into ‘the paper presents the analysis’ (paper is the subject), and ‘в результате построен пример...’ is correctly translated as ‘as a result, an *example* of ... is given’.

As my experience shows the training should start with the structure of an abstract, since it can be easily drilled in group work while language issues should be treated afterwards individually. The students’ ability to write an abstract improves greatly after three or five attempts on average.

## REFERENCES

1. Day Robert S. How to Write and Publish a Scientific Paper. 4th edition, Oryx Press, Phoenix, 1994. 275 p.
2. Alexeeva Dina A. Metaphors in Scientific Publications // Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM-2014/ под ред. Г.В. Симоненко, В.В. Тучина. Саратов: Изд-во "Новый ветер", 2014. 182 с. С. 170–172
3. Alexeeva Dina A. Frequent Metaphoric Models // Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM-2017/ под ред. Г.В. Симоненко, В.В. Тучина. Саратов: Изд-во "Новый ветер", 2017. 144 с. С. 131–133
4. Columbia University in the City of New York. Writing a Scientific Research Article. URL: <http://www.columbia.edu/cu/biology/ug/research/paper.html> (assessed on October 12, 2018)
5. Alexeeva Dina A. A Metaphor as a Tool and as an Obstacle // Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM-2015/ под ред. Г.В. Симоненко, В.В. Тучина. Саратов: Изд-во "Новый ветер", 2015. 212 с. С. 170–172
6. Alexeeva Dina A. Terminology as a source of metaphors // Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM-2016/ под ред. Г.В. Симоненко, В.В. Тучина. Саратов: Изд-во "Новый ветер", 2016. 207 с. С. 201–203
7. Nagda S. // The Journal of Indian Prosthodontic Society 2013. V. 13. № 3. P. 382–383

## THE NOUN CHAIN CHALLENGE IN TRANSLATION

Darya N. Tselovalnikova

*Saratov State University (National Research University of Russia)*

Although noun chains are typical of the English language and are quite frequent in scientific and technical literature they are a great challenge for Russian students and cause significant difficulties. Their translation requires knowledge of rules by which they are constructed, and ability to establish semantic relations between the links. In this report we consider some typical examples from scientific articles and speculate on strategies and procedures for their analysis and translation.

## INTRODUCTION

In the English-speaking part of the internet this problem is called “noun-plague”, which reflects the native speakers’ attitude to it quite clearly. Noun chains create confusion even for the most informed

reader. They occur in nearly all technical fields and even in bad style journalism and fiction. One scholar even said that in juridical literature a bad-style article often “looks as though it had been translated from the German by someone with a rather meager knowledge of English” [1]. The term “noun chain” was introduced by Richard Wydick to describe a series of three or more consecutive nouns, where all but the last function as adjectives [2]. In English a word normally used as one part of speech can function as another. Scholars call this shift in grammatical function a “functional variation.” One of the most common types of functional variation occurs when a noun is used as an adjective. Moreover, rather often nouns form a long and misleading succession. For example, the title of this report is a three-member word chain: words *noun* and *chain* are adjectives modifying the word *challenge*. If we try to break the chain, we create another problem – a chain of words connected with numerous prepositions *of* (e.g. *The problem of nouns in a chain* or *The challenge of construction of terminology expressions*). Then our title would look as if it is a bad translation from Russian or any other Slavic language with case endings, where a bad translator or computer translation produces a lot of *noun plus preposition of* chains. Therefore, to cope with this challenge our scholars really need some strategies and procedures for translation and description of physical reality.

#### ORDER IN THE CHAIN

Most frequent type of modern compounds, a two-member chain, consists of a noun and modifier, the main word is in the end of the chain. The first word describes the second word, characterizing the object or explaining the item’s purpose. Usually such complex structures have a meaning general or more specific than the two separate words (e.g. fireman, print cartridge, shipwreck).

There are three types of compounds in general English: one word compounds, also referred to as solid compounds, nouns connected with a hyphen, also referred to as hyphenated compounds, and separate words, also referred to as open or spaced compounds. A two- or three-word combination is not a great challenge. Challenges grow, though, with the growth of word succession.

In case of three and more nouns in a chain, as is common for scientific articles, there arises relational ambiguity, especially if non-native speakers have to construct or translate the chain.

There is a certain rule for order of adjectives (determiner, quantity/number, quality/opinion, size, age, shape, colour, origin / place, material, purpose / quantifier).

*e.g. The seven beautiful short young triangle red Norwegian wool socks.*

Is there a rule for constructing such noun chains in physics? Probably, there should be some regulation for order of nouns as well, although it is not such widely accepted or well-known. Western linguists have been studying this topic since 1980-s and came up with several categories of noun compounds.

Hucking and Olsen categorize noun compounds by type of meaning relationship established among the components of these clusters. Such relationships may have numerous combinations corresponding to several patterns of meaning (purpose, composition or material, principle of operation, mode of operation, shape, size, location or position, creator or deviser, etc.) [3].

This classification was found rather promising and has been developed by different authors, including Leonor P. Ruiz who presented her own version, identifying some common types of semantic relations between N2 and N1, although it is not applicable for longer noun chains [4].

Montero [5] groups noun compounds according to the number of elements they include – from two-element structure to five-element chains. The first pattern is fairly easy to recognize and construct, while complex five-element structures can be really hazardous for unskilled readers. The base noun may be modified not only by nouns but also by adjectives –either an -ing adjective or an -ed adjective and adverbs. In such case a good way to prevent ambiguity and make the chains easy to decode is hyphenation.

Western linguists have also categorized complex noun compounds in terms of their grammatical origin, i.e. the type of clause they can be back-formed into. Such compounds include prepositional phrases (with prepositions of, for, in, on, with), relative clauses, gerund phrases or combinations of all the above mentioned means in very complex structures [4].

Another approach to categorizing complex compounds is done regardless of their grammatical categories – that is in terms of their length and difficulty of paraphrasing, which aims at achieving the full meaningfulness of what the structure represents [6]. The degrees of complexity are: simple (two elements: adjective / noun + noun), complex (three elements: N+N+N), more complex (four elements:

miscellaneous), and highly complex (five elements or more). The last group is represented by technical terms which may be rather difficult for understanding due to their highly specialized meaning.

While studying various approaches to the noun chain problem in modern linguistics, we came across an article dating as far back as 1970-s. Lancelot Hogben, an advocate of traditional methods for coining scientific terms from Greek and Latin roots, blamed his contemporary scientists for fostering “an invasion by words whose build-up has no intelligible rationale [which therefore] threatens the past and future vocabulary of science.” [7] The problem still remains. Moreover, altogether with miscellaneous categories of compound nouns, it should be noted, that there is a great need of creating a more universal classification which would include the following features: number of elements in the chain, their grammatical type, their semantic relations and patterns of meaning. Such a classification might even lead to introduction of a rule for word order in a noun chain and, therefore, regulate the process of term coinage in the language of science.

#### THE TRANSLATION PROBLEM

The noun chain challenge is typical not only for the English, it is a feature of the Scientese, i.e. language of science.

Let us consider translating noun chains into another language on the example of physical articles.

##### **Example 1.**

There are two ways to translate the following phrase and both are not quite satisfactory. The first has three prepositions of, the second has a six-word chain.

*Проблема фазовой синхронизации совокупностей нелинейных осцилляторов.*

*The problem of phase synchronization of sets of nonlinear oscillators.*

*The phase synchronization nonlinear oscillator set problem.*

Here we have to deal both with nouns and adjectives. The last noun in the chain is a real noun, while other nouns function as adjectives. Therefore, the last noun has to be near the front of the phrase (The problem of...).

Although a noun in the English grammar can function as an adjective, it is better to use other parts of speech or grammatical structures.

##### **Example 2.**

*The problem of phase synchronization in sets of coupled non-linear oscillators.*

In a three-word chain it is better to hyphenate the first two nouns – punctuation helps the reader to understand better.

e.g. real-world conditions vs. real world conditions

surface-bound products vs. surface bound products

field-free region vs. field free region

Here is another example.

*Графики пространственно-временных энергетических спектров межгодовых климатических вариаций являются негладкими.*

What would a student do? After a word for word translation the result would probably be like this:

*The graphs of space time energy spectra of interannual climatic variations are not smooth.*

What could a teacher do? First, build a pattern of this sentence – write out the subject and the main verb and maybe some additional words to keep the meaning clear.

*The graphs are not smooth.*

Then more words should be added to the structure.

*The graphs of space-time energy spectra are not smooth.*

*The graphs of space-time energy spectra for climatic variations are not smooth.*

*The graphs of space-time energy spectra for inter-mode climatic variations are not smooth.*

This is what could be done with extra-long and misleading word chains while writing your paper in English or proofreading it. Indeed, it is better to check if the noun phrases you use in your scientific research really do exist and are used at least by some of your English-speaking colleagues. Although, a good question is what could be done if your area of research is revolutionary new and you have to coin new terms, not fixed in the dictionaries yet.

#### CONCLUSION

Noun chains create confusion even for the most informed readers, especially in various technical fields. Building up strategies for physics scholars definitely requires some change of the linguistic research

results to make them more universal and applicable for the non-linguists. Strategies and procedures for translation and construction of noun chains in physics should be given more consideration. At this stage, our recommendation for young scholars is the following: try not to let any relational ambiguity into your research and omit needless words. In difficult cases the briefest way of wording the essence is the best, because it leads to clarity and better impact. Linguistic simplicity creates a good impression of the author. As for decoding and constructing word chains, the need to communicate new concepts is always forcing to make new terms. There is an important need for introducing the word order rule for noun chains. The process of term coinage in the language of science does need regulation.

#### REFERENCES

1. Rodell, F. Good-bye to Law Reviews, 23 Va. L. Rev. 38, 39 (1936–37).
2. Wydick, R. Plain English for Lawyers 75 (4<sup>th</sup> ed. 1998).
3. Olsen, L., Huckin, T. Technical Writing and Professional Communication. New York: McGraw-Hill, 1983.
4. Ruiz, Leonor Pérez. Unravelling noun strings: toward an approach to the description of complex noun phrases in technical writing. ES: Revista de filología inglesa, No. 27, 2006-2007.
5. Montero, B. Technical Communication: Complex Nominals Used to Express New Concepts in Scientific English, Causes and Ambiguity in Meaning. The ESP, São Paulo, 17:1. 1996.
6. Trimble, L. English for Science and Technology. Cambridge: Cambridge University Press, 1985.
7. Hogben, L., Cartwright, M. The vocabulary of science. Stein & Day Pub. 1

### LEXICO-GRAMMATICAL FEATURES OF A FUNCTIONAL STYLE ON THE EXAMPLE OF CHEMICAL TEXTS

Arina O. Shelyugina

*Saratov State University (National Research University of Russia)*

The purpose of the study is to identify the characteristics of the style of scientific chemical texts. The subject of the research is the lexical stylistic features of scientific and technical texts in chemistry. Different texts of chemistry were observed and some specificators were revealed.

#### INTRODUCTION

Science is one of the main spheres in which the dominant position of the English language is realized in the world. English for a long time is the international language of science. It is used in international seminars and conferences, research of scientists from different countries are published in English.

All this testifies that for a full scientific communication it is necessary to study the peculiarities of the scientific style of the English language.

The scientific and technical style is characterized clarity and rigor of presentation, the rejection of indirect, descriptive designations of objects, the wide use of cliches and stereotypes of special vocabulary.

#### METHODOLOGY

In the opinion of the researchers A. Yu. Gorbunova and L. A. Dolbunova, the technical text is "a text objectified in the form of a written document that has features of preliminary thinking of a monologic statement, a strict selection of linguistic means, gravitation to normalized speech, characterized by a logical sequence exposition, the ordered system of communication between parts of the utterance, authors accuracy, uniqueness, while maintaining the saturation of content "[1]. The authors propose to consider the linguistic features of technical texts at the following levels of language structures:

1. Lexical level. The most typical feature of technical and scientific texts is the abundance of special terminology. "The term - (from the Latin terminus - border) is a linguistic sign (word or phrase) related to a special (scientific, professional, etc.) concept"[2]. The texts of this subject are highly specialized, that is, they are oriented to experts in this or that field of knowledge. In addition, they are characterized by the presence of book vocabulary. For example, instead of the verb "to say" verbs "to assert", "to state", "to declare" are used.
2. Grammatical level. For the information contained in the text to look logically connected and consistent, the following words are used: prepositions (on, after, in, after, before, apart from) and conjunctions: (in order to, as a result, rather than ). For technical texts, the use of passive voice and passive constructions is also typical, which indicates their descriptiveness (the exposition is not

from the first person, but from the third)(for example, "The maximum operating temperature, however, should be taken into consideration"

3. Syntactic level. Constructive complexity is one of the features of the texts of the focus. In other words, compound and complex sentences containing participial and gerundial phrases prevail over simple and unspoken sentences. A characteristic feature of English texts is a deviation from the rigid order of words (inversion). The presence of a direct order of words allows you to use deviations from it to strengthen the meaning of individual members of the sentence. Inversion involves putting the highlighted word at the beginning of the sentence, it is there that the logical stress in English falls.
4. Graphical level. The authors of the article note that in the scientific and technical literature information is often presented not only in the form of a linear text, but also in the form of graphic objects ("nonverbal terminology"): - tables; - graphics; - schemes; - drawings. In addition, the verbal components of tables, graphs and charts often include search terms that help you navigate a large amount of information and satisfy such requirements for scientific text as compositional clarity and clarity of presentation

Many common characteristics of the scientific and technical style encountered in the English language, this primarily refers to the informativeness of the text and its associated saturation terms and their definitions, to the standard and consistent manner of presentation, its nominal character - the predominance of combinations, the core of which is the noun, especially various types of attributive groups, a relatively wider use of abstract and general word-concepts, the prevalence of phraseological equivalents of the word. *The effect of plastic deformation has been approached by several investigators.*

Form of past tense Past Indefinite is used in describing the work done (experiment, research, calculation), if the work was the basis for certain conclusions. *Alfa-radiation was the first radiation to be studied in detail. Or Dalton was the first to deduce scientifically an atomic theory from experimental data.*

Scientific articles are characterized by modality, a special category, expressing the author's attitude to the text. The wide use by specialists of the so-called special general technical vocabulary, which also constitutes one of the specific features of the scientific and technical style, greatly contributes to their mutual understanding. These are words and combinations that do not have the property of a term to identify concepts and objects in a certain area, but are used almost exclusively in this sphere of communication, selected by a narrow circle of specialists, familiar to them, allowing them not to think about the way of expression of thought, but to concentrate on the essence of the matter. Special vocabulary includes all possible derivatives of terms, words used in describing the connections and relations between terminologically designated concepts and objects, their properties and features, as well as a number of national words that are used, however, in strictly defined combinations and thus specialized.

The term has neither emotional nor stylistic expressiveness, being a part of the professional vocabulary. It can acquire figurative or expressive meaning only when leaving the system of terms start being used in General English. In this case the term stops being a term and starts being a vocabulary unit of General English. [3]

The correct use of terminology is extremely important, for example, the "roentgenogram" in medicine - "roentgenogram", but in the field of physical chemistry - "X-ray diffraction pattern". The term "weight" is translated as "weight", the term "mass" as "mass", but when translated from English, "weight" meets the equivalent of "mass" . This is a critical moment for all physical sciences, where "weight is the force of gravity, and mass is one of the basic physical characteristics of matter (quantity of matter)". Use of neologisms or rare words. For example, in the fragment "shape-specific features of particles" the term "shape-size" does not occur in any dictionary and in the results of queries in search engines, being an author's neologism. When translating, it is possible to rewrite the fragment: "features of shapes and particle sizes" - "the characteristics of shapes and sizes of particles. [4]

To make the description as objective as possible, to concentrate the attention of the addressee on the described phenomenon, without accenting the author, leads to a generalization of the presentation, which is achieved by the wide use of impersonal sentences, constructs of the passive voice, participial and gerundial revolutions. And other means. The performer of the action is hidden behind the impersonal "they", "one", "we", by which is meant an indefinite group of persons.

**CONCLUSION**

Thus, the scientific functional style in English has a number of lingvostylistic features, most of which are characteristic of the corresponding Russian style. However, the English scientific texts are more characterized by the desire for conciseness and simplification of presentation.

In this paper, we analyzed the lexical and grammatical features of the functional style on the example of chemical texts.

As a result of the study, it can be concluded that the main stylistic feature of this text is an accurate and clear presentation of the material with the complete absence of expressive elements that give the speech emotional richness. In the scientific literature there are almost no metaphors, metonymic transpositions and other stylistic figures widely used in art works.

English-language scientific articles are characterized by high terminological saturation. Terms and terminological combinations are 9-10% of the total number of words.

**REFERENCES**

1. Горбунов А. Ю., Долбунова Л. А. Структура и языковые особенности англоязычных текстов технической документации. М.: Наука, 1987.
2. Гальперин И.Р. Текст как объект лингвистического исследования. М.: Наука 1981
3. Eremina S. V. On the problem of drawbacks of scientific terminology. Проблемы оптической физики и биофотоники SFM 2011. Саратов: Изд – во Новый ветер, 2011.
4. Судовцев В.А. Научно-техническая информация и перевод. М.: Высшая школа, 1989

**DEFINITION TO BE UNDERSTOOD**

S. V. Eremina, A. B. Pravdin

*Saratov State University (National Research University of Russia)*

The paper deals with the problem of developing definition of the terms of Biophotonics. A list of logical requirements for forming definitions has been formulated. An example of developing the definition on the basis of scientific data according to the formulated requirements has been presented. The paper provides information that may be useful for lexicographers, scientists compiling dictionaries on terminology of various scientific areas, Bachelor, Master and PhD students.

**INTRODUCTION**

Defining is generally understood to be the process of explaining the meaning of linguistically expressed signs. As a product the definition is a linguistic description of a concept which includes a list of characteristics conveying the meaning of the concept. It has the form of a simple predication of a word or word expression described as an equation of an unknown term and sum of its elements of meaning. General or encyclopedic definition describes a concept in a generally comprehensible way, taking into account the area in which it is met. Terminological definitions describe a concept within a special subject area.

Terminological definition provides a unique identification of a concept only with reference to the conceptual system of which it forms a part and classifies the concept within that system. Necessary and essential information for a definition is to be separated from many other definitions. It is required for identification of the term-concept equation. Thus, terminological definition should be restricted to the explanation of the accepted specialized meaning and then documented in a variety of lexicographical sources.

The definition is always intensional, that is, it is the reference of a term. Its defining characteristics are more essential than formal and material ones.

In general language interpretational dictionaries definition serves differentiating between homonyms and polysemic words explaining the meaning and use of the common words. The definition shows linguistic and sense links of the words, whereas terminological definition shows logical links of the concepts. This would permit to make a distinction between linguistic nature of definition the interpretational dictionaries and terminological definitions presented in terminological dictionaries.

In compiling terminological dictionary, a variety of sources is usually used. Traditionally, a terminological dictionary presents information as a term and a variant, or variants of its translation. The material for the latter is taken from the current literature on the special area written in the language of translation. Neither phonetic nor linguistic information is implied in such dictionaries. These dictionaries

are easy to use but sometimes the information is insufficient or seems improper, and then an interpretational dictionary would be helpful. Moreover, an interpretational dictionary could be compiled in such a way that it would be useful not only for specialists as a reference book, but also for students as a manual. Consequently, it should be developed according to the rules of presenting terminological information *via* dictionary articles.

As was mentioned above, an interpretational dictionary article presents a term and an interpretation, a verbal description of the meaning of the term. The obvious drawback is inequality of the articles. Some of them look too laconic, the others - as if they were taken from encyclopedia with equations, formulae, and pictures. For the specialist in the area such inequality in the scope and character of the articles would not be considered as a drawback, but for a professional translator, who is not satisfied with the information acquired from the translational dictionary it presents a problem, rather than a benefit. Students, whom we want to understand the professional language we speak in and understand everything we speak about would face the same problem in understanding what is meant. Therefore, the articles of the interpretational dictionary are to be constructed, or reconstructed according to the rules formulated by the authority lexicographers. Though there is no doubt, that the dictionaries of terminology of a certain special subject area should be compiled by the specialists in this area, but it would be better for them to be aware of the existing rules developed and formulated by the terminologists and lexicographers in order to enroll a wider audience of users of their scientific production.

#### METHODOLOGY AND DATA

For the definition to be understood it should be developed according to the logical requirements based on the properties of the term. The main approach which is a prerequisite to the requirements is – terminological definition should be analytical. This means that it fully and systematically identifies a concept with respect to all others in the particular subject area. Thus, the proper way of defining a term is given by a classical pattern of *genus et differentiae*. Here is the list of logical requirements for developing definitions:

- commensurability of defined [*definiendum*, term] and definition;
- essential features only, i.e., there should not be any extra information in definition, otherwise it would not be clear what is meant;
- definition should be formulated with words in direct meanings it should not be formulated in figurative or metaphorical meaning;
- definition should not be negative;
- definition should be systemic semantically, lexically, and syntactically;
- definition should verbally specify the place of the concept in the concept system, character of their links and relations with the nearest concepts;
- definition should show the place of the concept in the conceptual apparatus of the science;
- definition should aim at standardization of term system;
- formulation should not contain any logical circle or tautology;
- definition should be formulated in simpler words, preferably in the words of ESP, otherwise unknown would be defined *via* incomprehensive;
- definition should be concise: a big scope definition testifies poor systematization of the system of terms.

As an example, we take an article from the Minidictionary of Physics, interpretational dictionary of physics:

***Spectroscopy*** – the study of methods of producing and analyzing spectra using spectroscopes, spectrometers, spectrographs and spectrophotometers. The interpretation of the spectra so produced can be used for chemical analysis, examining atomic and molecular energy levels and molecular structures, and for determining the composition and motion of celestial bodies. [6]

Where “the study of methods” is a *genus*, and “analyzing spectra using spectroscopes, spectrometers, spectrographs and spectrometers” – is *differentiae*, i.e. specifying characteristics of the concept.

Then we take a page from the interpretational dictionary on Biophotonics arbitrarily in order to see what a useful source of information it is:

***tomographic reconstruction***: Mathematical procedure of obtaining 3D images

*by which the size, shape, and position of a hidden object can be determined.*

**tomography:** *Imaging by sections or sectioning (the Greek word “tomos” conveys the meaning of “a section” or “a cutting”). A device used in tomography is called a tomograph, while the image produced is a tomogram. The method is used in medicine, biology, and other sciences. In most cases it is based on the mathematical procedure called tomographic reconstruction. There are many different types of tomography, including x-ray computed tomography, magnetic resonance imaging (MRI), functional MRI (fMRI), positron-emission tomography (PET), single-photon-emission computed tomography (SPECT), diffuse optical tomography, optical-coherence tomography (OCT), optical-projection tomography (OPT), acousto-optic tomography (AOT), and optoacoustic tomography (OAT) [8]*

In order to standardize the dictionary information, we have applied the listed requirements to the structuring of the article; gender, species and essential information only:

**tomography** - *technique for imaging by sectioning used in medicine, biology and other sciences, based on the mathematical procedure called tomographic reconstruction.*

## CONCLUSION

Developing definitions is an important part of standardizing the system of terms. A definition is a statement describing essential features of the concept: common and distinctive, or generic and specific. The definition fixes equality between the meaning of the term and the object it names. For the definition to be understood it is to be made according to the requirements formulated on the basis of the properties of terms. The presented methodology of developing definition could be useful either for defining new terms or for standardizing the existing system of terms of a science.

## REFERENCES

1. Еремина С. В., Железовская Г. И. Упорядочение языка современной дидактики (Методологический аспект). – Саратов: изд-во «Лицей». 1998. – 122с.
2. Еремина С. В. Английский для специальных целей: краткая характеристика//Лингвометодические проблемы преподавания иностранных языков в высшей школе: Межвуз. сб. науч. тр. – Саратов: Изд-во Саратов. Ун-та, 2006. – Вып. 3.
3. Chambers Technical Dictionary. London. UK, 1995
4. Eremina S. V. On the problem of drawbacks of scientific terminology. Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM-2011 / под ред. Г. В. Симоненко, В. В. Тучина – Саратов: Изд-во Новый ветер, 2011. -162 с.
5. Eremina S. V., Pravdin A. B. Terminology Processing: Conceptual Approach. Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM-2013 / под ред. Г. В. Симоненко, В. В. Тучина. – Саратов: Изд-во Новый ветер, 2013. -202 с.
6. Minidictionary of Physics. Oxford University Press. Oxford. UK, 1996
7. Sager Juan C. A practical course in terminology processing. John Benjamins Publishing Company, Amsterdam/Philadelphia, 1990, - 254p.
8. Tuchin V.V. Dictionary of Biomedical Optics and Biophotonics. SPIE Press. Bellingham, Washington. USA, 2012.

## SUCCESSFUL ACADEMIC DISCUSSION AT A CONFERENCE

Anna Yu. Smirnova

*Saratov State University (National Research University of Russia)*

The article gives young scholars a guideline how to participate in an academic discussion at an international scientific conference, where the working language is English, establish useful contacts and get the most out of their attending such kind of events. It is especially important for young scholars who have just set off their journey for science and want to share their results with colleagues. In general, a productive for both sides (a presenter and the audience) discussion is likely to happen if a presenter is well-prepared for it beforehand, familiar with the material and certain about all details; is able to listen and to hear the question; is open for constructive criticism. Moreover, not to be boarded during other presentations, a participant should be inquiring and active and form interesting and promoting questions. It is advised to study the conference program to find out about persons who it is desirable to establish contact with and think about social events which can be attended in order to meet them in more informal environment.

## INTRODUCTION

Scientific conferences have a lot of benefits for a student as a young scholar. To motivate “fresh blood” to participate, more experienced academicians usually give such reasons as conferences are “inspirational and energizing opportunities to connect with the greater scientific community” [2]; they help to “think about new strategies to approach research, broader context, and establish collaborations” [2] and allow to “get feedback from the audience” [2]. It is a way of testing out ideas before you write a full research work, and think what to change if some of your conclusions are not well-accepted. All reviews are full of it, the Internet is full of why you should take part in such kinds of scientific meetings.

But often some frequent problems are neglected and students found themselves unprepared to what is going on. We should be always careful about students’ first experience at the conference as it usually builds a very strong association with such events and the whole scientific community in general for their all career and that is difficult to change. It is not from just a point of view of methods of teaching English but maybe mostly from the point of view of psychology, but still it matters for students’ motivation so a teacher should find it necessary to consider as a part of pedagogical work.

## BASED ON THE EXPERIENCE

So to start with let me tell you a story about my first and negative experience as a presenter. It happened when I was a postgraduate student and had just started to write the first pages of my thesis, outlining the problems I wanted to find the solutions to. So of course my speech was not totally without weak points but it did not pretend to be without them definitely, what I mentioned in advance. But one of the so-called-distinguished scholars claimed my presentation and me in particular to be totally unsuitable for any research at all. What is significant that person did not ask me any questions, but just gave comments I could interpret as quite rude. Definitely I can be called too sensitive and retrospectively the situation can be seen from the positive side, that it a good training for real life and so on. But at that moment it made me very confused and devastated. Since then I really hate conferences. Despite the fact I never feel stressed delivering lectures for students and enjoy the process and feel comfortable making oral presentations anywhere else – conferences make me feel unhappy. So I always aim to avoid such lot for my students.

During the academic year Saratov State University holds two conferences I take part in as an organizer and a linguistic supervisor of my students both junior, senior and undergraduates. They are “Presenting Academic Achievements to the World” [3] and “Science Kaleidoscope” [4].

I want to notice that my task is not to help prepare the scientific material the students are going to represent. I only assist the junior students because they investigate the problem in the given area only in a form of a review, as they do not have enough knowledge to make any discovery or any serious conclusions, and for third and forth-year-students and postgraduates the task of scientific advice is performed by their professors and associate professors from their field. So what I can do is to prepare their speech in English and just generally encourage students to follow their ambitions.

## RESPONSIBILITY OF TEACHERS

I believe that an honest teacher must take responsibility and spend time on their student if they send them to the conference. Make sure your students are well-prepared and are able to present their material in a good language level. If a presenter finds his bearings on the ground of the research, he naturally answers all the questions. As to the language skills, poor pronunciation and a lot of hesitation can spoil an impression from highly innovative material, and some questions can be asked about information that was mentioned and detailed in the speech, but misheard or misunderstood by the audience. The key to an effective conference presentation and discussion lies in being well-prepared from both sides: scientific and language. “Public presentation is a skill that can be taught, and it is part of the job of teachers to do that” [1].

Also sometimes it happens that students assisted their professor in some research and a professor decides to send them to demonstrate the achieved results at the conference instead of him, without taking into account that a young assistant is not ready to answer some tricky questions and take part in a discussion. The most negative experience and complaints sound like the result of a “sink-or-swim approach” [1].

To cheer up new conference attendees, it can be said that even leading researches can feel nervous while introducing their brainchild to a large audience for the first time.

## TIPS FOR STUDENTS

So a wise teacher should give the following tips to their students:

Keep in mind that a conference speech should be different from an article you are going to publish based on it, because the first thing is going to be heard and the second is read. “Listeners typically have lower attention spans than readers; therefore, keep the content simple and straightforward” [1]. If you use visuals, put a clear introduction, key terms and definitions, and conclusion on the slides.

It is a part of your good manners to meet a time limit. Generally, oral presentation sessions at conferences are 10 minutes long, so prepare your material accordingly. Respect time limit and do not break it. It is noticed, that usually people who do it are quite selfish and are interested only in their own research not listening to others.

Silent reading is not a good tool to approach the preparatory stage. Firstly, reading aloud takes longer than reading in mind. Moreover, we tend to speak a foreign language slower than our native one and it takes more time to understand it. So you can rehearse with some of your peers to create an impression of the audience. Also practice sessions can be recorded on video and this way a student can have a look from aside, observe and avoid some disappointing mistakes. I am not for learning the text by heart. If you cannot speak naturally without looking at your paper, it is better to read, than to produce an impression of reciting a poem.

You never have a second chance to make a first impression. This principle works here so how you begin your presentation matters a great deal. Listeners usually decide if your presentation is interesting for them during first 10-20 seconds of your speech.

It is very helpful to learn most popular time fillers and linkers to make your speech flow more smoothly and naturally. Such words as “well”, “you know”, “let think about...”, “furthermore,” “in addition,” “consequently,” “meanwhile,” “on top of that”, “finally” will build bridges between your ideas.

While reasoning, introduce arguments and examples with appropriate words: “firstly..., secondly..., thirdly” to help the audience follow your explanations point by point. The main task of such linkers is to thread your speculations.

Phrases like “Let’s move to the next idea of the research” or “Let’s consider another example” definitely direct people to some particular features.

The most stressful, students confess, is the moment when they finish their speech and pronounce a phrase “thank you for your attention and now I am ready to answer your questions”. Do not be scared if you do not understand a question. You can always ask to repeat it or rephrase. Also, it is not the end of the world if a presenter understands the question, but still is not able to answer it. Just admit it and thank for an interesting question which possibly can become a starting point for the next article. In both situations use a phrase: “Thank you for an interesting question, now I do not have enough information to give a full and complete answer to it, but it will help me to find a new direction of my research”.

Young scientists should be accompanied by somebody they know well: other students from their group, or other groups from the department. It boosts their confidence and gives sense of general support and empathy from peers.

A social side of conferences is just as important as their scientific content. But this is a tough point for many people. To start with, this is one of those areas that is highly depends on personality. Even for people who are extremely sociable it is not always easy to start a conversation with a total stranger. But other students and postgraduates are often eager to have somebody else to talk to, so they are very welcoming. So do not miss the opportunity to build new connections, probably useful for future.

## CONCLUSIONS

Conferences definitely help to pull forward the development of the whole scientific community, so they should unite, not separate. So the aim of more experienced professors is to promote such kinds of events among young scholars and attract them to participate.

## REFERENCES

1. Orzel Chad GOING TO AN ACADEMIC CONFERENCE? HERE ARE SOME TIPS  
<https://www.forbes.com/sites/chadorzel/2015/06/26/going-to-an-academic-conference-here-are-some-tips/#76be391368a8> (10 September 2018)
2. Pain Elisabeth HOW TO GET THE MOST OUT OF ATTENDING CONFERENCES  
<https://www.sciencemag.org/careers/2017/05/how-get-most-out-attending-conferences> (10 September 2018)
3. SCIENCE KALEIDOSCOPE <<https://www.sgu.ru/structure/fi/encrosscult/meropriyatiya-dlya-studentov/science-kaleidoscope>> (10 September 2018)

## DELIVERING A LANGUAGE PROJECT

Dina A. Alexeeva, Anna A. Sosnovskaya

*Saratov State University (National Research University of Russia)*

The article is dedicated to the implementation of the project activity within the framework of the lecture course. A clear algorithm for project creating is given, the problems that the students encountered while using this technology are analyzed.

### INTRODUCTION

Nowadays changes in higher education stimulate the concept development of the nature of education itself. The strategic direction for improving the quality of education is to change the lecture learning system.

To overcome the shortcomings of traditional lectures, modern researchers in the field of innovation education suggest using their upgraded versions. Their main purpose is to achieve qualitatively new goals of education, aimed at the formation of professional competence of students [1].

Taking into account these innovations we have developed a course 'Introduction to Linguistics' in the framework of the program 'Translator in the Field of Professional Communication' implemented at the Department of English Language and Intercultural Communication at the Faculty of Foreign Languages and Language Teaching Methods as well as at a number of other faculties. A course of lectures is built in such a way that elements of modern forms of innovation education are included. In particular, the great emphasis is placed on the development of practical tasks of interactive nature. The most significant part in the course of lectures is given to the project 'World languages in terms of their structure, units, typological properties, and the language picture of the world'.

### PROJECT METHOD TECHNOLOGY

The project method is successfully used in teaching. By definition of E.S. Polat: 'This technology involves a combination of research, search, problem methods, creative in their very essence' [2]. Project activity always has a common goal, conventional methods and aims to achieve the overall result.

At one of the lectures the students were presented with a clear algorithm of creation a project within the topic of 'World languages in terms of their structure, units, typological properties, and the language picture of the world' which includes a number of stages: choosing a topic, defining the main problem and specific tasks for its solution, information search and analysis as well as the presentation of results of their activities in the final product. It was emphasized that the project is a cooperative work on a particular problem with a goal not only to solve this problem but also to prove the correctness of its solution due to cognitive, experimental, applied, creative activities completed at different stages. What is important, the role of a teacher changes from the source of knowledge into the academic adviser of students on their way to acquire the knowledge on the subject.

### WORKING ON PROJECT STAGES

The first-year students of faculties of Mechanics and Mathematics; Physics; Economy; Nano- and Biomedical Technologies; Computer Science and Information Technologies were challenged to create the project 'World languages in terms of their structure, units, typological properties and language picture of the world'. A group of students had to study problems set by the teacher and to present the results using Microsoft PowerPoint.

The realization of this task included certain steps. At the first step students were introduced to this type of task, basic requirements and evaluation criteria. Students were asked to select a language from the previously considered groups of languages. At the second stage groups were formed. Since the lectures are being given for a large audience it was assumed that students would split into 10 groups of 7-8 people.

The third and fourth stages presupposed that students would work together on the topic selected by them, study reference books and use the web resources. It was necessary to analyze the language according to the following plan:

1. Determine which group this language belongs to.
2. Consider phonetic, lexical, morphological, syntactic features of this language.
3. Identify the specific features of the language.
4. Compare it with Russian.

At the fifth stage each group was engaged in the material analysis and assessment.

The final stage was to give the results in the form of an oral presentation.

#### PROJECT REALISATION

The results of the project varied between different groups. In particular, since the teacher did not strongly insist on choosing languages of a particular group most of the groups gave preference to Indo-European languages. Czech, Italian, German, Albanian, Greek, Bulgarian were chosen which is quite predictable since Indo-European languages are clear to Russian-speakers and have similar phonetic, morphological, lexical, and syntactic structure. However, attempts were made to explore Sino-Tibetan, Finno-Ugric, Turkic languages (Chinese, Finnish, and Tatar respectively).

The second stage of the project (division into groups) did not go smoothly as the students were supposed to split into groups on their own. But it turned out to be a daunting task and instead of 10 groups of 7-8 people project was implemented in 12 groups, two of which included 2-3 students. Therefore, it was concluded that the second stage of the project must be fully controlled by the teacher.

The main part of the project (language description) was accurately done by students. Nevertheless, a number of groups faced a clear dissociation of students in the distribution of the material studied. Much of the student research was devoted to phonetics, phonetic processes, while lexical changes, morphological and syntactic features in the language were less described. In future more attention should be paid to semantic changes in the word (metaphor) while guiding students at the stage of structure consideration of the selected language as the metaphor acts as a means of interpreting the modern world [3, 4]. It allows to 'humanize' the world of modern technology while drawing a certain picture of the world characterized by its originality [5, 6] and facilitate the acquisition of a new concept with the help of a well-known concept used in everyday life by understanding the principles of metaphorical shifts [7] and metaphorical models [8, 9]. Not all students coped with the task (to compare the analyzed language with Russian), perhaps because they did not take into account the need to consider common and specific properties of languages to create a complete language picture of the world.

The stage of analysis and evaluation of material in many groups was completely absent as the students did not find the opportunity to meet and discuss the general concept of the research, which affected PowerPoint presentations.

Creating a multimedia presentation in Microsoft PowerPoint is not a new way of results presentation, however, it justifies its popularity as it is easy to use, has a small set of widely available technical means, the possibility to systematize and visualize practically any information for the audience. However, all these advantages of the presentation are needed to be effectively used. Inexperience and carelessness can ruin any public speaking.

It turns out to be a challenge for the first-year students to follow logical sequence, use appropriate visuals, avoid spelling and grammar errors and mind precise pronunciation while speaking in a clear voice.

Some students seem to be unaware of the fact that their presentations should meet the requirements of a certain level of formality. They do not take into account the audience's expectations and its level of knowledge, i.e. they may present the information mentioned on the lectures as a new piece of information and skip important points such as introduction of the specific terminology as if their mates are experts in the field.

We observed the necessity to improve students' time management skills, as they might start the presentation with one speed of delivering and accelerate towards the end as they realize how many things should be said before their 20 minutes are over. That lack of experience and proper rehearsal in advance is understandable as we speak of the first-year students.

The other issue is that students try to sound too smart and forget the basic principle: "The key to a successful oral presentation is to keep things simple" [10]. Over usage of specific terminology and an attempt to cover too many points in one piece leads to audience confusion.

An essential tool that is sometimes misused is visuals, as some students tend to put all the information they want to share on the slides while still reading pieces of it from their notes. The visuals should be the outline of the speech, not its complete repetition.

As for the final stage (delivering the results in the form of oral presentation), most students coped with the given task distributing the material in accordance with the structure of the report. The report was supposed last 15-20 minutes. A particular difficulty that has arisen before the students is to determine the

amount of the presented material, follow the coherence and consistency of presentation and use a certain style in reproducing material. Taking into consideration these aspects it seemed necessary to organize the additional seminar for students on preparing to deliver an oral presentation and teaching them how to present a project in public.

#### CONCLUSION

Thus, this lecture course should be built to ensure the transition to innovation education. Being trained with innovative technology students develop an ability to organize joint activities based on principles of cooperation. The student is included in the active cognitive process, independently formulates a given problem, plans its possible solutions, draws conclusions, analyses his / her activities. Project activity not only increases students' interest in the lecture course, but also contributes to deeper understanding of the studied material encouraging students to use reference materials.

#### REFERENCES

1. Методические рекомендации по разработке и реализации на основе деятельностно- компетентного подхода образовательных программ ВПО, ориентированного на ФГОС третьего поколения / Т. П. Афанасьева, Е. В. Караваева, А. Ш. Канукова, В. С. Лазарев, Т. В. Немова. М., 2007. 96 с. (2007)
2. Полат Е.С., Бухаркина М.Ю., Моисеева М.Ю., Петров А.Е. Новые педагогические и информационные технологии в системе образования. М.: Академия, 2001. 272 с. (2001)
3. Сосновская А.А. Метафоризация в сфере «Новейшие техногенно опосредованные информационные и коммуникационные процессы» (на материале русского и английского сленга): Дис. ...канд. филол.наук. Саратов, 2011. 287 с. (2011)
4. Alexeeva Dina A. Terminology as a source of metaphors //Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM-2016 / под. ред. Г.В. Симоненко, В.В. Тучина. Саратов: Изд-во "Новый ветер", 2016. 207 с. С. 201–203. (2016)
5. Балашова Л.В., Сосновская А.А. // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Филология. Журналистика 2009. Т. 9. № 4. С.3-9
6. Сосновская А.А. // Вестник Челябинского государственного ун-та. Серия Филология. Искусствоведение 2011. Т. 52. № 10. С. 136–138
7. Алексеева Д.А. // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Филология. Журналистика 2016. Т. 16. № 3. С. 252–255
8. Alexeeva Dina A. Frequent Metaphoric Models // Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM-2017 / под. ред. Г.В. Симоненко, В.В. Тучина. Саратов: Изд-во "Новый ветер", 2017. 144 с. С. 131–133.
9. Сосновская А.А. Основные принципы метафоризации в сленге (на материале русского и английского языков) // Иностранные языки в контексте межкультурной коммуникации: Материалы докладов VIII международной конференции "Иностранные языки в контексте межкультурной коммуникации"(25-26 февраля 2016 года) - Саратов: ИЦ "Наука", 2016. 502 с. С. 207-213.
10. Locker K. Business and Administrative Communication. Ney York: McGraw-Hill Education, 2012. 729 p. (2012)