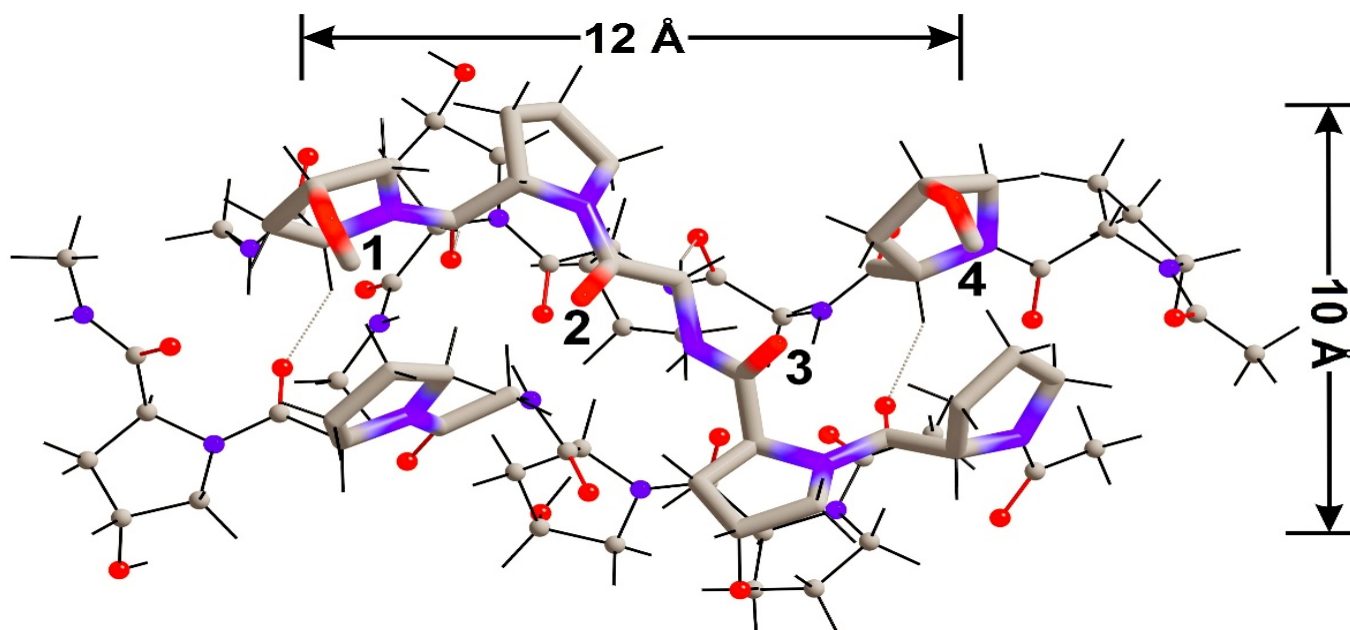


**ПРОБЛЕМЫ
ОПТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
И БИОФОТОНИКИ**

SFM-2017

*Посвящается 100-летию физико-математического образования
в Саратовском государственном университете*



Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского

*Посвящается 100-летию физико-математического образования в
Саратовском государственном университете*

**ПРОБЛЕМЫ
ОПТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ
И БИОФОТОНИКИ
SFM-2017**

Материалы 5-го Международного симпозиума и
21-ой Международной молодежной научной школы
Saratov Fall Meeting 2017

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

25 – 29 сентября 2016 года

Саратов



Саратов
НОВЫЙ ВЕТЕР
2017

УДК 535(068)
ББК 22.343.43
П78

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 : Изд - во «Новый ветер», 2017. – 144 с. : ил. ISBN 978-5-98116-224-4

В сборник вошли приглашенные лекции и доклады участников 5-го Международного симпозиума по оптике и биофотонике и 21-ой Международной молодежной научной школы по оптике, лазерной физике и биофотонике, организованной и проведенной в Саратове с 25 по 29 сентября 2017 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 (проект № 17-02-536)

УДК 535(068)
ББК 22.343.43

Научное издание

ПРОБЛЕМЫ ОПТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ И БИОФОТОНИКИ
SFM-2017

Материалы 5-го Международного симпозиума по оптике и биофотонике и 21-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 01.12.2017. Формат 60×84 1/8. Усл. печ. л. 16,92 (18,78).

Тираж 50. Заказ 12

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

ISBN 978-5-98116-224-4

© Саратовский государственный
университет, 2017

СОДЕРЖАНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ

ОПТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ БИОТКАНЕЙ	6
Изучение молекулярного механизма постдиффузионной стадии иммерсионного оптического просветления кожи методами классической молекулярной динамики и квантовой химии <i>К. В. Березин, К. Н. Дворецкий, М. Л. Чернавина, В. В. Тучин</i>	6
Динамика изменения оптических и физиологических характеристик кожи человека <i>in vivo</i> в условиях внешней механической компрессии <i>О.А. Зюрюкина, Ю.П. Синичкин</i>	16
Оптическая цифровая регистрация седиментации эритроцитов и ее моделирование в форме коллективного процесса <i>В.А. Дубровский, К.Н. Дворецкий, С.В.Марков</i>	20
Мониторинг изменения размеров и средних показателей преломления и двулучепреломления коллагеновых пучков при иммерсионном оптическом просветлении с помощью томографа THORLABS-ОСР930SR <i>М. Е. Швачкина, Д. Д. Яковлев, А.Б. Правдин, Д. А. Яковлев</i>	28
Использование спектрофотометрических методик при лабораторной оценке цветности дентина <i>Н.И. Казадаева, Л.Е. Долотов, А.Б. Правдин</i>	35
Анализ кинетики нагрева раковых опухолей крыс излучением ближнего ИК спектрального диапазона при внутривенном введении золотых наностержней <i>В.Д. Генин, Э.А. Генина, А.Б. Бучарская, Д.К. Тучина, Н.Г. Хлебцов, В.В. Тучин, А.Н. Башкатов</i>	39
Результаты исследования увеличения оптической глубины детектирования частиц CaCO_3 в коже с помощью ОКТ при оптическом просветлении <i>С. М. Зайцев, Ю. И. Свенская, Е. В. Ленгерт, А. Н. Башкатов, В. В. Тучин, Э. А. Генина</i>	43
Диффузия метиленового синего в кожу крысы <i>ex vivo</i> <i>Е. А. Баско, М.В. Клементьева, А.Н. Башкатов, В.В. Тучин, Э.А. Генина</i>	47
Применение методов теории колебаний к описанию комплексов из магнитосом и филаментов цитоскелета <i>А.С. Дронкин, Б. А. Медведев</i>	53
ГОЛОГРАФИЯ И ВОЛОКОННАЯ ОПТИКА	57
Эффекты декорреляции в цифровой голографической интерферометрии рассеивающих объектов <i>Б.А. Гризбил, П.В. Рябухо, Л.А. Максимова, В.П. Рябухо</i>	57
Проявление модуляционной неустойчивости при распространении оптических импульсов в волокнах с переменной по длине дисперсией <i>А.И. Конюхов, А.И. Рап</i>	63
Неупругое взаимодействие оптических солитонов в волокнах с модуляцией диаметра <i>П.А. Маврин, А.И. Конюхов</i>	66
Генерация дисперсионной волны в волокнах с переменным диаметром <i>Е.В. Щуркин, А.И. Конюхов</i>	69
Исследование влияния внешних воздействий на информационный сигнал волоконно-оптического гироскопа <i>С.В. Сердобинцев, С.В. Овчинников</i>	71
СПЕКТРОСКОПИЯ АТОМОВ И МОЛЕКУЛ	76
Интерпретация КР спектра кристаллической D-рибозы на основе концепции локальной симметрии <i>А.В. Новоселова, В.В. Нечаев, К.Н. Дворецкий, М.Л. Чернавина, К. В. Березин</i>	76
Установление строения N-, O-, S-содержащих гетероциклических соединений спектральными методами <i>М.А. Ивонин, Н.О. Василькова, Д.К. Дымолазова, Н.В. Сафарова, В.В. Сорокин, А.П. Кривенько</i>	80
Применение квазипотенциала к анализу спектров экзотических атомов <i>Н.А. Бойкова, О.А. Бойкова</i>	83
Применение теории возмущений к анализу тонких сдвигов в экзотических атомах <i>Н.А. Бойкова, О.А. Бойкова</i>	85
ОПТИКА АНИЗОТРОПНЫХ СРЕД	88
Картины рассеяния ортогонально поляризованных компонент света для статистически вращательно-инвариантных двулучепреломляющих фазовых экранов <i>Д. Д. Яковлев, Д. А. Яковлев</i>	88
Электромагнитно индуцированная прозрачность эллиптически поляризованных взаимодействующих полей <i>О. М. Паришков</i>	95
МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ ФИЗИКИ	101
Траекторно-вероятностный дуализм в хаотической динамике: Особенности компьютерного моделирования <i>В.М. Аникин</i>	101

Роль фундаментальных постоянных в формировании физических теорий <i>Н.А. Бойкова, О.А. Бойкова</i>	104
Геометрическая калибровка блока магнитометров <i>Д.М. Спиридонов, А.А. Игнатьев</i>	107
Официальный оппонент в системе целеустремлённой научной деятельности <i>В.М. Аникин, Б. Н. Поизнер</i>	109
Круглый стол: человек и свет в естественнонаучной и художественной картине мира <i>Модератор Б.А. Медведев</i>	114
АНГЛИЙСКИЙ ЯЗЫК КАК СРЕДСТВО НАУЧНОГО ОБЩЕНИЯ	129
On compiling the English-Russian dictionary on biophotonics <i>Svetlana V. Eremina</i>	129
Frequent metaphoric models <i>Dina A. Alexeeva</i>	131
On the meaning of the term <i>Svetlana V. Eremina, Alexander B. Pravdin</i>	133
Writing a science paper: profitable and effective <i>Anna Yu. Smirnova, Anna A. Sosnovskaya</i>	136
Terminology in computer science <i>Arina O. Shelyugina</i>	138
Guidelines for preparing ESL students for oral presentations: the linguistic aspect <i>Darya N. Tselovalnikova</i>	140

ПРЕДИСЛОВИЕ

Saratov Fall Meeting 2017 (SFM'17) включает Международный симпозиум «Оптика и биофотоника» и Международную школу для студентов и молодых ученых по оптике, лазерной физике и биофотонике. В 2017 году симпозиум объединил 12 продолжающихся ежегодных конференций и семинаров: «Оптические технологии в биофизике и медицине XIX», «Лазерная физика и фотоника XIX», «Спектроскопия и молекулярное моделирование XVIII», «Электромагнетизм микроволн, субмиллиметровых и оптических волн XVII», «Нанобиофотоника XIII», «Микроскопические и низкокогерентные методы в биомедицинских и других приложениях X», «Интернет биофотоника X», «Нелинейная динамика VIII», «Низкоразмерные структуры VII» «Биомедицинская спектроскопия IV», «Передовые поляризационные и корреляционные технологии в биомедицине и материаловедении IV» и «Компьютерная биофизика и анализ биомедицинских данных IV», а также впервые организованный семинар «Лазерные и оптические технологии в изучении физиологии и патологии мозга».

XXI Международная школа в этом году включила следующие семинары: «Современная оптика XVI», «Английский язык как средство коммуникации в научном сообществе XVI», «История, методология и философия оптического образования X», «Телемедицина: возможности, приложения, перспективы XII» и выставку «Ярмарка инновационных технологий в биофотонике».

Для участников Школы с краткими курсами лекций выступили известные учёные Герберт Шнеккенбургер (Herbert Schneckenburger) из университета Ален, Германия; Шон Кирпатрик (Sean J. Kirkpatrick) из Мичиганского технологического университета, США; Анна Ярославская из Массачусетского университета, Лоуэлл, США и Шинде Ли (Xingde Li) из университета Джона Хопкинса, США. Лекции были посвящены актуальным проблемам биофотоники и применению современных оптических технологий в биомедицине. Участниками SFM'17 было представлено 13 пленарных лекций, в том числе 4 интернетовских, 41 приглашенная лекция, 185 устных докладов, 218 стендовых и 37 интернет-докладов.

Пленарные лекции по актуальным проблемам фотоники и биофотоники были прочитаны ведущими мировыми экспертами из России и стран дальнего зарубежья. Среди стран участниц «Saratov Fall Meeting» Россия, США, Канада, Великобритания, Ирландия, Германия, Франция, Нидерланды, Бельгия, Испания, Португалия, Италия, Дания, Финляндия, Польша, Болгария, Белоруссия, Украина, Эстония, Казахстан, Египет, Иран, Израиль, Китай, Индия, Япония, Сингапур, Тайвань, 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. В SFM'17 приняли участие (включая слушателей) более 500 человек.

Традиционным мероприятием Школы является семинар-лекторий для студентов университета, аспирантов и учеников старших классов «Современная оптика». В этом году его посетило более 400 слушателей. Публичные лекции были прочитаны профессорами Шиндом Ли и Гербертом Шнеккенбургером.

Участники из России и многих стран мира имели возможность разместить свои доклады на веб-сайте «Saratov Fall Meeting» <http://sfm.eventry.org/2017/>, который был доступен в течение мероприятия и будет доступен для пользователей в течение всего года до следующей конференции. Среди лекторов и докладчиков были известные специалисты в области фотоники, биомедицинской оптики и рассеяния света, спектроскопии, компьютерного моделирования, оптической томографии, нанотехнологий и т.д.

Статьи по материалам докладов опубликованы в «Проблемы оптической физики и биофотоники» (<http://optics.sgu.ru/library/pop>), в Proceedings SPIE, в специальном выпуске международного журнала Journal of Biomedical Photonics & Engineering (<http://jbpe.ssau.ru/index.php/JBPE/pages/view/sfm17>).

Как и в прошлые годы активное участие в организации SFM приняли студенческие отделения международных оптических обществ SPIE и OSA. В 2017 году кроме студенческих отделений СГУ большую помощь в организации Школы и Симпозиума оказали отделения Института физики

твёрдого тела РАН, МГТУ, Самарского университета, Технологического университета Гданьска, ИТМО и др.

Информация о «Saratov Fall Meeting 2017» доступна по адресу <http://sfm.eventry.org/2017/>, а также на платформах социальных сетей Facebook <https://www.facebook.com/groups/saratovfallmeeting/> и Вконтакте <https://vk.com/saratovfallmeeting>.

Председатель 5-го Международного симпозиума и
21-й Международной междисциплинарной молодежной научной школы,
профессор, доктор физико-математических наук
В. В. Тучин

Секретарь 5-го Международного симпозиума и
21-й Международной междисциплинарной молодежной научной школы,
доцент, кандидат физико-математических наук
Э. А. Генина

Председатель организационного комитета
21-й Международной междисциплинарной молодежной научной школы,
доцент, доктор физико-математических наук
Г. В. Симоненко

ОПТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ БИОТКАНЕЙ**ИЗУЧЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО МЕХАНИЗМА ПОСТДИФФУЗИОННОЙ СТАДИИ ИММЕРСИОННОГО ОПТИЧЕСКОГО ПРОСВЕТЛЕНИЯ КОЖИ МЕТОДАМИ КЛАССИЧЕСКОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И КВАНТОВОЙ ХИМИИ***К. В. Березин¹, К. Н. Дворецкий², М. Л. Чернавина¹, В. В. Тучин^{1,3,4}*¹Саратовский государственный университет,²Саратовский государственный медицинский университет,³Институт проблем точной механики и управления РАН,⁴Национальный исследовательский томский государственный университет

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)₃. 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.

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 работах [13-15] предложены математические модели распространения света в биотканях. 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. В связи с этим в настоящей работе с целью установления корреляции между потенциалом оптического просветления биологической ткани и параметрами межмолекулярных взаимодействий (время нахождения агентов в водородосвязанном состоянии, относительная вероятность образования двойных водородных связей и энергия образования комплексов) проведены исследования взаимодействия шести типичных просветляющих иммерсионных агентов (1,2 и 1,3-пропандиол, этиленгликоль, глицерол, ксилитол и сорбитол) с миметическими пептидом коллагена (GPH)₃ с использованием методов классической молекулярной динамики, молекулярного докинга и квантовой химии (PM6 и DFT/B3LYP).

МЕТОДИКА МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В качестве молекулярной модели коллагена был использован миметический пептид коллагена (GPH)₃ [21], 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 [22]. В качестве иммерсионных просветляющих агентов нами были рассмотрены три двухатомных спирта (этиленгликоль, 1,2 и 1,3 пропандиол) и 3 многоатомных спирта (глицерол, ксилитол и сорбитол), для которых в работе [1] имеются экспериментальные данные по потенциалам оптического просветления. Молекулярное моделирование взаимодействия просветляющих агентов с коллагеном проводилось в несколько этапов.

На первом этапе, методом DFT/B3LYP/6 - 311+G(d,p) [23,24] с использованием программы Gaussian [25] были определены и рассчитаны все самые низкоэнергетические конформеры рассматриваемых спиртов 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.

На втором этапе моделирования, методами классической молекулярной динамики, исследовалась вероятность образования водородной связи между пептидом коллагена ((GPH)₃)₁₀ и выбранными молекулярными агентами. Также оценивалось время их пребывания в водородосвязанном состоянии с коллагеном и влияние, которое они оказывают на его структуру. Молекулярное моделирование взаимодействия этих агентов с коллагеном проводилось с помощью пакета классической молекулярной динамики GROMACS [26] с силовым полем AMBER-03 [27]. Модельная сцена представляет собой трехмерную ячейку в форме прямоугольного параллелепипеда с следующими длинами сторон: 3нм × 3нм × 9нм. Границы ячейки выбирались периодическими (в случае столкновения с границей молекула проходит через нее, появляясь со стороны противоположной границы). Перед началом каждого моделирования 20 молекул агента распределяются случайным образом в пределах ячейки. Начальные скорости атомов задавались с помощью случайного генератора чисел пакета GROMACS и имели Максвелловское распределение, соответствующее выбранной температуре. Для моделирования системы использовались термостат и баростат Берендсена [28], обеспечивающие сходимость температуры и давления системы к установленным значениям $T_0 = 300\text{K}$ и $P_0 = 1$ бар. Временной шаг моделирования был выбран равным 0.0001 пс, а полное время моделирования составило 100 пс. Состояние системы записывалось каждую 0.1 пс. Записанные траектории движения молекул обрабатывались средствами пакета GROMACS и с помощью программы VMD (Visual Molecular Dynamics) [29]. Для каждой исследуемой системы моделирование повторялось 30 раз, полученные результаты усреднялись. Также рассчитывалась стандартная ошибка полученных арифметических средних.

Далее для моделирования состояния близкого к нативному, модельная сцена заполнялась водным раствором выбранных просветляющих агентов. Их концентрация в водном растворе изменялась от 0 % (чистый растворитель вода – модель SPC/E[30]) до 60 % (ксилитол и сорбитол) или 70% (остальные спирты). Все стартовые параметры для молекулярного моделирования аналогичны предыдущему этапу за исключением времени моделирования – оно составляло 50 пс. На данном этапе оценивалось влияние введенных в водное окружение коллагена просветляющих агентов на геометрические параметры α -цепей пептида.

На третьем 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 [31]. Эта оптимизированная структура модели коллагена использовалась для проведения молекулярного докинга с просветляющими агентами в рамках программы AutoDockVina [32]. 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. При построении корреляции с потенциалом оптического просветления были выбраны наибольшие значения энергий межмолекулярного взаимодействия, соответствующие наиболее вероятным структурам комплексов.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Рассчитанные в рамках метода DFT/B3LYP/6 - 311+G(d,p) пространственные конфигурации самых низкоэнергетических конформеров шести просветляющих агентов показаны на рис.1. Следует отметить, что для всех рассчитанных конформеров были вычислены значения относительных населенностей и в случае, если в смеси конформеров оказывались, например два или более значимых (более 10%) конформера, то все они в соответствующих пропорциях принимали участие в молекулярном моделировании, которое проводилось методом молекулярной динамики. При расчете энергий межмолекулярного моделирования методами квантовой химии на последнем этапе моделирования принимали участие только самые низкоэнергетические конформеры просветляющих агентов.

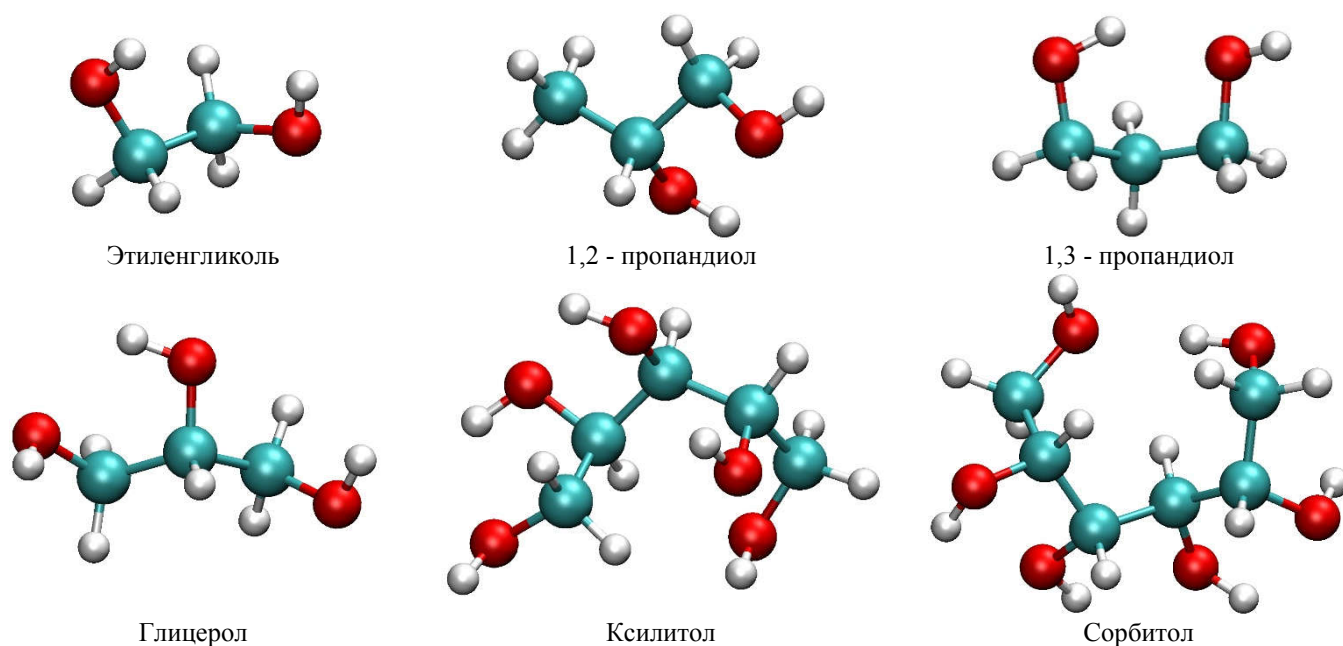


Рис.1. Рассчитанные методом DFT/B3LYP/6 - 311+G(d,p) пространственные конфигурации самых низкоэнергетических конформеров просветляющих агентов.

Как видно из рис.1. для всех представленных соединений наиболее выгодными в изолированном состоянии являются конформации, в которых гидроксильные группы находятся максимально близко друг от друга, что зачастую приводит к образованию внутримолекулярных водородных связей.

В рамках второго этапа моделирования были оценены средние времена нахождения молекул просветляющих агентов с молекулой пептида в состоянии водородной связи. Под временем нахождения в связанном состоянии понимается сумма времен жизни всех водородных связей, образованных между низкомолекулярными агентами и коллагеном за временной интервал 100 пикосекунд. Считалось, что между атомами образуется водородная связь, если выполняются следующие геометрические критерии: $R \leq 3.5 \text{ \AA}$ [33] и $\varphi \leq 30^\circ$, где R – расстояние между атомом «донора» А, ковалентно связанным с атомом водорода Н, и атомом «акцептора» В другой молекулы (или функциональной группы той же молекулы), а φ – угол, образованный связями АН и АВ. Пример такого взаимодействия приведен на рис.2.

На рис.3 показана зависимость между максимальным изменением объема молекулы коллагена и временем нахождения агентов в водородосвязанном состоянии для различных просветляющих агентов. Из рис. 3 видно, что с увеличением числа гидроксильных групп у рассмотренных просветляющих агентов время, проводимое ими в состоянии водородной связи, увеличивается, что приводит к соответствующим изменениям в структуре коллагена, что отражается в изменении его объема. Значение коэффициента корреляции между этими параметрами составляет 0.9. Следует

отметить, что полученные нами данные по временам связывания агентов с коллагеном хорошо согласуются с аналогичными данными, ранее полученными в работе [1] по программе CHARMM.

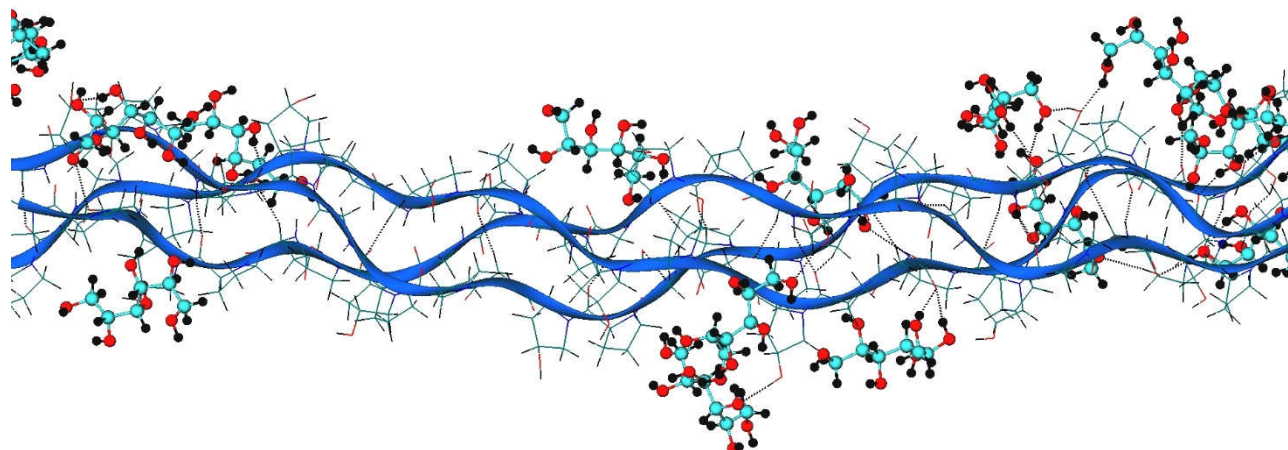


Рис.2. Пример взаимодействия пептида коллагена $((\text{GPH})_3)_{10}$ с молекулами сорбитола без учета водного окружения в рамках метода классической молекулярной динамики.

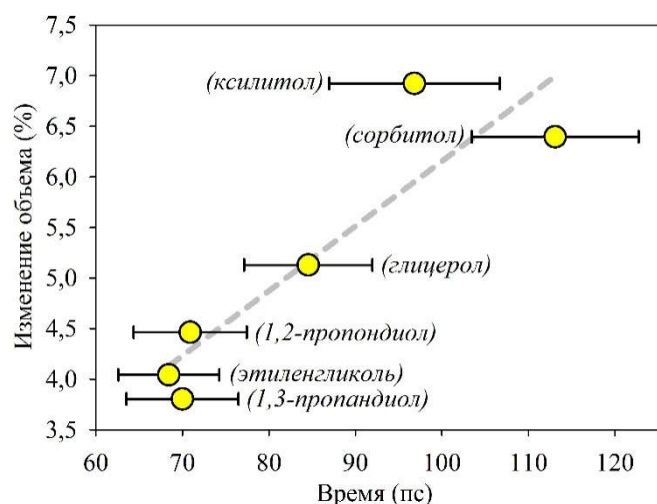


Рис.3. Зависимость между максимальным изменением объема молекулы коллагена и временем нахождения агентов в водородсвязанном состоянии для различных типов просветляющих агентов. Горизонтальными барами обозначен уровень стандартной ошибки полученных арифметических средних, пунктиром – линия регрессии.

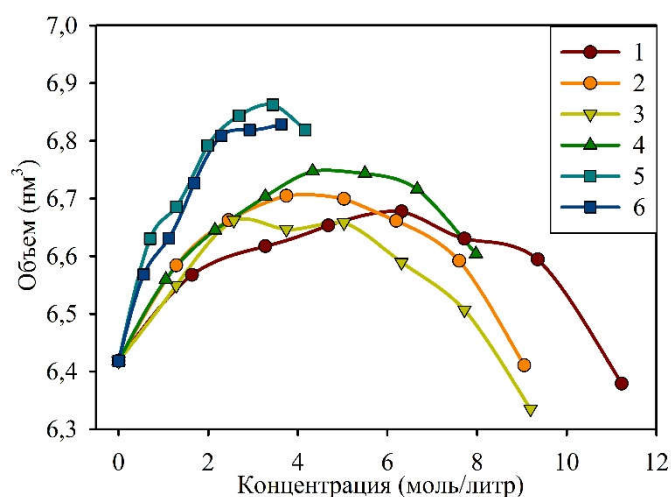


Рис. 4. Зависимость объема молекулы пептида коллагена в водном растворе от концентрации различных просветляющих агентов: этиленгликоля (1), 1,2-пропандиола (2), 1,3-пропандиола (3), глицерола (4), ксилитола (5) и сорбитола (6).

Далее исследовалась способность выбранных нами спиртов оказывать влияние на пространственную структуру модельного коллагена в водной среде, т.е. в состоянии близком к нативному. Влияние концентрации просветляющих агентов на объем молекулы коллагена, оцененный средствами пакета GROMACS [34], показано на рис.4.

Рассчитанное изменение объема пептида коллагена возможно только за счет изменения длин ковалентных связей его α – цепей, что может служить одним из параметров, характеризующим степень воздействия просветляющих агентов на его структуру. Из рис.4 видно, что зависимость объема молекулы коллагена от концентрации просветляющих агентов носит нелинейный характер. Практически для всех типов агентов максимальное влияние на геометрические параметры цепей коллагена приходится в область средних концентраций.

Также на этом этапе моделирования оценивалась относительная вероятность образования двойных водородных связей между молекулами спиртов и пептидом. Для этого были рассчитаны средствами пакета GROMACS радиальные функции распределения $g(r)$ атомов, участвующих в образовании водородных связей. Примеры полученных радиальных функций распределения для

молекул этиленгликоля и глицерола на фоне аналогичной функции распределения для коллагена представлены на рис. 5.

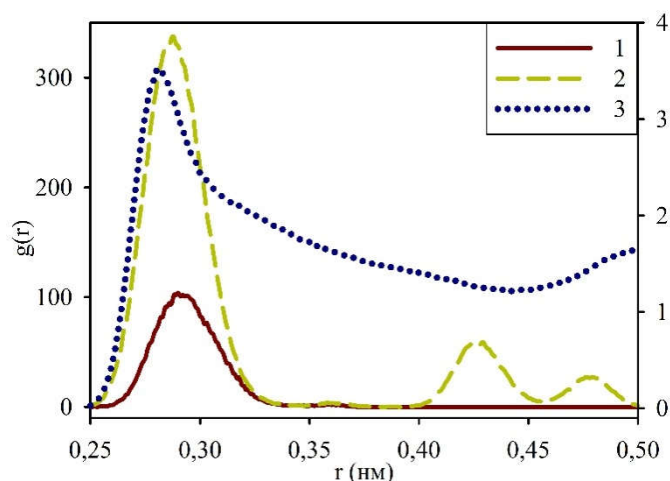


Рис. 5. Радиальные функции распределения атомов кислорода, участвующих в образовании водородных связей для молекул этиленгликоля (1), глицерола (2) и пептида коллагена (3) (шкала справа).

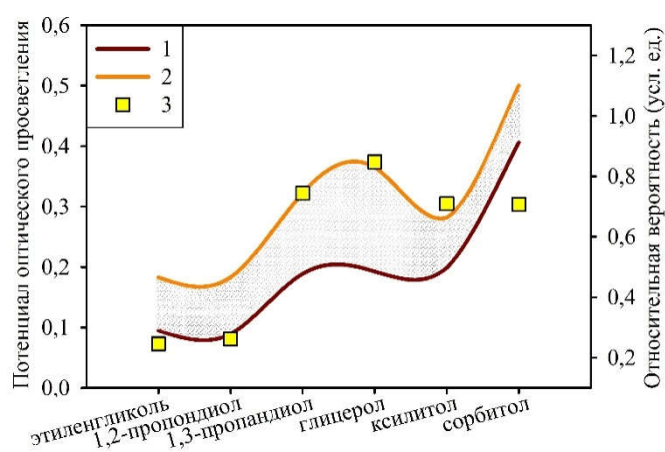


Рис. 6. Зависимость величины потенциала оптического просветления кожи крысы (1) и человека (2) [1], а также относительной вероятности (шкала справа) образования межмолекулярных двойных водородных связей молекулы пептида коллагена с молекулой просветляющего агента (3), от типа агента.

Т.к. эти функции являются мерой вероятности обнаружения одного атома на расстоянии r от заданного атома, то из полученных результатов (рис. 5) видно, что возможностей образования двойных водородных связей у молекулы глицерола (3 гидроксильные группы) намного выше, чем у молекулы этиленгликоля, у которой всего 2 таких группы. Произведение радиальной функции просветляющего агента на аналогичную функцию для молекулы пептида коллагена будет являться мерой того, что на заданном расстоянии друг от друга окажутся две пары атомов, способные к образованию водородной связи, т.е. мерой вероятности образования одновременно двух водородных связей. Полученные результаты представлены на рис. 6.

Из рис.6 видно, что эти значения вероятностей хорошо коррелируют со значениями потенциала оптического просветления (был введен в [1] как отношение приведенного коэффициента рассеяния после 45 мин действия агента к значению концентрации агента, выраженному в молях). Это объясняется тем, что для этих спиртов преобладающим является такое взаимодействие с коллагеном, при котором значительный вклад в энергию взаимодействия вносят относительно сильные двойные водородные связи. Исключением является молекула сорбитола, которая, как будет показано далее, образует много относительно сильных водородных связей с коллагеном и поэтому учет образования только парных водородных связей является недостаточным и не отражает правильную картину взаимодействия.

На третьем этапе моделирования рассчитывались энергии межмолекулярных взаимодействий просветляющих агентов с фрагментом миметического пептида коллагена – $((GPH)_3)_2$, пространственная структура которого показана на рис.7.

Как видно из рис.7 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. При взаимодействии коллагена с низкомолекулярными агентами происходит определенная пространственная подстройка молекулярного кармана для образования наибольшего числа возможных водородных связей. Так, например, при образовании комплекса с 1,2 – пропандиолом расстояние между атомами кислорода групп 1 и 4 уменьшается до 10.8 Å, а с сорбитолом до 9.3 Å. Так же меняется расстояние и между атомами кислорода карбонильных групп 2 и 3, от 3.8 Å в изолированной модели до 3.0 Å в комплексе с сорбитолом.

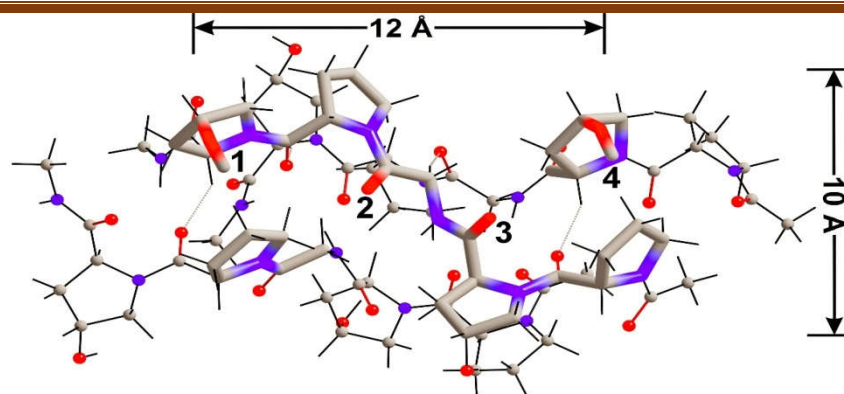


Рис.7. Пространственная структура фрагмента миметического пептида – $((GPH)_3)_2$, оптимизированная в рамках полуэмпирического метода РМ6. Цифрами обозначены молекулярные группы, участвующие в образовании водородных связей с просветляющими агентами. Пунктирными линиями на рисунке показаны водородные связи между различными α – цепями.

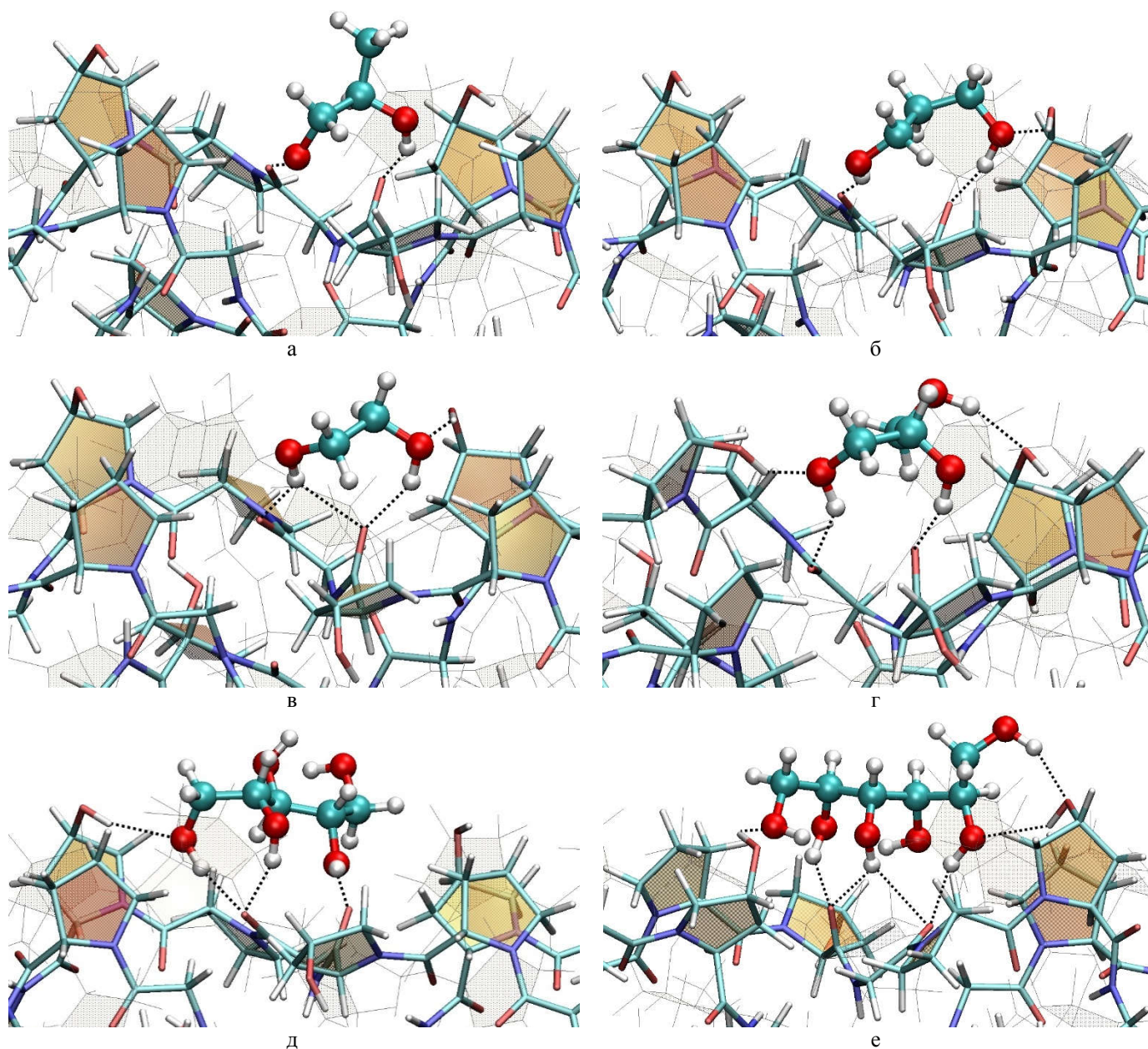


Рис.8. Строение рассчитанных методом РМ6 водородсвязанных комплексов, образованных фрагментом коллагена $((GPH)_3)_2$ и иммерсионными просветляющими агентами: 1,2 – пропандиол (а), 1,3 – пропандиол (б), этиленгликоль (в), глицерол (г), ксилитол (д) и сорбитол (е). Пунктирной линией показаны классические межмолекулярные водородные связи. Светлым контуром обозначено пространственное расположение пептидных цепей коллагена до взаимодействия с агентами.

На рис.8 показано полученное в рамках метода РМ6 пространственное строение водородосвязанных комплексов, образованных фрагментами коллагена ((GPH)₃)₂ и просветляющими агентами.

Как видно из рис. 8а, молекула 1,2 - пропандиола имеет наименьшее расстояние между спиртовыми группами из всех рассмотренных двухатомных спиртов, поэтому она образует две водородные связи только с атомами кислорода карбонильных групп. Вычисленное значение энергии такого межмолекулярного взаимодействия равно $\Delta E = -23.4$ кДж/моль. Для удобства обсуждения количественных параметров межмолекулярных взаимодействий в табл. 1 приведены значения длин классических водородных связей, образованных согласно расчету между активными группами молекулярного кармана коллагена и гидроксильными группами просветляющих агентов, а также вычисленные значения энергий межмолекулярных взаимодействий.

Таблица 1.

Длины водородных связей (в ангстремах), энергии межмолекулярных взаимодействий в (кДж/моль) между фрагмента коллагена (GPH)₃ и различными просветляющими агентами, рассчитанные методом РМ6/B3LYP/6-31G(d), а также экспериментальные значения потенциалов оптического просветления.

Тип агента	Молекулярные группы коллагена				ΔE	Потенциал оптического просветления [1]	
	(OH)1*	(CO)2	(CO)3	(OH)4		крыса	человек
1,2-пропандиол	-	1.86	1.79	-	-23.4	0.0892	0.1831
этиленгликоль	-	2.15	1.85	1.89	-37.7	0.0949	0.1826
1,3-пропандиол	-	1.89	1.75	1.97	-40.6	0.1887	0.3221
глицерол	1.92	1.91	1.74; 2.44	1.93	-42.8	0.1924	0.3649
ксилитол	2.16	1.80; 1.95	1.82	-	-48.8	0.1987	0.2818
сорбитол	1.85	1.9; 2.44	1.91; 1.75	1.86; 2.25	-80.1	0.4060	0.5001

*Прим.: Нумерация молекулярных групп соответствует таковой на рис.7.

Расстояния между спиртовыми группами молекул 1,3 – пропандиола и этиленгликоля уже достаточно, чтобы образовывать три и четыре водородные связи с коллагеном соответственно, третья связь образуется между протоном спиртовой группы остатка гидроксипролина и кислородом спиртовой группы агента, а четвертая связь в этиленгликоле между протоном другой спиртовой группы и кислородом карбонильной группы остатка гидроксипролина. Трехатомный спирт глицерол 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, поэтому энергия связывания возрастает незначительно (см. табл.1). Пятиатомный спирт ксилитол образует с коллагеном четыре водородные связи, но при этом задействованы только три активные группы кармана и две спиртовые группы ксилитола образуют внутримолекулярную водородную связь. Энергия такого взаимодействия оказывается немного больше, чем у глицерола, что хорошо коррелирует с данными по потенциалу оптического просветления [1]. Следует отметить, что изменение пространственной конформации ксилитола таким образом, чтобы задействовать все активные группы кармана (см. рис. 9а)), но без образования внутримолекулярной водородной связи приводит к повышению общей энергии комплекса и соответственно к уменьшению энергии взаимодействия. А вот длины шестиатомного спирта сорбитола уже достаточно для образования семи водородных связей, пять из которых относительно сильные, что положительно отражается на энергии взаимодействия. Это обстоятельство позволяет объяснить почти двукратное увеличение значения потенциала оптического просветления у сорбитола по сравнению с ксилитолом при небольшом различии в молекулярной структуре этих соединений.

При переходе от шестиатомного спирта сорбитола к моносахариду декстрозе значение потенциала оптического просветления несколько возрастает [1]. Это можно объяснить тем, что декстроза согласно расчета образует более сильные водородные связи с коллагеном, чем сорбитол. 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.9б более сильные водородные связи с карбонильными группами образуются, как за счет компактной кольцевой структуры декстрозы, которая позволяет ей достаточно низко опуститься в молекулярный карман коллагена, так и за счет хорошего взаимного расположения взаимодействующих групп.

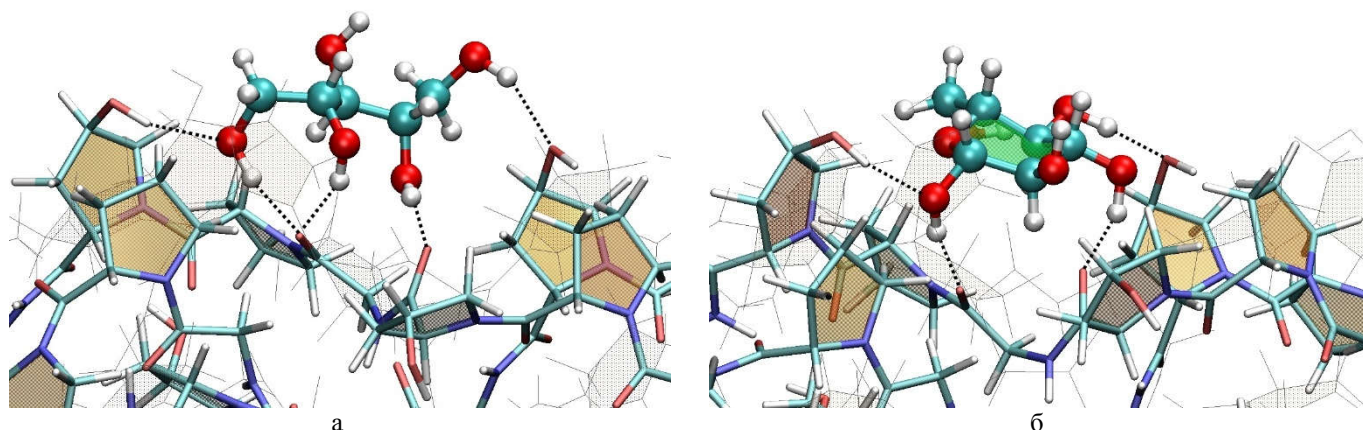


Рис.9. Строение высокоэнергетического межмолекулярного комплекса collagen-ксилитол (а) и строение комплекса collagen-декстроза (б). Пунктирной линией показаны классические межмолекулярные водородные связи. Светлым контуром обозначено пространственное расположение пептидных цепей коллагена до взаимодействия с агентами.

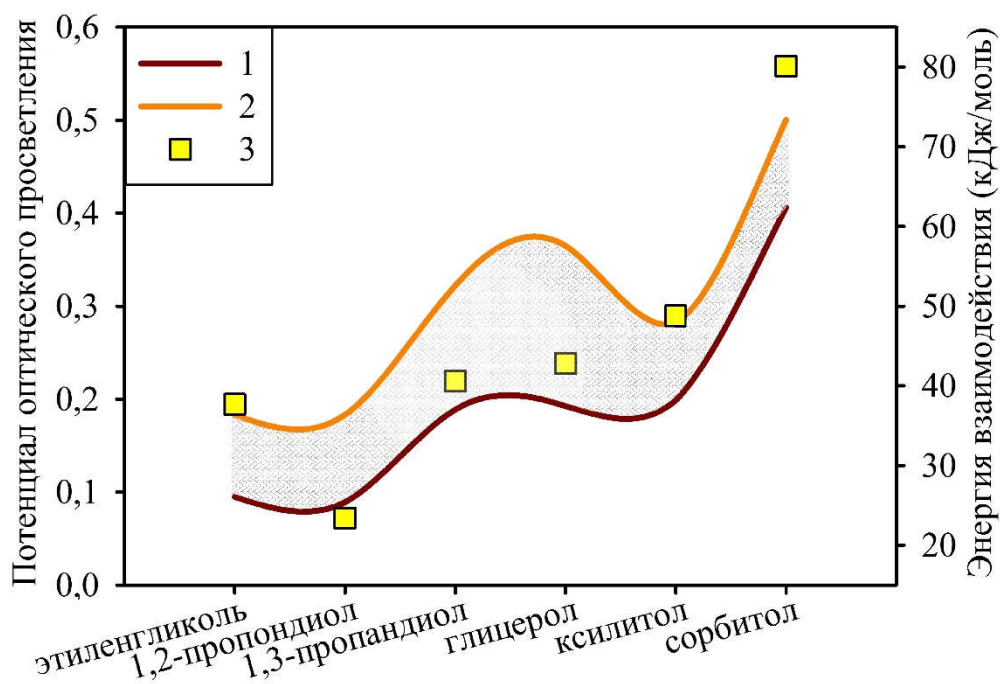


Рис.10. Зависимость величины потенциала оптического просветления кожи крысы (1) и человека (2) [1], а также энергии взаимодействия (шкала справа) молекулы пептида коллагена с молекулой просветляющего агента (3), от типа агента.

На рис.10 показаны зависимости величины потенциала оптического просветления кожи крысы и человека [1], а также рассчитанной методом PM6/B3LYP/6-31G энергии взаимодействия, от типа просветляющего агента. Видно, что все зависимости хорошо коррелируют между собой. Вычисленные значения коэффициентов корреляции составили 0.89 и 0.97 для кожи человека и крысы, соответственно. Такие высокие значения коэффициентов корреляции позволяют 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 средство просветляющего агента к коллагену, тем эффективнее идет этот процесс. Мы вычислили для кожи человека и крысы значения коэффициента численного соответствия между энергией межмолекулярного взаимодействия просветляющего агента с коллагеном и потенциалом оптического просветления, которые оказались равными 0.0069 и 0.0041 соответственно. Чтобы проверить предсказательные возможности установленной корреляции

мы дополнительно рассчитали энергию межмолекулярного взаимодействия молекулы декстрозы с выбранной моделью коллагена, которая оказалась равной – 94.5 кДж/моль. Предсказанное значение потенциала оптического просветления декстрозы для кожи крысы составило 0.388, что очень хорошо согласуется экспериментальными данными 0.387 [1].

Как следует из [1] значения потенциалов оптического просветления для ряда сахаров, таких как декстроза, фруктоза и сахароза не сильно отличаются друг от друга, разброс не превышает 15 %. Молекулярная структура дисахарида сахарозы с точки зрения встраивания в карман пептида формально должна быть более эффективной по сравнению с моносахаридами, так как дисахарид является более конформационно подвижной молекулой и имеет большее число активных гидроксильных групп. Однако значение потенциала оптического просветления для сахарозы даже немного меньше, чем у фруктозы и декстрозы. По результатам проведенного моделирования с декстрозой это можно объяснить следующим образом: структура упомянутых моносахаридов уже является достаточной для эффективного связывания с молекулярным карманом коллагена, дальнейшее увеличение молекулярного объема иммерсионного агента может оказывать дестабилизирующее влияние на силу связывания, не смотря на увеличение числа гидроксильных групп и повышение конформационной мобильности. Это объясняется тем, что стерические напряжения между протонами различных функциональных групп большего по размерам агента начинают мешать его эффективному взаимодействию с молекулярным карманом. Таким образом можно сделать вывод, что после достижения определенного структурного порога, увеличение числа гидроксильных групп агента за счет его размера, уже не дают преимущества при образовании комплексов с коллагеном. 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.

ВЫВОДЫ

В результате комплексного молекулярного моделирования взаимодействия шести иммерсионных просветляющих агентов с миметическим пептидом коллагена (GPH)₃ установлены корреляции между потенциалом оптического просветления и такими характеристиками, как энергия межмолекулярного взаимодействия просветляющих агентов с фрагментом пептида коллагена, их временем нахождения в водородосвязанном состоянии с коллагеном и относительная вероятность образования межмолекулярных двойных водородных связей.

Методами классической молекулярной динамики дана оценка влияния концентрации просветляющих агентов на структурные параметры коллагена, которая носит нелинейный характер и максимальна в области средних концентраций. Используя установленную корреляцию между потенциалом оптического просветления и энергией межмолекулярного взаимодействия, получены численные значения соответствия между этими величинами, которые оказались равными 0.0069 для кожи человека и 0.0041 для кожи крысы. На основании этих значений была предсказана величина потенциала оптического просветления молекулы декстрозы для кожи крысы, которая хорошо согласуется с экспериментальными данными.

На основании анализа структурных особенностей молекулярного кармана коллагена дано объяснение неизменности потенциала оптического просветления при переходе от моносахарида декстрозы к дисахариду сахарозе.

Предложен молекулярный механизм последиффузионного этапа оптического просветления биотканей который состоит в частичном замещении связанной с коллагеном воды на просветляющие агенты, что приводит к обратимому растворению коллагена и выравниванию его показателя преломления с межколлагеновой средой.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации “Ведущие научные школы” (НШ-7898.2016.2) и при финансовой поддержке в рамках государственных заданий высшим учебным заведениям и научным организациям в сфере научной деятельности, полученных от Минобрнауки.

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, Vol. 7(5), p. 732.
- Genina E.A., Bashkatov A.N., Sinichkin Yu.P. et al. // J. Biomed. Photonics & Eng., 2015, Vol. 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, Vol. 15 (1), p. 1-14.
- Genina E.A., Bashkatov A.N., Tuchin V.V. // Adv. Optical Technologies, 2008, Vol. 2008, Article ID 267867.
- Bashkatov A.N., Genina E.A., Tuchin V.V. et al. // Laser Physics, 2009, Vol. 19(6), p. 1312-1322.
- Wen X., Tuchin V.V., Luo Q. et al. // Phys. Med. Biol., 2009, Vol. 54(22), p. 6917-6930.
- Sudheendran N., Mohamed M., Ghosn M.G. et al. // J. Innovative Optical Health Sciences, 2010, Vol. 3(3), p. 169-176.
- Simonenko G.V., Kirillova E.S., Tuchin V.V. // Optical Memory & Neural Networks, 2009, Vol. 18(2), p. 12-15.
- Папаев А.В., Симоненко Г.В., Тучин В.В. // Оптический журнал, 2004, Т. 71, № 5, с. 3-6.
- Папаев А.В., Симоненко Г.В., Тучин В.В. // Оптический журнал, 2007, Т. 74, № 10, с. 36-40.
- Tuchina D.K., Shi R., Bashkatov A.N. et al. // J. Biophotonics, 2015, Vol. 8(4), p. 332-346.
- Wen X., Mao Z., Han Z. et al. // J. Biophotonics, 2010, Vol. 3(1-2), p. 44-52.
- Hirshburg J.M., Ravikumar K.M., Hwang W. et al. // J. Biomed. Opt., 2010, Vol. 15(5), p. 055002.
- Feng W., Shi R., Ma N. et al. // J. Biomed. Opt., 2016, Vol. 21(8), p. 081207.
- Yu T., Wen X., Tuchin V.V. et al. // J. Biomed. Opt., 2011, Vol. 16(9), p. 095002.
- Okuyama K., Miyama K., Mizuno K. et al. // Biopolymers, 2012, Vol. 97(8), p. 607-616.
- Cornell W.D., Cieplak P., Bayly C.I. et al. // J. Am. Chem. Soc., 1995, Vol. 117(19), p. 5179-5197.
- Becke A.D. // J. Chem. Phys., 1993, Vol. 98(7), p. 5648-5652.
- Lee C., Yang W., Parr R.G. // Phys. Rev., 1988, Vol. 37B(2), p. 785-789.
- Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B. et al. Gaussian09, Revision A.02. Pittsburgh PA: Gaussian, Inc., 2009.
- van der Spoel D., Lindahl E., Hess B. et al. // J. Comput. Chem., 2005, Vol. 26(16), p. 1701-1718.
- Duan Y., Wu C., Chowdhury Sh. et al. // J. Comp. Chem., 2003, Vol. 24(16), p. 1999-2012.
- Berendsen H.J.C., Postma J.P.M., van Gunsteren W.F. et al. // J. of Chem. Phys., 1984, Vol. 81(8), p. 3684-3690.
- Humphrey W., Dalke A., Schulten K. // J. Mol. Graph., 1996, Vol. 14(1), p. 33-38.
- Berendsen H.J.C., Grigera J.R., Straatsma T.P. // J. Phys. Chem., 1987, Vol. 91(24), p. 6269-6271.
- Stewart J.J.P. // J. Mol. Model., 2007, Vol. 13(12), p. 1173-1213.
- Trott O., Olson A.J. // J. Comp. Chem., 2010, Vol. 31(2), p. 455-461.
- Loof H.D., Nilsson L., Rigler R. // J. Am. Chem. Soc., 1992, Vol. 114(11), p. 4028-4035.
- Bondi A. // J. Phys. Chem., 1964, Vol. 68(3), p. 441-451.

ДИНАМИКА ИЗМЕНЕНИЯ ОПТИЧЕСКИХ И ФИЗИОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОЖИ ЧЕЛОВЕКА *IN VIVO* В УСЛОВИЯХ ВНЕШНЕЙ МЕХАНИЧЕСКОЙ КОМПРЕССИИ

О.А. Зюрюкина, Ю.П. Синичкин

Саратовский государственный университет,

Томский государственный исследовательский университет

Определены времена изменения поглощающих и рассеивающих свойств биоткани в условиях компрессии

ВВЕДЕНИЕ

Внешняя механическая компрессия является основой компрессионного метода управления оптическими свойствами биоткани. Компрессия биотканей способствует частичному или полному выдавливанию из области компрессии крови и воды, а также увеличению плотности ткани в области компрессии, что дает возможность целенаправленно изменять поглощающие и рассеивающие свойства биотканей [1-8]. Компрессионный метод управления оптическими параметрами потенциально имеет ряд преимуществ по сравнению с иммерсионным методом, так как механическое сжатие биоткани является менее инвазивным и безопасным, в отличие от химического метода сохраняются барьерные функции рогового слоя и всего эпидермиса в целом. Процесс изменения оптических свойств биотканей при наложении компрессии носит инерционный характер

[6-8]. Исследование кинетики спектров диффузного отражения подверженных компрессии тканей позволяет оценивать не только скорости релаксации оптических свойств биотканей, но и кинетику физиологических процессов объемах ткани в условиях наложения внешней механической компрессии.

В работе определены времена изменения поглощающих и рассеивающих свойств биоткани в условиях компрессии, определяющих поведение коэффициентов отражения биоткани в видимом и ближнем ИК диапазонах спектра.

ЭКСПЕРИМЕНТ

Экспериментальная установка включала в себя осветительное устройство HL-2000 (Ocean Optics, США), волоконно-оптические датчики и два волоконно-оптических спектрометра USB4000 (Ocean Optics, США) (область регистрации спектров 400-1000 нм) и NIRQuest512-2.2 (Ocean Optics, США) (область регистрации спектров 900-2200 нм), сопряженных с персональными компьютерами, обеспечивала регистрацию спектров диффузно отраженного кожей света в диапазоне от 400 до 2200 нм. Измерения спектров диффузного отражения биотканей проводились с помощью устройств на основе волоконно-оптических датчиков фирмы Ocean Optics (R400-7-VIS/NIR и R600-7-VIS-125F), позволяющих создавать давление на разной площади поверхности тканей (диаметром 3.2 мм, 6.3 мм, 10 мм, 13.6 мм, 15.8 мм и 30 мм) величиной до 200 кПа.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА

На рисунках 1 приведены спектры отражения кожи человека *in vivo* в нормальных условиях и в условиях компрессии в разных спектральных диапазонах.

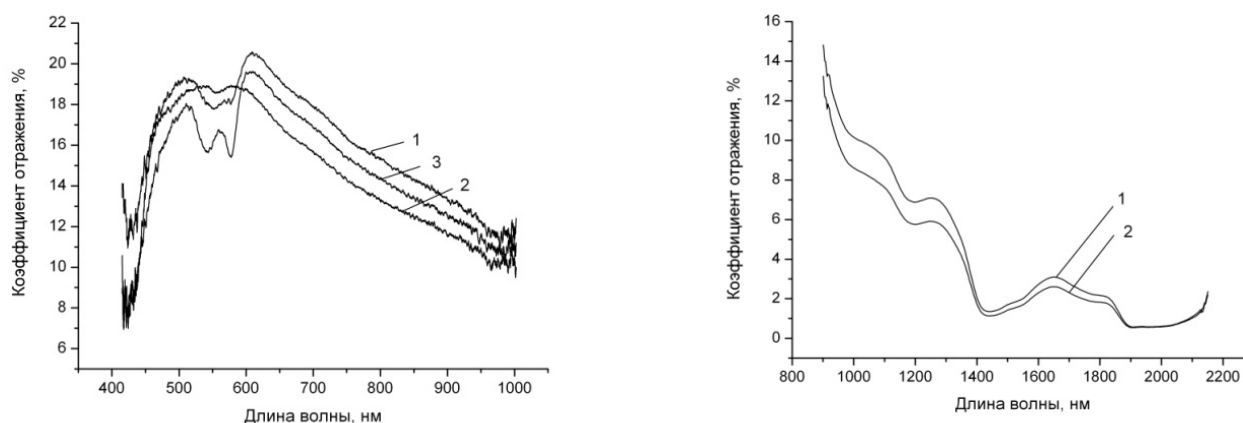


Рис. 1. Спектры диффузного отражения кожи человека *in vivo* в норме (1), при наложенной компрессии (2) и после ее снятия (3). $p = 110$ кПа

В формировании спектров диффузного отражения кожи человека *in vivo* в видимом и ближнем инфракрасном диапазонах существенный вклад вносят гемоглобин и вода, изменение содержания которых в коже в результате наложения внешней компрессии отчетливо проявляется в спектрах отражения как результат изменения ее поглощающих и рассеивающих свойств.

Содержание воды в биологической ткани определяет рассеивающие свойства ткани. Изменение рассеивающих свойств может быть объяснено тем, что наложение компрессии приводит к частичной дегидратации и сжатию коллагеновых волокон тканей, что приводит к изменению фактора упаковки рассеивателей ϕ (рис. 2) [9]. Поскольку для фиброзных тканей значение ϕ обычно составляет порядка 0,3, то увеличение объемной доли рассеивателей (коллагеновых волокон) приводит к уменьшению рассеяния ткани.

Изменение поглощающих свойств объясняется вытеснением из объема ткани, подверженного компрессии, жидких хромофоров, формирующих спектр. В видимой области спектра такими хромофорами являются гемоглобин крови, в ближней ИК-области – вода.

Уменьшение рассеяния приводит к уменьшению коэффициента отражения во всем диапазоне спектра, а уменьшение поглощающих свойств - к увеличению отражения образца.

Несомненный интерес представляет кинетика изменения коэффициентов отражения кожи после наложения внешней компрессии. Процесс изменения коэффициентов отражения носит явно выраженный двухэкспоненциальный характер, при этом изменения в спектрах отражения вначале

происходят достаточно быстро (время t_1), затем изменения в спектрах становятся существенно более медленными (время t_2).

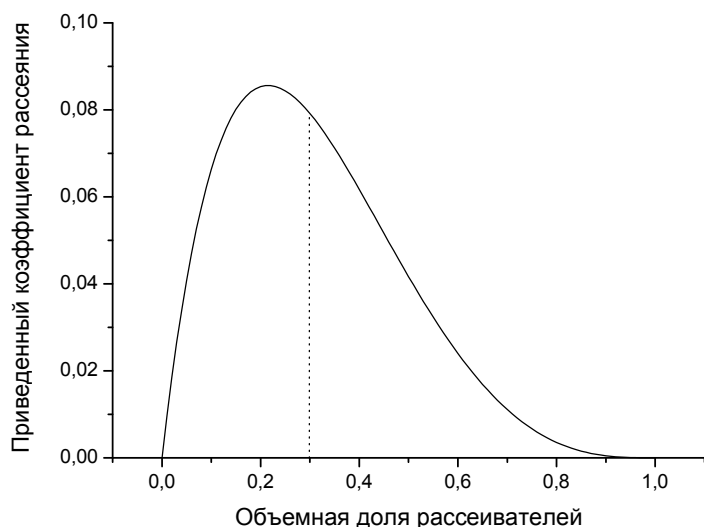


Рис. 2. Зависимость коэффициента рассеяния от объемной доли рассеивателей (предполагается, что радиус коллагеновых волокон и сечение рассеяния постоянны) [9]

В качестве примера на рис. 3 - 4 представлена кинетика коэффициентов отражения кожи человека *in vivo* на разных длинах волн при наложении на кожу внешней механической компрессии разной величины (датчик диаметром 13,6 мм).

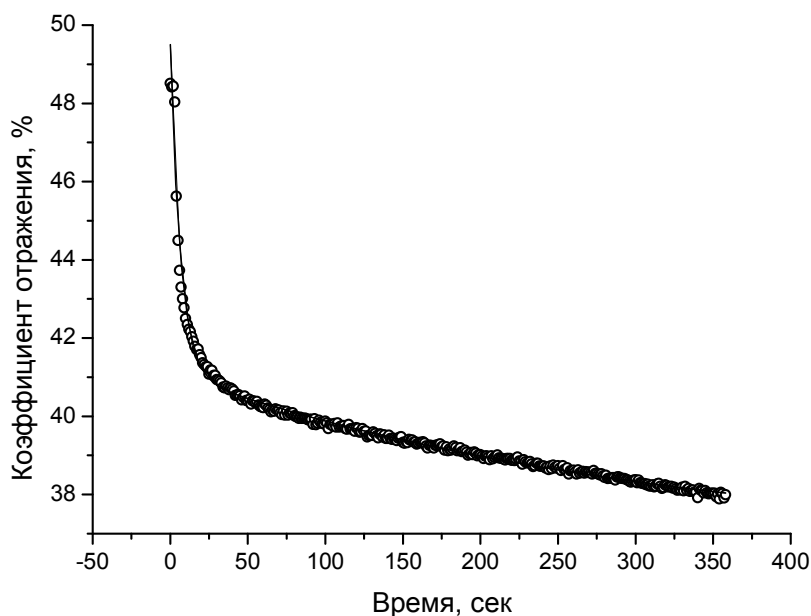


Рис. 3. Кинетика коэффициента отражения кожи человека *in vivo* на длине волны 700 нм (давление 200 кПа).
Времена релаксации $t_1 = 4,9$ сек,
 $t_2 = 140$ сек

На рис. 5 приведены времена релаксации коэффициентов отражения кожи, усредненные по разным областям приложения компрессии (6,3, 13,6 и 15,8 мм). Как видно из рисунков, времена t_1 составляют величины порядка 3 – 6 секунд, а t_2 – 1,5 – 5,0 минут.

На скорости процессов стабилизации спектров оказывают влияние величина и область прикладываемой внешней компрессии. Увеличение компрессии приводит к уменьшению времен релаксации t_1 и t_2 (рис. 6), а уменьшение области компрессии приводит к уменьшению времени стабилизации.

Двухэкспоненциальный характер кинетики коэффициентов отражения кожи *in vivo* во всем диапазоне спектра 400-2000 нм представляет собой интересный результат. Поскольку водный транспорт является важным механизмом оптического просветления биоткани, то можно

предположить, что такой характер кинетики может быть обусловлен наличием внутри кожи двух форм воды.

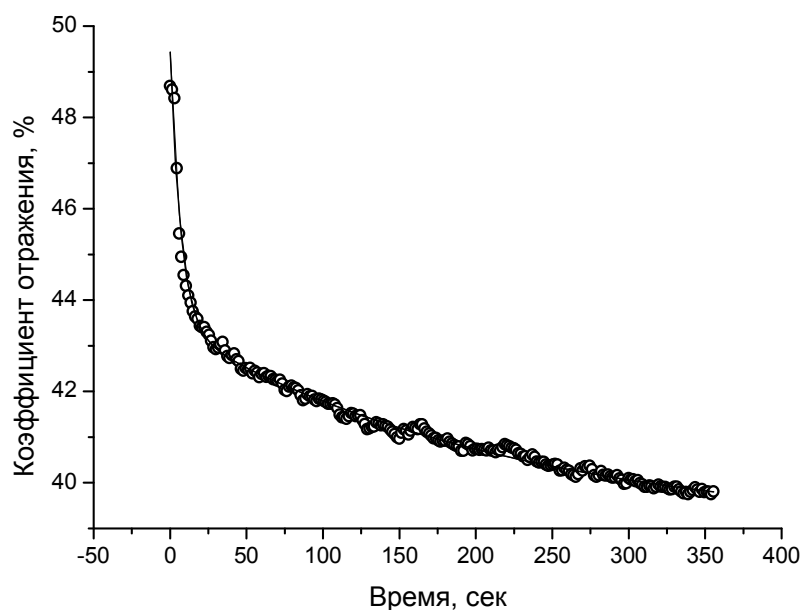


Рис. 4. Кинетика коэффициента отражения кожи человека *in vivo* на длине волны 1070 нм (давление 20 кПа).
Времена релаксации $t_1 = 7$ сек,
 $t_2 = 310$ сек

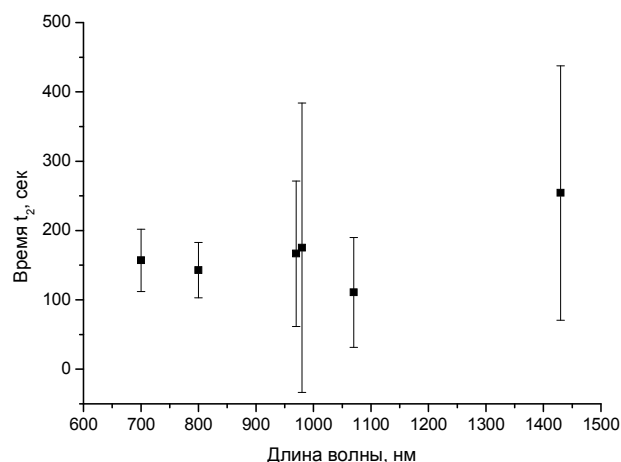
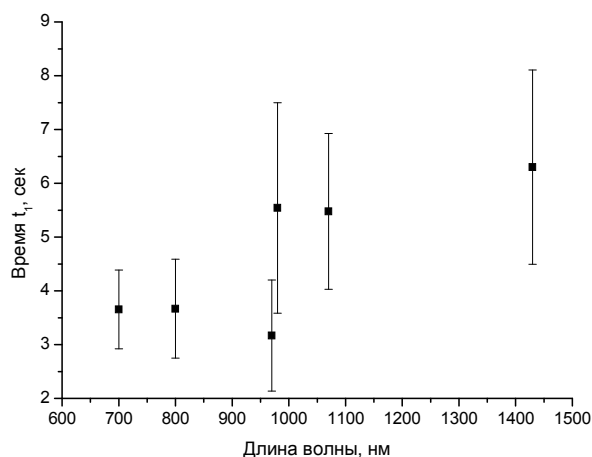


Рис. 5. Времена релаксации коэффициентов отражения кожи для разных длин волн. $p = 200$ кПа

Согласно двухфазной модели кожной ткани [10], кожу можно представить как эластичную твердую матрицу, образованную главным образом из эластичных коллагеновых волокон, заполненную межклеточной жидкостью, основную массу которой составляет вода. Вода внутри кожи делится на две группы: основную (свободную) воды и связанную воду. Они обладают различными механическими и спектральными свойствами, при этом основная вода может легко транспортироваться внутри кожи, в то время как связанная вода очень плотно аффилирована и трудно отделяется от твердой матрицы.

На ранних стадиях деформации ткани из-за большого напряжения внутри ткани из области компрессии с высокой скоростью выходит основная вода. Видимо, эту скорость и определяют времена t_1 .

В случае долговременной компрессии количество связанной воды внутри биоткани начинает уменьшаться, при этом объем суммарной воды меняется относительно мало, поскольку связанная вода непрерывно переходит в свободную для обеспечения нормального метаболизма *in vivo* ткани [11], при этом скорость уменьшения ее количества определяется временем t_2

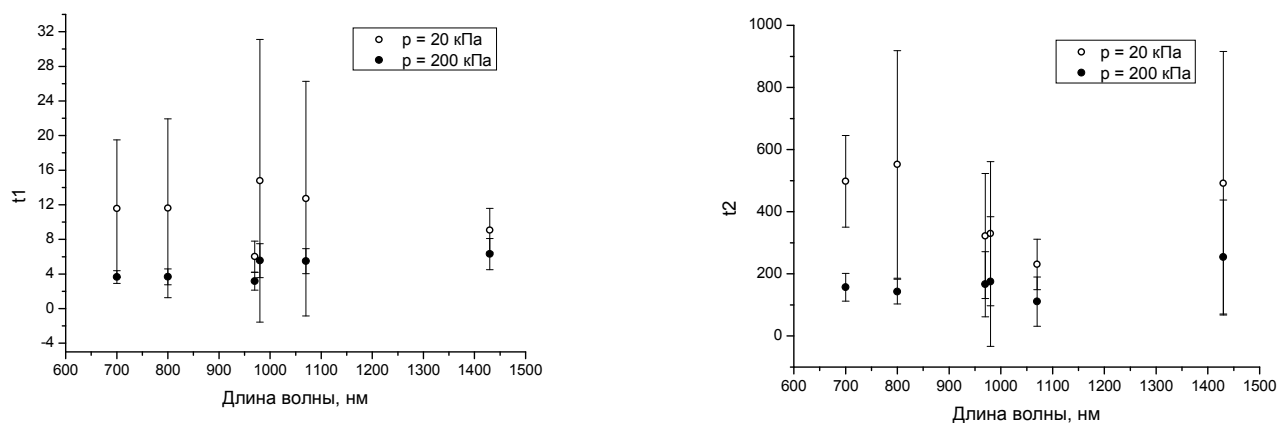


Рис. 6. Влияние величины компрессии на времена релаксации коэффициентов отражения

Литература

1. Chen W, Liu R., Xu K. et al. // J. Phys. D: Appl. Phys. 2005, Vol. 38, p. 2691–2695.
2. Reif R., Amoroso M.S., Calabro K.W. et al. // J. Biomed. Opt. 2008, Vol. 13(1), p. 010502.
3. Ti Y. and Lin W.C. // Opt. Express. 2008, Vol. 16(6), p. 4250–4262.
4. Delgado Atencio J.A., Orozco Guillén E.E., Vázquez Montiel S. et al. // Optical Memory & Neural Networks (Information Optics). 2009, Vol. 18, No. 1, p. 6–14.
5. Lim L., Nichols B., Rajaram N. et al. // Journal of Biomedical Optics 2011, Vol. 16(1), p. 011012-1-9.
6. Ruderman S., Gomes A.J., Stoyneva V. et al. // Biomedical Optics Express 2010, Vol. 1, No. 2, p. 489-499.
7. Нахаева И.А., Мохаммед М.Р., Зюрюкина О.А. и др. // Оптика и спектроскопия 2014, Т. 117, № 3, с. 522-528.
8. Нахаева И.А., Зюрюкина О.А., Мохаммед М.Р. и др. // Оптика и спектроскопия 2015, Т. 118, № 5, с. 152–159.
9. Schmitt J.M., Kumar G. // Appl. Opt. 1998, Vol. 37, No. 13, p. 2788-2797.
10. Oomens C.W.J., Vancampen D.H., Grootenboer H.J. // J. Biomech. 1987, Vol. 20(9), p. 877-885.
11. Li C., Jiang J., Xu K. // J. Innov. Opt. Health Sci. 2013, Vol. 6(1), 1350005 (9 pages).

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

В.А. Дубровский, К.Н. Дворецкий, С.В. Марков

Саратовский государственный медицинский университет

С помощью цифровой видеотехники исследуется процесс седиментации эритроцитов донорской крови при больших степенях ее разведения. Выявлено значительное отличие в поведении скорости седиментации сильно разбавленных образцов крови по сравнению с результатами известных аналогичных исследований для цельной или слабо разбавленных образцов. Построена теоретическая модель оседания эритроцитов в физиологическом растворе. Особенность модели заключается в том, что предложено рассматривать оседание клеток в виде коллективного эффекта, а не в традиционной форме оседания индивидуальных, взаимодействующих друг с другом частиц. При этом оседающий слой крови рассматривается как пористый диск, причем количество пор и их размеры зависят от степени разведения исходного образца крови. Показано, что данная модель при использовании некоторых эмпирических констант дает удовлетворительное совпадение с экспериментальными закономерностями. Проведенное исследование представляется полезным для понимания процесса седиментации эритроцитов, 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 Вестергрен предложил способ измерения скорости оседания эритроцитов в цельной крови в вертикально установленной узкой трубке [2]. С тех пор и 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, не полному использованию потенциальных возможностей этого метода диагностики [4]. По нашему мнению, изучение диагностического метода СОЭ и явления седиментации крови в целом ведутся в следующих направлениях (приведены некоторые из литературных ссылок):

- 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 [4,13-15,18-22].

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 и которые не противоречили бы предложенной ниже модели седиментации крови.

Наиболее упрощенным является анализ индивидуального осаждения эритроцитов (RBC – red blood cell) в представлении клеток в форме шара, такой подход основан на использовании закона Стокса [23]:

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

где r , v , η – соответственно радиус шара, скорость его движения в жидкости и ее коэффициент вязкости. Формулу (1) принято именовать как формулу Стокса, а силу трения F_{mp} – как силу Стокса F_s . Радиус шара r , эквивалентного эритроциту радиусом, обычно определяют двояко:

- а) либо объем шара приравнивают к известному среднему объему эритроцита радиусом r_{RBC} ;
- б) либо по формуле $r = 0.71 r_{RBC}$, которая учитывает пространственную ориентацию оседающего эритроцита [24, 25].

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

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

где $\rho_{ш}$ и $\rho_{ж}$ – 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 [26]; в случае одиночного эритроцита этим влиянием можно пренебречь, т.к. $r \ll R$.

Однако, в цельной крови эритроциты расположены чрезвычайно близко друг к другу – расстояние между эритроцитами меньше размеров самих эритроцитов. Это приводит к необходимости учитывать влияние соседних эритроцитов на процесс седиментации анализируемой клетки [18,24]. 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 [4,10,12-14,18,20,22,24,27]. Описание седиментации агрегатов эритроцитов возможно на тех же принципах, что и оседание одиночных эритроцитов (формулы 1,2). Однако, в отличие от близких по размерам одиночных эритроцитов, эритроцитарные агрегаты имеют разные размеры, а, следовательно,

необходимо вводить распределение агрегатов по размерам (эквивалентных шаров по диаметрам) [24]. 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 [24]. Однако, авторы [24] 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 агрегации эритроцитов, существует иной механизм оседания крови, основанный на «сетевой» модели строения образцов крови – модели Балаховского [28]. 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, встречный поток может проходить 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 [15,29-31] 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, косвенно. Подобные потоки реализуются и в модели структуры крови Балаховского. 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 [32-35]. В этих работах степень разведения крови в физрастворе составляла величину порядка 1:100 и даже больше (до 1:600). В [15] зависимость смещения границы «плазма-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 [32-35]? Будет ли СОЭ продолжать снижаться с увеличением степени разведения крови?

В целом, можно утверждать, что все известные математические модели оседания эритроцитов и их ассоциатов основаны на принципах микроскопии. Действительно, анализ движения одиночного эритроцита или агрегата с использованием закона Стокса с учетом или без учета окружающих клеток, ассоциатов или возможное моделирование движения сетей Балаховского С.Д. – все это относится к задачам микроскопии. Отсюда сложность решения подобных задач. Цель настоящей работы – попытаться построить макроскопическую модель седиментации крови, которая объясняла бы некоторые их наблюдаемых эффектов и хотя бы не противоречила другим. В экспериментальном отношении целью работы является поиск зависимости скорости седиментации крови от степени ее разведения до уровней, используемых в [32-35]. Кроме того, эксперимент может выявить те эмпирические константы, которые, как правило, необходимы для построения или проверки теоретической модели.

ОБЪЕКТ ИССЛЕДОВАНИЯ, ТЕХНИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

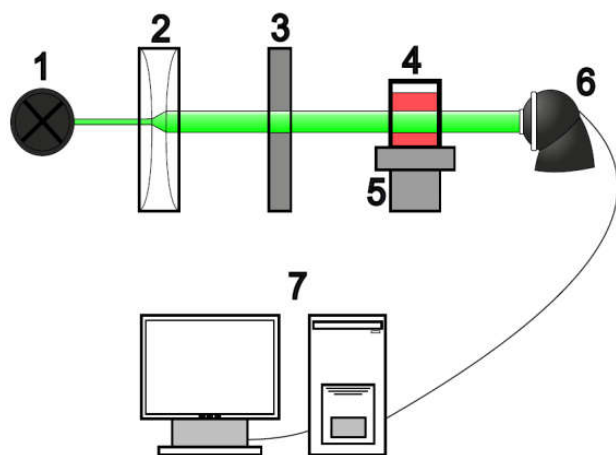


Рис. 1. Схема экспериментальной установки: 1- источник света (светодиод); 2- телескопическая система линз; 3- светофильтр; 4- кювета с исследуемым раствором; 5 - крепление для кюветы; 6- цифровая камера; 7- компьютер.

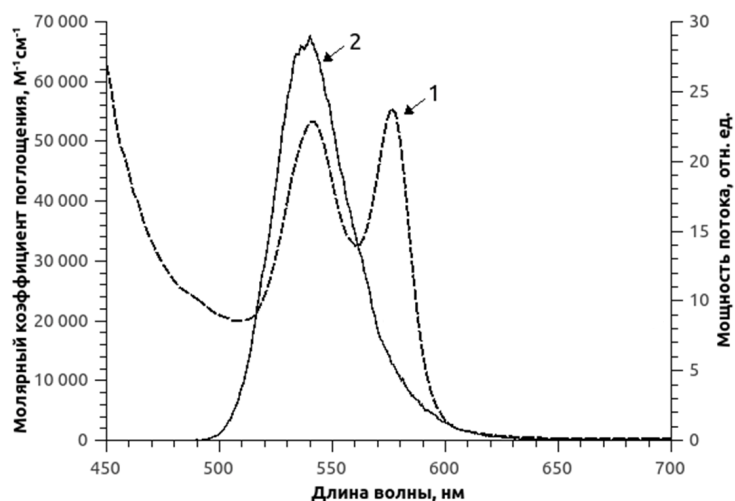


Рис. 2. Спектры: 1 – поглощения гемоглобина (левая ось ординат); 2 – излучения светодиода (правая ось ординат).

Эксперименты проводились на установке, изображенной на рис.1. Размеры внутренней полости прямоугольной кюветы 10x10x45мм. Степень разведения эритроцитарной массы донорской крови физраствором варьировалась: 1:5, 1:10, 1:20, 1:40, 1:80, 1:100, 1:200, 1:400. Каждому уровню разведения крови соответствовала серия из 4-х экспериментов, так что общее количество опытов составляло 32. Увеличить число экспериментов было затруднительно, т.к. они выполнялись часами, а серия из 32 опытов проводилась с одним конкретным образцом крови одного донора. В отличие от [15], где в цельную кровь добавлялся физраствор, здесь - наоборот: в физраствор добавлялась небольшая порция донорской крови (эритроцитарной массы), а затем взвесь перемешивалась с помощью микродозатора. Естественно, вначале в течение 20-30 мин взвесь находилась в турбулентном состоянии и лишь затем происходило равномерное оседание крови. Длительность каждого эксперимента была различной (около 2 часов) в зависимости от степени разведения крови.

Биообъект зондировался коллимированным излучением светодиода типа LXHL-G1S, спектр которого соответствовал спектру поглощения гемоглобина в зеленой области (рис. 2). Режим питания светодиода типа LXHL-G1S: напряжение 3 В, сила тока 0.3 А. Подбор спектра зондирующего светового излучения был продиктован необходимостью повышения контрастности фотоизображения границы «плазма-эритроцитарная масса», что способствует повышению точности регистрации седиментации крови.

После прохождения сквозь образец, зондирующий луч попадал на полихромную web-камеру Logitech QuickCam. Полученные цифровые фотокадры (файлы) подвергались разложению на RGB компоненты, причем анализировалась лишь G (зеленая) составляющая. Выбор G компоненты фотоизображения сопряжен со спектром поглощения света гемоглобином в зеленой области и, естественно, со спектром зондирующего излучения светодиода (рис. 2).

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СЕДИМЕНТАЦИИ ЭРИТРОЦИТОВ

Пример оседания крови демонстрируется на рис.3. Граница «плазма-эритроцитарная масса» не всегда располагалась строго горизонтально, поэтому ее уровень определялся путем усреднения ее координат в пределах определенной зоны шириной W по центральной вертикальной оси кюветы.

Фотоизображения, подобные рис.3, 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 яркости B_{cp} кюветы с раствором донорской крови от координаты Y (рис.4.) в различные моменты времени в процессе седиментации эритроцитов. Положение резкого спада (знак А) величины средней яркости B_{cp} соответствует координате Y уровня границы «плазма-эритроцитарная масса» в данный момент времени.

Для каждого момента времени скорость оседания эритроцитов определялась как $\Delta Y/\Delta t$. На рис. 5 представлены зависимости величин ΔY от времени наблюдения процесса седиментации эритроцитов для различных степеней разведения крови. Некоторая хаотичность в поведении кривых на рис. 5 при малых временах наблюдения (20-30 мин., слева относительно прямой A) обусловлена турбулентностью движения эритроцитов как следствие перемешивания крови в физрастворе. Однако, в дальнейшем (при больших временах) зависимость $Y(t)$ практически носит линейный характер, следовательно, граница «плазма-эритроцитарная масса» движется с постоянной скоростью. Важно отметить, что с ростом степени разведения крови возрастает тангенс угла наклона прямых, а, следовательно, величина СОЭ. Представляет интерес сопоставление полученной зависимости $\nu(C)$ для больших разведений крови с подобной кривой для сравнительно малых разведений, построенной на основании результатов [15].

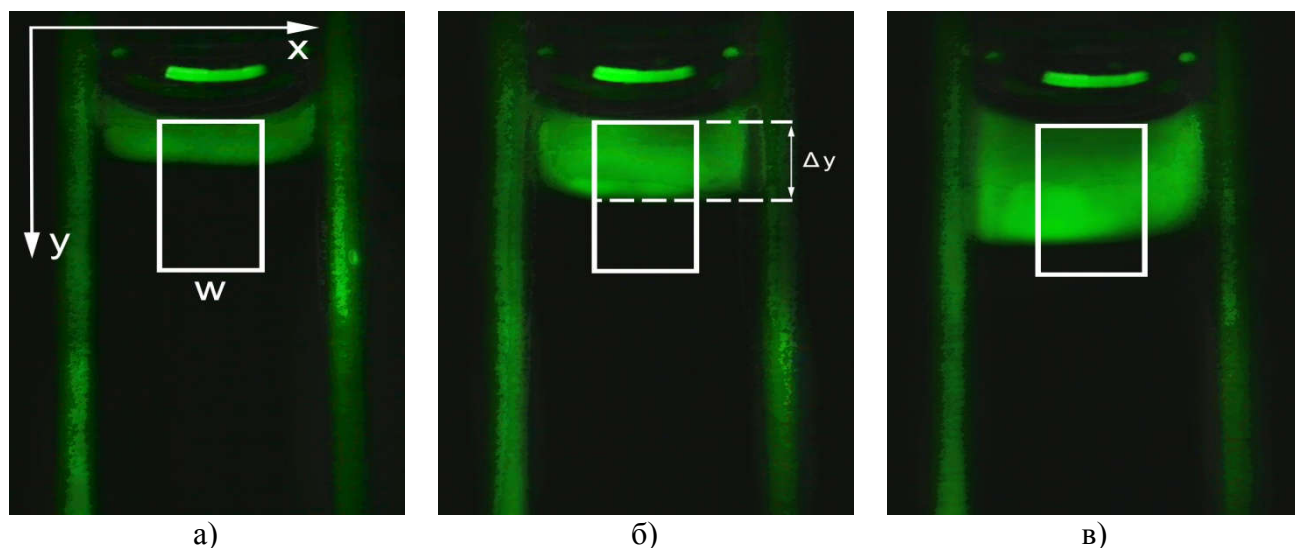


Рис. 3. Фото процесса седиментации эритроцитов в кювете в разные моменты времени: степень разведения эритроцитов во взвеси – 1:100. Прямоугольная рамка W – область обработки фотоизображения для нахождения границы «плазма-эритроцитарная масса». Величина ΔY – смещение границы «плазма - эритроцитарная масса» к данному моменту времени.

Из рис.6 видно, что для больших разведений крови (рис.6а) в отличие от малых (рис.6б) скорость седиментации крови возрастает с уменьшением концентрации эритроцитов, что соответствует рис.5. При этом интересно отметить, что скорость седиментации эритроцитов стремится к значениям скорости седиментации одиночных эритроцитов. С другой стороны, представляет интерес найденное в [15] увеличение СОЭ при переходе от концентрации эритроцитов 50% к концентрации 33% (рис.6б). Заметим, что количественное сопоставление результатов представленных на рис.6а и 6б не 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 – СОЭ принимает минимальные значения в диапазоне концентраций эритроцитов во взвесах $\sim 10 - 50\%$ и повышается при больших разведениях крови или при приближении взвеси к состоянию цельной крови.

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЛЕКТИВНОГО ДВИЖЕНИЯ ЭРИТРОЦИТОВ ПРИ ИХ СЕДИМЕНТАЦИИ

В основу модели положим принцип коллективной седиментации эритроцитов (в отсутствии процесса агрегации). Выделим на поверхности цилиндрического столба жидкости некоторый узкий диск высотой h и площадью его поверхности $S=\pi R^2$ (R – радиус цилиндра, $h \ll R$), содержащий множество эритроцитов. Авторы осознают некоторую некорректность: кювета в эксперименте была прямоугольной, а в модели процесса седиментации эритроцитов принимается цилиндрическая кювета. Это обусловлено тем, что экспериментальное исследование седиментации крови используемым фотометрическим методом затруднительно – цилиндр будет представлять собою линзу, что приведет к искажению цифровых фотоизображений.

Полагаем, что все эритроциты слоя h движутся вдоль оси Y (вертикально вниз) с одной скоростью, равной скорости слоя ν . Отметим, что диск является не сплошным, пористым, т.к.

существует межклеточное расстояние l . При оценке плотности такого диска ρ_d следует учитывать не только плотность эритроцита $\rho_{\text{эп}}$ и их количество n , но и плотность $\rho_{\text{ф}}$, и количество физраствора, входящего в поры диска с общим объемом диска $V = \pi R^2 h$:

$$\rho_d = \rho_{\text{ф}} + n4r^3(\rho_{\text{эп}} - \rho_{\text{ф}})/3hR^2, \quad (3)$$

где r – радиус эквивалентного «сферического» эритроцита ($r \approx 2.75$ мкм).

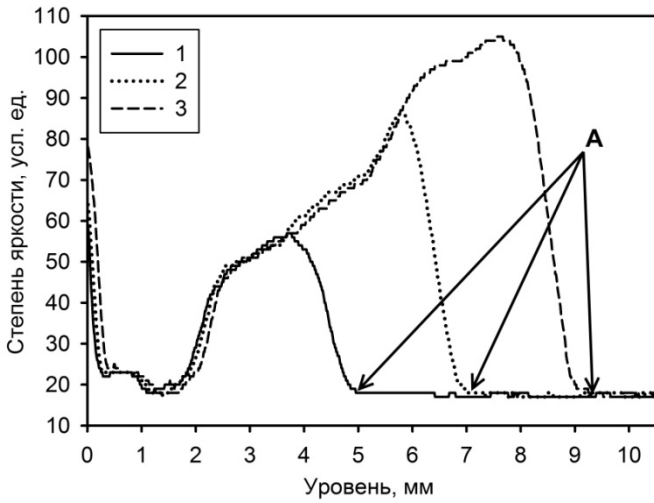


Рис.4. Зависимость средней яркости фотоизображения по пикселям строки вдоль оси X от координаты строки по оси Y (рис.3). Кривые 1, 2, 3 соответствуют уровням седиментации крови, изображенным на рис. 3 (а, б, в). Знак А - резкий спад средней яркости, соответствует границе «плазма-эритроцитарная масса» для данного момента времени.

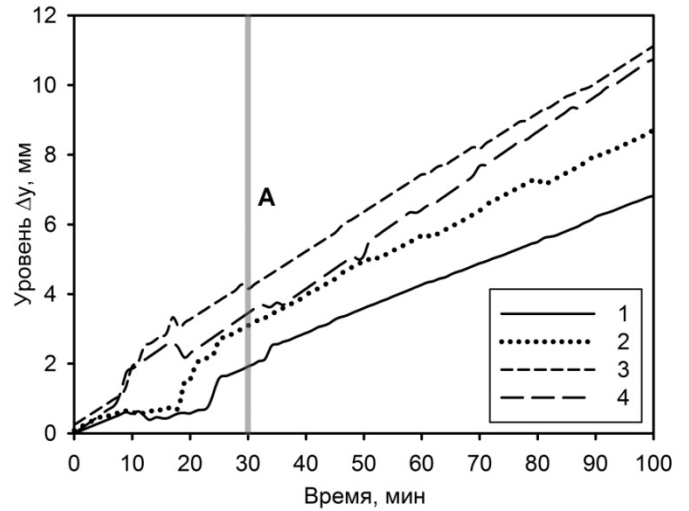
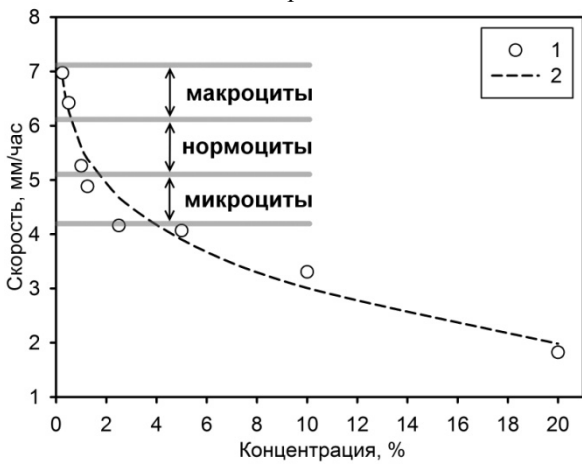
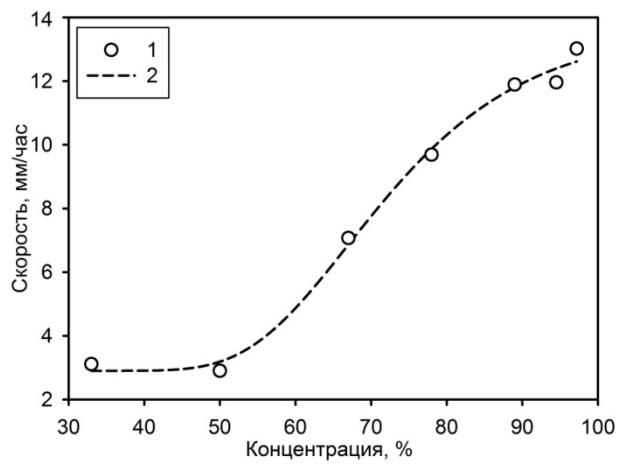


Рис.5. Зависимость смещения (седиментации) уровня границы «плазма- эритроцитарная масса» ΔY от времени наблюдения седиментации крови для различных ее концентраций во взвеси. Графики соответствуют степеням разведения крови в физрастворе: 1 – 1:20; 2 – 1:100; 3 – 1:200; 4 – 1:400



а)



б)

Рис.6. Зависимости скорости седиментации растворов крови от концентрации эритроцитов в физиологическом растворе: **а)** точки – результат усреднения экспериментальных данных, пунктирная линия – теоретического моделирования (рассмотрено ниже); горизонтальными линиями обозначены границы скоростей седиментации (рассчитанные по формуле Стокса) одиночных эритроцитов разных диаметров (микроциты: 6-7 мкм, нормоциты: 7-8 мкм и макроциты: 8-9 мкм); **б)** качественно построенная зависимость скорости оседания от концентрации эритроцитов по результатам работы [15], точки – экспериментальные данные, аппроксимированные сигмоидой (пунктирная линия).

На «эритроцитарный» диск, движущийся вдоль оси Y, действуют силы: вес диска, сила Архимеда F_A и сила трения $F_{\text{тр}}$, так что

$$Ma = Mg - F_A - F_{\text{тр}}, \quad (4)$$

где M – масса «эритроцитарного» диска, a и g – ускорения движения диска и свободного падения тела соответственно. Или иначе:

$$Ma = \rho_d g V_d - \rho_{\text{ф}} g V_d - 16\eta v R (1+f(c)). \quad (5)$$

В (5) выражение $16\eta v R$ – сила трения для сплошного диска, движущегося в жидкости [25]. Скобка $(1+f(c))$ введена нами для учета пористости диска, c – концентрация эритроцитов во взвеси. Полагаем, что с увеличением концентрации эритроцитов изменяются взаимосвязанные параметры –

размеры пор и их количество (поры – межклеточное пространство). Найти аналитическую взаимосвязь между этими параметрами затруднительно, однако, можно утверждать, что оба параметра связаны с концентрацией эритроцитов c . Функция $(1+f(c))$ задана таким образом, что при отсутствии пор $f(c)$ должна обращаться в нуль, тогда диск становится сплошным (5). Запись скобки в выражении для силы трения представляется разумной, т.к., действительно, наличие отверстий в диске приводит к образованию дополнительного встречного по отношению к движению диска потока жидкости, а, следовательно, к появлению дополнительного трения.

В эксперименте показано (рис. 5), что для данного разведения крови физраствором скорость седиментации эритроцитов постоянна, то есть $a = 0$. Тогда с учетом соотношения для объема диска (5) дает:

$$v = \pi g R H (\rho_d - \rho_f) / 16 \eta (1+f(c)). \quad (6)$$

Подставим (3) в (6):

$$v = \pi g n r^3 (\rho_{ep} - \rho_f) / 12 R \eta (1+f(c)). \quad (7)$$

Пользуясь связью n с концентрацией эритроцитов c , а также выражением для структурной вязкости $\eta = \eta_0 \exp(kc)$ [32,36], преобразуем (7):

$$v = \pi^2 g r^3 R h c (\rho_{ep} - \rho_f) / (12 \eta_0 \exp(kc) (1+f(c))), \quad (8)$$

где η_0 – коэффициент вязкости «растворителя» (физраствора), k – коэффициент, подбираемый для наилучшего согласования зависимости $\eta = \eta_0 \exp(kc)$ с экспериментальными результатами измерения коэффициента вязкости взвеси эритроцитов, в [32,36] он оказался равным $3.4805 \cdot 10^{-7}$.

При движении диска в жидкости в ограниченном пространстве цилиндра следовало бы учесть расстояние от центра диска до стенки цилиндрического сосуда. Для шара радиуса r такая поправка к скорости обозначена в (2) [26]. Однако, ввиду отсутствия в литературе подобного выражения для седиментирующего диска такая поправка в (8) не введена.

Для нахождения в (8) вида функции $(1+f(c))$, высота диска h полагалась равной $2r$, то есть диск представлял собой монослой из эритроцитов. Кроме того, считалось, что этот монослой движется (оседает) с экспериментально найденной скоростью движения границы для избранного значения концентрации эритроцитов c . С использованием экспериментальных данных (точки на рис.6 а) функция $(1+f(c))$ аппроксимировалась следующим выражением:

$$1 + f(c) = 1 + a c^{1.15}, \quad (9)$$

где для монослоя, расположенного на поверхности границы «плазма-эритроцитарная масса», величина a составила 0.000355. Если рассматривать многослойную систему диска (увеличение высоты h), то при прочих неизменных параметрах согласно (8) линейно должна возрастать и скорость оседания крови v (скорость движения границы). Физически это означает, что увеличение h приводит к увеличению объема, массы рассматриваемого эритроцитарного диска, что в свою очередь должно приводить к росту скорости v . Однако, реально скорость v остается постоянной, она не зависит от нашего выбора количества рассматриваемых слоев диска. Причиной постоянства скорости v , ее независимость от h кроется в возрастании силы трения жидкости о стенку «трубки тока» (межклеточный канал поры) при увеличении ее длины $L = h$ (высоты диска).

$$F^*_{mp} = \eta S (dv/dl) = \eta \pi l L (dv/dl), \quad (10)$$

где l – диаметр трубки тока (среднее межклеточное расстояние), L – длина трубки тока, $S = \pi l L$ – площадь боковой поверхности трубки, F^*_{mp} – дополнительная сила трения, действующая на трубку тока и возникающая за счет движения встречного потока против направления седиментации крови, dv/dl – градиент встречного потока жидкости вблизи стенки трубки тока (канал поры). Таким образом, на боковую внутреннюю поверхность трубки со стороны слоя движущейся жидкости действует сила внутреннего трения пропорциональная длине трубки $F^*_{mp} \sim L = h$. Этот эффект компенсирует рост скорости, полученный за счет увеличения массы диска (рост h), поэтому скорость движения границы «плазма-эритроцитарная масса» остается постоянной.

Такая трактовка причины постоянства скорости v , ее независимость от h подтверждается формулами (8), (9). Действительно, оценки показывают, что при постоянной заданной скорости v (рис. 5) увеличение h приводит практически к пропорциональному увеличению параметра a (9), т.е. функции $(1+f(c))$, что эквивалентно пропорциональному увеличению силы трения (5). Отсюда вытекает – для построения модели оседания крови в верхней области ее столба достаточно подвергнуть анализу движение монослоя эритроцитов на границе «плазма-эритроцитарная масса».

Следует отметить, что постоянство скорости v и рассмотренные причины этой особенности седиментации крови справедливы в верхней части ее столба. «Постепенное замедление скорости оседания эритроцитов, наблюдаемое при длительном проведении опыта, объясняется увеличением вязкости и плотности суспензии в нижней части» кюветы [4].

Расчеты по формуле (8) проводились для следующих параметров: $\rho_{эп} \approx 1.092 \cdot 10^3$ кг/м³ [19]; $\rho_f \approx 10^3$ кг/м³; $R \approx 5$ мм; $h = 5.5$ мкм; концентрация эритроцитов цельной крови $c_0 = 5 \cdot 10^6$ мм³; степень разведения цельной крови 1/5, 1/10, 1/20, 1/40, 1/80, 1/100, 1/200, 1/400; вязкость «растворителя» $\eta_0 = 1.01 \cdot 10^{-3}$ Па·с (вода при 20°C). Результаты расчетов (8), (9) приведены на рис.6а в виде кривой, проходящей вблизи экспериментальных точек. Интересно отметить, что при уменьшении концентрации эритроцитов во взвеси скорость седиментации крови возрастает и устремляется к значениям скоростей оседания одиночных эритроцитов соответствующих размеров (рис.6а).

ОБСУЖДЕНИЕ

Экспериментально показано, что с увеличением степени разбавления эритроцитарной массы физраствором (от 1:5 до 1:400) скорость оседания эритроцитов возрастает и стремится к значениям скоростей характерных для одиночных эритроцитов разного размера. Это обусловлено тем, что при больших разведениях крови (1:400) эритроциты сильно удалены друг от друга ($l \sim 50$ мкм при концентрации цельной крови $c_0 \sim 5 \cdot 10^6$ мм⁻³), они седиментируют почти индивидуально ($l > 2r = 5.5$ мкм). Однако, при малых разведениях крови, например, при 1:5 и той же величине c_0 , расстояние l составляет около 12 мкм, что практически соизмеримо с диаметром эквивалентного эритроцита 5.5 мкм. Заметим, что в этом случае среднее расстояние между мембранами соседних эритроцитов практически равно их диаметру. В этих условиях скорость встречного потока жидкости по отношению к направлению седиментации оказывается существенной, это увеличивает силу трения, а, следовательно, снижает скорость седиментации крови, она оказывается ниже скорости осаждения индивидуальных клеток. Экспериментально найденная зависимость скорости седиментации эритроцитов от их концентрации оказалась не только полезна для понимания роли встречного потока в процессе седиментации эритроцитов, но позволила определить некоторые эмпирические параметры, необходимые для построения модели седиментации раствора крови.

Предложена макроскопическая модель седиментации раствора крови, когда оседание клеток рассматривается в виде коллективного эффекта, а не в традиционной форме оседания индивидуальных, взаимодействующих друг с другом частиц (микроскопический анализ). При этом оседающий слой крови рассматривается как пористый диск, причем количество пор и их размеры зависят от степени разведения исходного образца крови. Моделирование показало, что:

- для построения модели оседания крови в верхней области ее столба (без агрегации эритроцитов) достаточно подвергнуть анализу движение монослоя эритроцитов на границе «плазма-эритроцитарная масса»;
- предложенная модель принципиально позволяет оценить роль пор («трубок тока» - межклеточные каналы) в величине скорости седиментации эритроцитов вплоть до ее математического описания;
- коллективность оседания эритроцитов заложена в самой модели этого процесса – клетки седиментируют оставаясь в пределах рассматриваемого слоя взвеси, диска.

Коллективность седиментации эритроцитов выявила еще одно интересное свойство: эритроцитарный монослой с соответствующими межклеточными расстояниями седиментирует во много раз медленнее, чем тот же слой эритроцитов, но плотно расположенных друг относительно друга, без «пор». Действительно, из эксперимента следует, что диск радиусом 5 мм и $h = 5.5$ мкм при разведении крови 1:100 оседает со скоростью 5.26 мм/час (экспериментальное значение – рис.6а). Если все эритроциты этого диска (его объем 0.421 мм³, количество эритроцитов 37890 шт.) плотно спрессовать в диск такой же толщины h , то его радиус будет составлять 0.426 мм, он будет падать в жидкости со скоростью 1294 мм/час (формула (5) при $f(c)=0$ – отсутствие пор), что больше экспериментального значения скорости (5.26 мм/час) в 246 раз. Так как при этих оценках плотность «спрессованного» монослойного диска ρ_d принималась равной $\rho_{эп}$, то надо полагать, что столь большое отличие в скоростях движения монослоев обусловлено встречными потоками жидкости, которые проходят сквозь «трубки тока» - межклеточные каналы.

Стоит заметить, что предложенная макроскопическая модель не препятствует дальнейшим традиционным разработкам СОЭ, а также изучению вновь открывшихся явлений. Так влияние

агрегации эритроцитов на седиментацию крови вполне можно моделировать в рамках изложенных здесь подходов. Обнаруженные в [15,29-31] осцилляции скорости движения границы «плазма-эритроцитарная масса» можно трактовать и моделировать как механические вибрации монослоев (мембран).

Представленные экспериментальные результаты и предложенная модель седиментации раствора крови, надеются авторы, будет полезной для понимания механизма оседания эритроцитов в растворе. Материал также будет использован при разработке акусто-оптического метода определения групповой принадлежности крови.

Авторы выражают признательность проф. МГУ, д.б.н. Воейкову В.Л. за предоставление литературы, необходимой для выполнения данной работы, а также ценные советы.

Литература

1. Biernacki E. // Zeitschrift für physiologische Chemie 1894, Vol. 19, p. 179-224.
2. Westergren A. // Acta Med. Scand. 1921, Vol. 54, p. 247-281.
3. Hashemi R., Majidi A., Motamed H. et al. // Emergency 2015, Vol. 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, Vol. 13, p. 787-800.
6. Nisa M., Zaman S. // Proceeding S.Z.P.G.M.I. 2003, Vol. 17(2), p. 71-73.
7. Siemons L., ten Klooster P.M., Vonkeman H.E. et al. // BMC Musculoskeletal Disorders 2014, Vol. 15, p. 368-374.
8. Shahzad F., Tawwab S., Abbas A. // J. Ayub Med. Coll. Abbottabad 2009, Vol. 21(3), p. 59-62.
9. Rühenstroth-Bauer G., Schedler K., Scherer R. et al. // J. Clin. Chem. Clin. Biochem. 1990, Vol. 28, p. 845-850.
10. Talstad I., Haugen H.F. // Scand. J. Clin. Lab. Invest. 1979, Vol. 39(6), p.519-524.
11. Shi X., Lin G. // Numerical Mathematics 2014, Vol. 7, p. 512-523.
12. Hung W.T., Collings A.F. // Phys. Med. Biol. 1994, Vol. 39, p. 1855-1873.
13. Fabry T.L. // Blood 1987, Vol. 70(5), p. 1572-1576.
14. Voeikov V.L., Goncharenko A.I., Goncharenko S.A. et al. // IFMBE Proceedings. 2005, Vol. 11, p. 218-223.
15. Воейков В.Л., Буравлева Е.В., Кондаков С.Э. // Вестн. Моск. Ун-та. Сер. 2. Химия 2012, Т. 53, № 6, с. 413-416.
16. Материалы сайта: http://www.advensum.com/catalog/encyclopedia_technologies/laboratory/1528/
17. Материалы сайта: <http://www.veterinars.com/dokladu/o-методах-определения-скорости-оседа.html>
18. Ismailov R.M., Shevchuk N.A., Khusanov H. // BioMedical Engineering OnLine 2005, Vol. 4, p. 24-39.
19. Bürger R., Wendland W.L. // Journal of Engineering Mathematics 2001, Vol. 41(2), p. 101-116.
20. Лосев Е.С. // Биофизика 1992, Т. 37, № 6, с. 1057-1061.
21. Pribush A., Meyerstein D., Meyerstein N. // Colloids and Surfaces B: Biointerfaces 2010, Vol. 75, p. 214-22.
22. Fenech M., Garcia D., Meiselman H.J. // Annals of Biomedical Engineering 2009, Vol. 37(11), p. 2299-2309.
23. Stokes G.G. Mathematical and Physical Papers / Cambridge, AT, The University Press, 1980.
24. Oka S. // Biorheology, 1985, Vol. 22(4), p.315-21.
25. Lamb H. Hydrodynamics. 6th Edition / Dover Publications, New York, 1945.
26. Ladenburg R. // Ann. Phys. 1907, Vol. 22, p. 287-309.
27. Normatov T.D., Khusanov I.N. // Nauka 2001, Vol. 5, p. 35-38.
28. Балаховский С.Д. Реакция оседания эритроцитов / М.-Л., ГИЗ, 1928.
29. Kuo C.D., Bai J.J., Chang I.T. et al. // J. Biomech. Eng. 1988, Vol. 110(4), p. 392-395.
30. Воейков В.Л., Дмитриев А.Ю., Пирогов А.В. // Тезисы докладов 4-ого Международного Пуцинского симпозиума "Связь биологических и физико-химических процессов с космическими и гелио-геофизическими факторами", 1996, с. 129-130.
31. Воейков В.Л., Гурфинкель Ю.И., Дмитриев А.Ю. и др. // Доклады РАН Т. 359, № 5, с. 1-5.
32. Дубровский В.А., Дворецкий К.Н., Балаев А.Э. // Акустический журнал 2004, Т. 50, № 2, с. 184-192.
33. Дубровский В.А., Долмашкин А.А. // Медицинская техника 2012, №2, с. 24-30.
34. Дубровский В.А., Забенков И.В., Торбин С.О. // Медицинская техника 2013, №3, с. 14-17.
35. Doubrovski V.A., Ganiлова Yu.A., Zabenkov I.V. // J. Biomed. Opt. 2014, Vol. 19(3), p. 36012.
36. Doubrovski V.A., Dvoretzki K.N. // Ultrasound in Medicine & Biology 2000, Vol. 26(4), p. 655-659.

МОНИТОРИНГ ИЗМЕНЕНИЯ РАЗМЕРОВ И СРЕДНИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ПРЕЛОМЛЕНИЯ И ДВУЛУЧЕПРЕЛОМЛЕНИЯ КОЛЛАГЕНОВЫХ ПУЧКОВ ПРИ ИММЕРСИОННОМ ОПТИЧЕСКОМ ПРОСВЕТЛЕНИИ С ПОМОЩЬЮ ТОМОГРАФА THORLABS-ОСР930SR

М. Е. Швачкина, Д. Д. Яковлев, А.Б. Правдин, Д. А. Яковлев

Саратовский государственный университет

Предлагается простая методика мониторинга характеристик коллагеновых пучков при их иммерсионном просветлении и регидратации, позволяющая одновременно, без переустановки образца, контролировать изменения объема и средних показателей преломления и двулучепреломления образца.

ВВЕДЕНИЕ

Возможность увеличивать оптическую прозрачность биологических тканей с помощью иммерсионного просветления используется при диагностике и лечении различных заболеваний для увеличения глубины проникновения излучения [1], а также при исследовании структуры биотканей [2-4]. При использовании иммерсионного просветления требуется знание кинетики и степени проявления таких механизмов, как дегидратация ткани под действием иммерсионного агента (ИА) и диффузия ИА агента в ткань, химического воздействия ИА на элементы ткани, а также его нехимического воздействия на структуру ткани (изменение конформации молекул и организации структуры молекулярных агрегатов). Для применений *in vivo* также важна кинетика регидратации и восстановления ткани после процедуры просветления. Важную информацию о кинетике иммерсионного просветления и процессе восстановления ткани после иммерсионного просветления можно получить из экспериментальных данных, отражающих временные изменения объема и оптических характеристик ткани, и их сравнения. В большинстве случаев одновременный контроль оптических и геометрических характеристик образцов ткани сопряжен с большими трудностями и осуществляется с прерыванием естественного хода процессов и перепозиционированием образца [5,6], что негативно влияет на точность измерений. В настоящей работе мы представляем простую методику измерений, позволяющую комплексно исследовать особенности взаимодействия иммерсионных агентов с коллагеносодержащими тканями на образцах вторичных сухожильных пучков из хвоста крысы методом оптической когерентной томографии. Основным достоинством этой методики является то, что она позволяет легко, без переустановок образца, производить мониторинг как геометрических параметров ткани, в частности ее объема, так и ее эффективных оптических параметров, таких как средний показатель преломления и средний показатель двулучепреломления. Поскольку и средний показатель преломления, и средний показатель двулучепреломления ткани зависят от состава и объемного содержания интерстициальной жидкости [1], по их экспериментальным значениям можно оценить содержание воды и иммерсионного агента в ткани.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

В качестве образцов используются вторичные сухожильные пучки из хвоста крысы. Обычно в состав сухожилия хвоста крысы входят вторичные сухожильные пучки диаметром от 250 до 500 мкм. Для измерений удобнее использовать пучки диаметром от 300 до 400 мкм. Будучи погруженным в физиологический раствор, пучок слегка натягивается и закрепляется зажимами на предметном стекле (рис. 1).

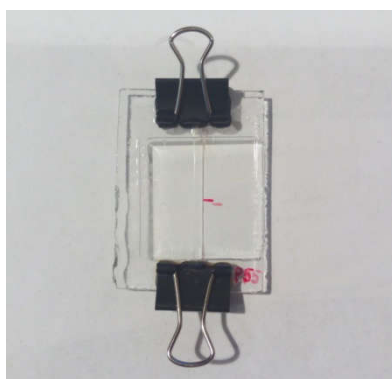


Рис. 1. Крепление образца

Затем он накрывается покровным стеклом и устанавливается в ОКТ-систему так, чтобы направление пучка было перпендикулярно направлению В-сканирования для получения скана поперечного сечения пучка в нативном состоянии. Затем покровное стекло снимается и быстро, с помощью фильтровальной бумаги, с поверхности предметного стекла удаляется физиологический раствор. После этого пучок окружается большим количеством иммерсионного агента, снова накрывается покровным стеклом и устанавливается в ОКТ-систему в том же положении. С момента установки через определенные промежутки времени, сначала малые (порядка 20 секунд), потом несколько большие (порядка минуты), фиксируются ОКТ-изображения пучка. Примеры изменения

ОКТ-изображений пучка в процессе оптического просветления при использовании различных иммерсионных агентов показаны на рис. 2.

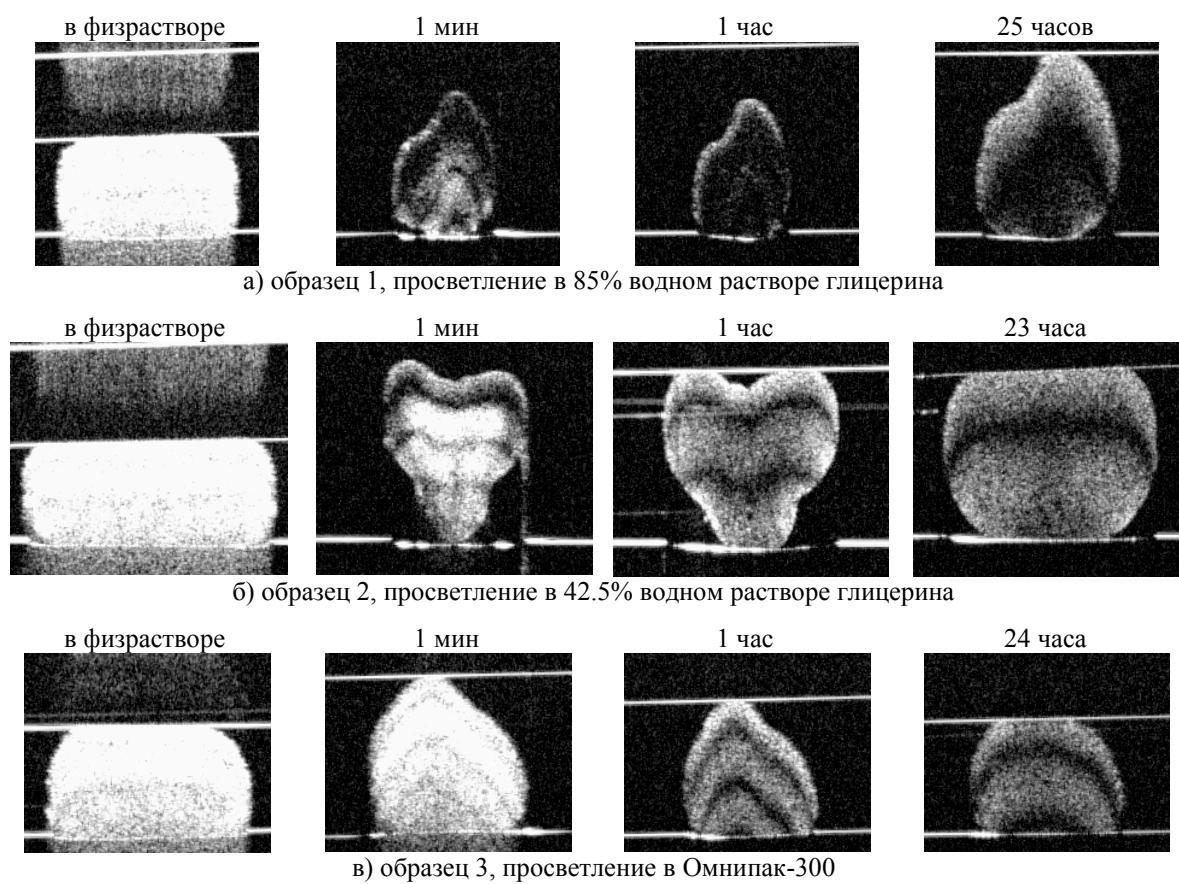


Рис. 2. Серии ОКТ-сканов для трех вторичных коллагеновых пучков из хвоста крысы. Показаны сканы образца в физиологическом растворе и в иммерсионной жидкости в разные моменты времени с момента погружения образца в иммерсионную жидкость

Способ определения среднего показателя преломления ткани по ОКТ-сканам описан в следующем разделе. Как показали проведенные нами эксперименты с использованием различных иммерсионных агентов, коллагеновый пучок с закрепленными концами (рис. 1) остается в натянутом состоянии как на стадии обезвоживания, так и на стадии набухания (даже через несколько дней). Поэтому для количественного контроля изменения объема ткани при обезвоживании и набухании в данной геометрии эксперимента достаточно следить за изменением площади сечения пучка. Так коэффициент изменения объема пучка, определяемый как

$$k_s = V/V_0, \quad (1)$$

где V – объем ткани в текущий момент времени, V_0 – объем ткани в нативном состоянии, может быть рассчитан по формуле

$$k_s = S/S_0, \quad (2)$$

где S и S_0 – значения площади поперечного сечения пучка в текущий момент времени и в нативном состоянии. Способ определения площади геометрического сечения пучка по ОКТ-сканам описан в предпоследнем разделе. Начальное натяжение пучка устраняет волнистость коллагеновой структуры, характерную сухожильным пучкам в свободном состоянии, что значительно упрощает оценку показателя двулучепреломления ткани. Способ оценки показателя двулучепреломления ткани при использовании томографа ThorLabs-OCP930SR или аналогичного ему по поляризационным характеристикам представлен в последнем разделе.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СРЕДНЕГО ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ ТКАНИ

В рассматриваемом эксперименте образец ткани располагается между предметным и покровным стеклами в физиологическом растворе или иммерсионной жидкости. В этом случае средний показатель преломления ткани может быть определен по смещению изображения верхней поверхности предметного стекла под образцом. Как известно [7-9], расстояние R_{OCTz} между

изображениями двух точек, расположенных на одной линии вертикального зондирования (А-скане), на ОКТ-изображении пропорционально оптической длине пути между этими двумя точками (l), определенной через средний групповой показатель преломления среды на пути между этими точками n_{ga} ,

$$R_{OCTz} \propto l = n_{ga}d, \quad (3)$$

где d – геометрическое (физическое) расстояние между этими точками. В рассматриваемой геометрии это может быть использовано для оценки среднего показателя преломления ткани. На ОКТ-изображении, показанном на рис.3, отмечены точки пересечения линии зондирования с верхней (А) и нижней (В) поверхностями образца ткани, а также с изображением верхней поверхности предметного стекла в отсутствие (С) и при наличии (D) образца.

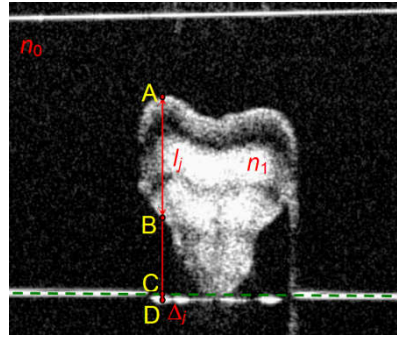


Рис. 3. Параметры, используемые при расчете среднего группового показателя преломления ткани

Обозначим средний групповой показатель преломления образца n_1 , а групповой показатель преломления среды n_0 . Оптическая длина пути через образец на j -ой линии вертикального сканирования (длина отрезка АВ на рис. 3) будет определяться как

$$l_j = n_1 d_j, \quad (4)$$

где d_j – геометрическая длина пути через образец. В отсутствие образца той же геометрической длине пути d_j соответствовала бы оптическая длина пути $n_0 d_j$. Смещение точки изображения верхней поверхности предметного стекла при наличии образца относительно ее положения в отсутствие образца на ОКТ-изображении, Δ_j (длина отрезка CD на рис. 3), можно выразить как

$$\Delta_j = l_j - n_0 d_j = l_j - n_0 \frac{l_j}{n_1}.$$

Поэтому, определив по ОКТ-скану величины Δ_j и l_j , можно рассчитать показатель преломления образца по формуле

$$n_1 = \frac{n_0 l_j}{l_j - \Delta_j}.$$

Из-за относительно низкого разрешения ОКТ-изображения точность определения величин Δ_j и l_j является невысокой. По этой причине, а также для учета возможных пространственных вариаций n_1 , целесообразно рассчитывать средний групповой показатель преломления образца, n_{1a} , по нескольким линиям вертикального сканирования, используя формулу

$$n_{1a} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \frac{n_0 l_j}{l_j - \Delta_j}, \quad (5)$$

где N – число используемых линий сканирования. В данной работе мы проводили расчеты при $N = 3$.

Для расчета по формуле (5) необходимо знать групповой показатель преломления среды, окружающей образец. Он может быть вычислен по значениям обычного, фазового, показателя преломления среды, используя хорошо известное общее соотношение [9,10]

$$n_g = n_p - \lambda_0 \left. \frac{dn_p}{d\lambda} \right|_{\lambda=\lambda_0}, \quad (6)$$

где n_p – фазовый показатель преломления, n_g – групповой показатель преломления среды и λ_0 – центральная длина волны излучения в вакууме. Для ThorLabs-ОСР930SR $\lambda_0 = 930$ нм.

В качестве примера на рис. 4 представлены измеренные временные зависимости среднего группового показателя преломления сухожильных пучков при их просветлении в 85% и 42.5% водных растворах глицерина, а также в Омнипак-300.

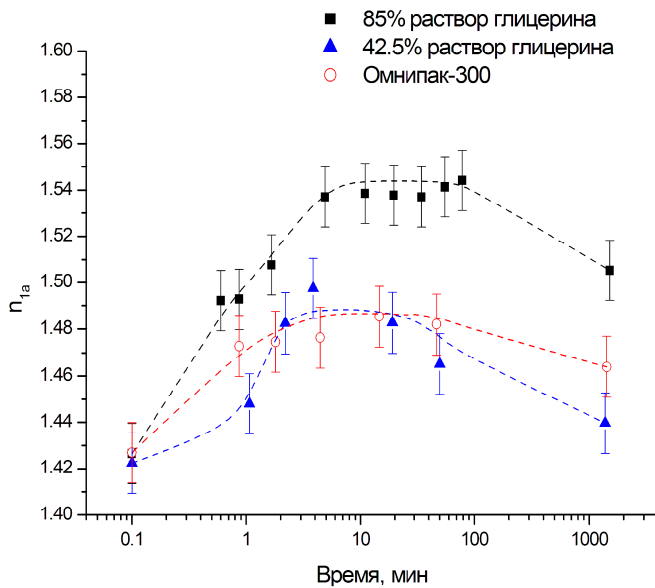


Рис. 4. Временные зависимости среднего группового показателя преломления сухожильных пучков при просветлении в различных иммерсионных агентах

Для расчетов групповых показателей преломления иммерсионных жидкостей использовались спектральные зависимости фазового показателя преломления для Омнипак, глицерина и воды, представленные в работах [11, 12]. При расчете спектральных зависимостей фазовых показателей преломления для растворов глицерина предполагалась справедливость соотношения Гладстона-Даля.

При обработке данных и оценке погрешности результатов необходимо учитывать, что в первые минуты после погружения образца в иммерсионную жидкость вокруг него образуется область с большим градиентом показателя преломления за счет диффузии воды, быстро выходящей из ткани в иммерсионную жидкость. О величине этого градиента и мере влияния неоднородности показателя преломления вокруг образца на результаты измерений можно судить по степени искривления изображения верхней границы предметного стекла вблизи образца (зоны искривления показаны стрелками на рис. 5).

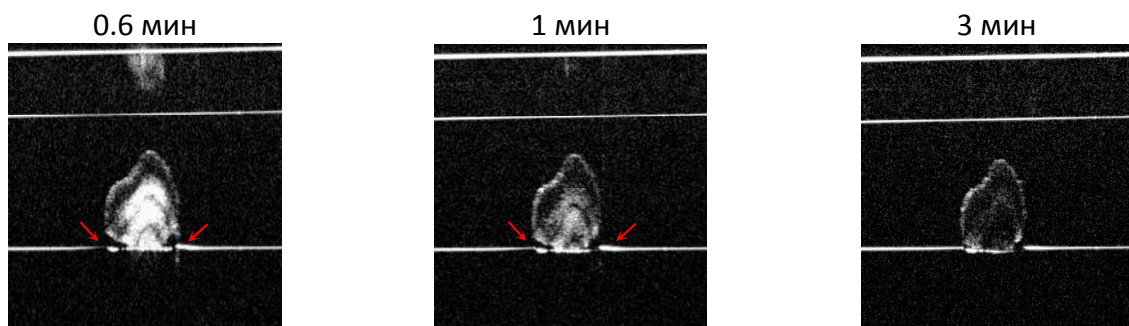


Рис. 5. Искривление изображения верхней границы предметного стекла из-за неоднородности показателя преломления жидкости окружающей образец, обусловленной диффузией выходящей из ткани воды в эту жидкость. Показаны ОКТ-сканы для сухожильного пучка, просветляемого в 85% водном растворе глицерина в разные моменты времени с момента погружения образца в иммерсионную жидкость

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПЛОЩАДИ СЕЧЕНИЯ КОЛЛАГЕНОВОГО ПУЧКА

С учетом (3) площадь геометрического сечения исследуемого сухожильного пучка, S , может быть найдена по площади изображения сечения этого пучка на ОКТ-скане по формуле

$$S = \frac{S_{\text{ОКТ-пик}} k_{pm}^2}{n_{1a}}, \quad (7)$$

где $S_{\text{ОКТ-пик}}$ – площадь изображения сечения пучка на ОКТ-скане в пикселях, $k_{\text{пм}^2}$ – площадь области, приходящейся на один пиксель изображения в квадратных миллиметрах, при показателе преломления отображаемой среды, равном 1 (в наших условиях измерения $k_{\text{пм}^2} = 1.2632 \cdot 10^{-5}$ мм²/пиксель), и n_{1a} – средний групповой показатель преломления исследуемого пучка, рассчитываемый по формуле (5). Для определения площади поперечного сечения пучка по ОКТ-изображению удобно использовать функцию Region of interest→Polygon свободно распространяемой компьютерной программы Icy [13] (рис. 6) (для определения линейных размеров на ОКТ-сканах может быть использована функция Region of interest→Line 2D этой программы).

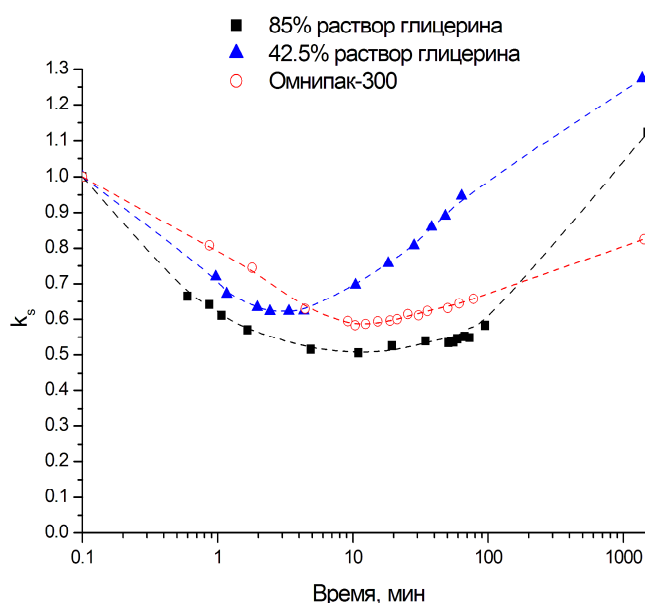
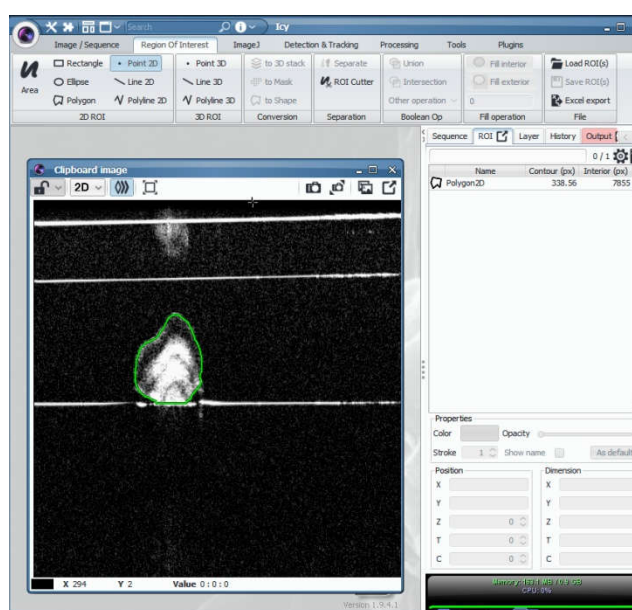


Рис. 6. Пример определения площади поперечного сечения сухожильного пучка с помощью программы Icy.

Рис. 7. Временные зависимости коэффициента изменения объема вторичных коллагеновых пучков сухожилия хвоста крысы при их просветлении в различных иммерсионных агентах

На рис. 7 показаны полученные с использованием описанного способа определения площади сечения пучка временные зависимости коэффициента изменения объема ткани (см. (1) и (2)) с момента погружения образца в иммерсионную жидкость для разных иммерсионных агентов.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СРЕДНЕГО ПОКАЗАТЕЛЯ ДВУЛУЧЕПРЕЛОМЛЕНИЯ ТКАНИ

Обычно для оценки двулучепреломления биологической ткани применяют поляризационно-чувствительные ОКТ-системы [14]. Но во многих случаях подобные измерения возможно произвести и на "обычных", "не поляризационно-чувствительных", ОКТ-установках, таких как томограф ThorLabs-ОСР930SR, используемый в данной работе. Эта возможность связана с тем, что зондирующий пучок в "обычных" ОКТ-системах, как правило, является частично линейно-поляризованным с преобладающей долей поляризованной компоненты. Последнее в основном обуславливается относительно высокой степенью поляризации излучения используемых в таких системах суперлюминесцентных диодов [15], которую связывают с остаточными механическими напряжениями в полупроводниковом кристалле, приводящими к анизотропии усиления, и поляризационно-зависимыми потерями в областях соприкосновения полупроводникового кристалла с металлическими контактами. Тестовые измерения на ОКТ-системе ThorLabs-ОСР930SR, проведенные при помещенном в предметное плечо поляризаторе, показали, что в этой системе плоскость преимущественной поляризации падающего на образец света ориентирована под углом 45° к плоскости сканирования, а отношение $P = I_{45} / I_{-45}$, где I_{45} и I_{-45} – значения регистрируемой интенсивности света, отраженного от границы раздела "воздух–диэлектрик", получаемые при ориентации оси пропускания поляризатора под углом 45° и –45° к плоскости сканирования, составляет не менее 7.

Как известно, коллагеновые волокна проявляют двулучепреломление. Локальная оптическая ось коллагенового волокна, которая соответствует большому показателю преломления, параллельна направлению его хода (направлению преимущественной ориентации фибрилл). В представляемой методике сухожильный пучок позиционируется длинной осью перпендикулярно плоскости сканирования. Поскольку исследуемый пучок натянут и ориентация коллагеновых волокон в пучке является почти однородной, ориентация эффективной локальной оптической оси пучка также является практически однородной, параллельной его геометрической оси. При ориентации плоскости преимущественной поляризации падающего света под углом 45° к оси сухожильного пучка при прохождении света через ткань его состояние поляризации изменяется из-за двулучепреломления. На ОКТ-изображениях пучка наблюдается модуляция сигнала, обусловленная этим изменением. Большая часть света, отраженного с определенных глубин образца, а именно, с глубин h , отвечающих условию

$$h = \frac{\lambda_0}{4\Delta n_a(h)}(1 + 2m) \quad m = 0, 1, 2, \dots,$$

где $\Delta n_a(h)$ – средний групповой показатель двулучепреломления среды на пути от верхней границы до глубины h , при выходе из него оказывается поляризованной ортогонально направлению преимущественной поляризации падающего света и не интерferирует с опорным пучком. Поэтому ОКТ-сигнал с этих глубин будет минимальным. Этим глубинам соответствуют темные полосы на ОКТ-изображениях образца (см. рис. 2 и 8).

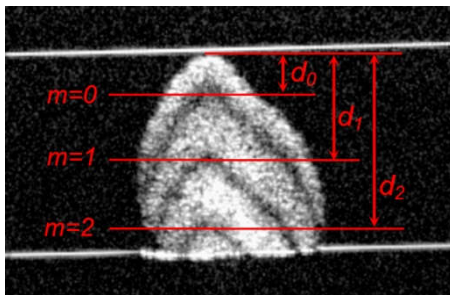


Рис. 8. Параметры, используемые при вычислении эффективного показателя двулучепреломления ткани

Пользуясь этим, можно рассчитать эффективный групповой показатель двулучепреломления ткани по формуле

$$\Delta n_{\text{eff}} = \frac{\lambda_0(1 + 2m)}{4h}. \quad (8)$$

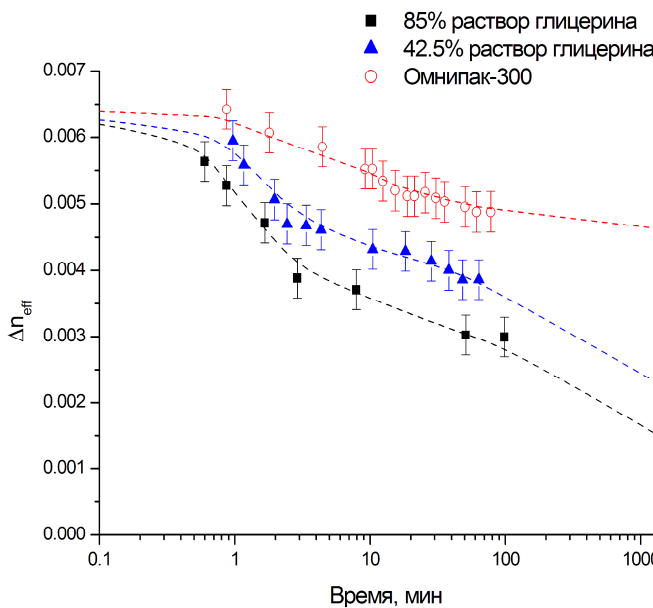


Рис. 9. Временные зависимости среднего показателя двулучепреломления сухожильных пучков при просветлении в различных иммерсионных агентах

Значения h могут быть рассчитаны по координатам центров темных полос d_m на ОКТ-изображении (рис. 8) как

$$h = \frac{d_m k_{pm}}{n_{1a}},$$

где k_{pm} – высота одного пикселя изображения в миллиметрах, при показателе преломления отображаемой среды, равном 1 (в нашем случае $k_{pm} = 0.003158$ мм/пиксель). Таким образом по ОКТ-изображениям можно оценить величину Δn_{eff} для длины волны $\lambda = \lambda_0$. Если локальный показатель двулучепреломления ткани сильно зависит от координаты по оси вертикального сканирования, значения Δn_{eff} , полученные для различных порядков m , будут существенно отличаться друг от друга. Это позволяет приближенно оценить среднее значение локального показателя двулучепреломления ткани на разных глубинах. Для оценки среднего по всей толщине образца значения коэффициента двулучепреломления следует использовать значения Δn_{eff} , рассчитанные по формуле (8) для наблюдаемых полос максимального порядка m . На рис. 9 в качестве примера показаны полученные таким образом временные зависимости показателя двулучепреломления Δn_{eff} при просветлении сухожильных пучков в 85% и 42.5% водных растворах глицерина и в Омнипак-300.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках проекта конкурсной части госзадания №3.1586.2017/ПЧ.

Литература

1. Тучин В.В. Оптика биологических тканей. Методы рассеяния света в медицинской диагностике. М.: Физматлит, 2012.
2. Azaripour A., Lagerweij T., Scharfbillig C. et al. //Progress in histochemistry and cytochemistry 2016, Vol. 51(2), p. 9-23.
3. Yakovlev D.D., Shvachkina M.E., Sherman M.M. et al. // J. Biomed. Opt. 2016, Vol. 21(7), p. 071111.
4. Costantini I., Ghobril J.P., Di Giovanna A. P. et al. //Scientific reports 2015, Vol. 5, p. 9808.
5. Tuchina D.K., Shi R., Bashkatov A.N. et al. //Journal of biophotonics 2015, Vol.8(4), p.332-346
6. Тучина Д.К., Генин В.Д., Башкатов А.Н. и др. //Оптика и спектроскопия 2016, Т.120(1), с.36-45
7. Wang X.-J., Milner T. E., Chang M. C. et al.// J. Biomed. Opt. 1996, Vol.1(2), p.212–216.
8. Sorin W. V., Gray G. F. //IEEE J. Photon. Technol. Lett. 1992, Vol. 4(1), p.105–107.
9. Bor Z., Osvay K., Rácz B. et al.// Opt.Comm., 1990. Vol.78(2). p.109–112.
10. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М.: Наука, 1970.
11. Баско Е.А., Теслина Н.В., Тучина Д.К. и др. Оптическое просветление тканей кожи ex vivo под действием Омнипак®// «Проблемы оптической физики и биофотоники SFM-2016» под ред. Г.В. Симоненко, В.В. Тучина. – Саратов: Изд - во «Новый ветер» 2016, с. 37-43.
12. Rheims J., Köser J., Wriedt T. // Measurement Science and Technology 1997, Vol.8(6), p.601.
13. De Chaumont F., Dallongeville S., Chenouard N. et al. //Nature methods 2012, Vol.9(7), p.690-696.
14. De Boer J.F., Milner T.E. // J. Biomed. Opt. 2002, Vol.7(3), p.359-371.
15. Drexler W., Fujimoto J.G. Optical coherence tomography: technology and applications. Cham: Springer, 2015.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКИХ МЕТОДИК ПРИ ЛАБОРАТОРНОЙ ОЦЕНКЕ ЦВЕТНОСТИ ДЕНТИНА

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

Саратовский государственный университет

Проведено сопоставление возможностей различных лабораторных спектрофотометрических методик по выявлению отличия цветовых характеристик образцов дентина с разным уровнем желто-коричневой пигментации.

ВВЕДЕНИЕ

В современной эстетической стоматологии одной из основных задач при отбеливании и реставрации зубов является правильное определение их цвета. Существующие методы для определения цвета зубов подразделяются на визуальные и аппаратные [1].

Ведущими методами являются визуальные за счет их удобства, быстроты и низкой стоимости. Визуальное определение цвета является субъективным методом, требующим наличия профессиональной подготовки, оптимальных условий и зависит от индивидуальных особенностей исследователя, таких как восприятие цвета и острота зрения [2, 3, 4]. Данный метод имеет множество недостатков, таких как изменение цветовосприятия при утомляемости, наличие порога

чувствительности зрительного анализатора, влияние различных препаратов, изменяющих цветовое зрение, а также влияние сторонних факторов, а именно освещения, окружающего фона и обстановки [5, 6].

Аппаратные методы определения цветности зуба (дентина), исключая влияние субъективных факторов, позволяют получить хорошо воспроизводимые объективные значения параметров цветности. В качестве аппаратных методик наибольшее распространение приобрели колориметрия, спектрофотометрия и цифровая фотография. Два последних метода наиболее часто используются в клинической практике. Спектральные методы определения цветности зуба успешно используются в стоматологии для обнаружения кариозных поражений на ранних стадиях развития [7, 8]. Использование цветовой фотосъемки для определения цветовых характеристик зуба наиболее приближено к зрительному цветовосприятию. Однако для определения цветовых характеристик необходимо анализировать изображения, полученные при идеальных оптических условиях [2, 6]; реализация таких условий при проведении лабораторных исследований по изменению цветности дентина является в значительной мере время- и трудозатратной.

Целью данной работы является сопоставление возможностей различных лабораторных спектрофотометрических методик по выявлению отличия цветовых характеристик образцов дентина с разным уровнем содержания желто-коричневого пигмента (в сравнении с методикой анализа цифровых фотографий).

МЕТОДЫ И МАТЕРИАЛЫ

Эксперимент проводился на зубах 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. Распил зуба проводился под водой для предотвращения термического повреждения. Далее поверхность распила при необходимости была выровнена с помощью корундовой пилы и отшлифована для обеспечения плотной фиксации в держателе.

Во время эксперимента проводились измерения спектров отражения и флуоресценции дентина и цифровая фотосъемка спилов образцов. По полученным спектральным данным и фотографиям были проведены расчеты значений цветовых координат в различных цветовых пространствах.

Регистрация спектров отражения дентина проводилась на спектроанализаторе LESA-7-med с волоконно-оптическим вводом в диапазоне 380-780 нм. В качестве источника изучения использовалась галогенная лампа. Также спектры отражения были получены на спектрофлуориметре «PerkinElmer LS 55» в режиме синхронной регистрации флуоресценции с постоянной разностью длин волн $\Delta\lambda = 0$ нм в области 335 – 780 нм.

Для расчета цветовых координат в системе XYZ по спектрам отражения, полученным на спектроанализаторе и на спектрофлуориметре, использовались две методики. Первая методика описана в работе [9]:

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

где $\bar{x}(\lambda_i)$, $\bar{y}(\lambda_i)$, $\bar{z}(\lambda_i)$ – удельные цветовые координаты на длине волны λ_i , $\Delta\lambda = 5$ нм, $I_C(\lambda_i)$ – интенсивность источника белого цвета С при длине волны λ_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 [9].

Вторая методика для расчета цветовых координат по спектрам отражения изложена в работе [10]:

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

где интенсивность диффузно отраженного света:

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

Для множителя k_C справедливо соотношение:

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

Спектры флуоресценции образцов были зарегистрированы на спектроанализаторе LESA-7-med с волоконно-оптическим вводом на интервале длин волн 380 – 780 нм. Источником возбуждающего излучения служил лазер ЛГИ-503 на молекулярном азоте ($\lambda = 337$ нм). Кроме того, регистрация спектров флуоресценции образцов проводилась на спектрофлуориметре «PerkinElmer LS 55» в области 380 – 780 нм при возбуждении $\lambda = 340$ нм.

Для расчёта цветовых координат по нормированным спектрам флуоресценции использовалась методика [10]:

$$\begin{aligned}
 X &= k_C \sum_{380nm}^{780nm} I_{Fl}(\lambda_i) \bar{x}(\lambda_i) \Delta\lambda, \\
 Y &= k_C \sum_{380nm}^{780nm} I_{Fl}(\lambda_i) \bar{y}(\lambda_i) \Delta\lambda, \\
 Z &= k_C \sum_{380nm}^{780nm} I_{Fl}(\lambda_i) \bar{z}(\lambda_i) \Delta\lambda,
 \end{aligned} \tag{5}$$

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

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

Значения удельных цветовых координат $\bar{x}(\lambda_i)$, $\bar{y}(\lambda_i)$, $\bar{z}(\lambda_i)$ были взяты из работы [11].

Наряду с регистрацией спектров проводилась цифровая фотосъемка образцов фотокамерой «Nikon D80». Съемка проводилась при свете ламп накаливания, и была использована поправка на стандартный источник по классификации МКО. Изображения сохранялись в формате RAW и без потери качества переводились в формат PNG. Каждый снимок был преобразован в три монохромных изображения, соответствующих значениям составляющих цветового пространства Lab. По полученным данным определялись значения цветовых характеристик для других цветовых пространств.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В Таблице 1 представлены цветовые координаты и характеристики цвета, рассчитанные по спектрам отражения, флуоресценции и по цифровым фотографиям. Обозначения (1), (2), (5) соответствуют нумерации формул, используемых для расчета XYZ. Обозначения I, II соответствуют образцам дентина с различным уровнем пигментации.

Полученные результаты позволяют выявить особенности использованных методик определения цветности дентина.

Таблица 1.

Цветовые координаты, полученные различными методами

	Цифровая фотография		Отражение LESA-7-med (1)		Отражение LESA-7-med(2)		Отражение "PerkinElmer" (1)		Отражение "PerkinElmer" (2)		Флуоресц. LESA-7-med (5)		Флуоресц. "PerkinElmer" (5)	
		I		I		I		I		I		I		I
	3	8	7	1	4	6	4	8	5	2	45	78	01	15
	5	1	0	4	00	00	5	1	00	00	00	00	00	00
	1	7	3	4	06	32	9	3	09	12	80	80	05	90
	.3	.3	.3	.4	.3	.3	.3	.3	.3	.3	.16	.2	.2	.2
	.3	.4	.3	.4	.3	.3	.3	.3	.3	.3	.1	.1	.2	.2
*	3	0	6	4	00	00	6	0	00	00	00	00	00	00
*	1	1	1	.1	1	.5	0.1	2	0.1	6	4	16	0	3
*				11		13	0.4	9	0.1	21	162	186	82	106
ue	.2	1.1	0.6	1.5	.4		.8	.2	.6	.7	.1	0.5	.4	1.4
hroma			.4	1		3	.4	.2	.1	.3	48	72	2	11
E*	3.6		14.6		15.2		9.6		6.2		40		33.2	

Наиболее приближенным к зрительному восприятию дентина можно считать фотографический метод, а наиболее объективными являются цветовые характеристики дентина рассчитанные в цветовом пространстве CIE L*a*b*. С точки зрения использования этих характеристик при оценке результатов отбеливания, наиболее значимой необходимо считать характеристику b*, уменьшение значения которой свидетельствует об уменьшении количества желто-коричневого пигмента.

Методика определения цветовых характеристик по спектрам отражения, полученным на спектроанализаторе LESA-7-med дает соотношение цветовых характеристик образцов дентина с разным уровнем пигментации адекватное результатам, рассчитанным по фотографиям. Измерение цвета с использованием зарегистрированных на спектрофлуориметре "PerkinElmer" LS 55 спектров отражения приводит к обратной тенденции в цветовой характеристике a*, то есть пигментированный зуб выглядит менее "зеленым". Это вероятно связано с тем, что при проводимых измерениях на приборе с двумя монохроматорами, не регистрируется флуоресценция образца, возможно имеющая место при широкополосном освещении. При этом величина цветового различия по этой методике выше, чем в фотографической. Это дает основание считать, что измерение степени желто-коричневой пигментации (количество пигмента) по такой методике будет обладать большей разрешающей способностью.

Цветовые характеристики регистрируемой автофлуоресценции дентина при УФ-возбуждении коррелируют со степенью желто-коричневой пигментации дентина. Данная корреляция является следствием проявления в спектрах флуоресценции дентина эффекта реабсорбции и его собственной автофлуоресценции. Цветовое различие во флуоресценции по абсолютной величине значительно больше, чем в случае измерения отражения. Это может быть связано с вкладом во флуоресценцию образца собственной "сине-зеленой" флуоресценции желтого пигмента дентина.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

С целью выбора оптимальной лабораторной методики контроля цветности зуба были проведены измерения цветности двух образцов дентина различными спектрофотометрическими методами с использованием методики оценки цвета по цифровой фотографии в качестве эталона. Анализ значений цветовых характеристик, рассчитанных по зарегистрированным спектрам отражения и флуоресценции, с учетом необходимости реализации измерений *in vivo*, позволяет рекомендовать зондовую методику регистрации спектров отражения с использованием широкополосного галогенового источника света для контроля изменения уровня желто-коричневой пигментации зуба.

Работа была выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации НШ 7898.2016.2.

Литература

1. Акулович А.В., Ялышев Р.К. // Эстетическая стоматология 2012, №1, с. 17-22.
2. Полифертова С.Ю. // Современные научные исследования и инновации 2016, № 10
3. Наумович С. А. и др. Определение цвета зубов в клинике ортопедической стоматологии // Учеб.-метод. пособие / С. А. Наумович и др. Минск : БГМУ, 2014. 59 с
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. Луцкая И.К. Цветоведение в эстетической стоматологии // И.К. Луцкая. М.: Медицинская книга, 2006. 116 с.
6. Эдвард Э.Макларен. Анализ и передача цвета. Обязательные элементы оценки цвета зуба и передачи информации о нем // Dental Tribune International: 2012. С. 11 – 14
7. Сарычева И. Н., Янушевич О. О., Минаков Д. А. и др. // Российский стоматологический журнал 2013, №1, с.17-21
8. Голощاپов Д. Л., Леньшин А. С., Середин П. В. // Биотехносфера 2014, №4 (34), с.7-8
9. 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.
10. Горбунова Е.В., Чертов А.Н. Колориметрия источников излучения // Учебное пособие. СПб: Университет ИТМО, 2015. 126 с.
11. Гуревич М.М. Цвет и его измерение. М.: Изд-во Академии наук СССР, 1950. 268 с.

**АНАЛИЗ КИНЕТИКИ НАГРЕВА РАКОВЫХ ОПУХОЛЕЙ КРЫС ИЗЛУЧЕНИЕМ
БЛИЖНЕГО ИК СПЕКТРАЛЬНОГО ДИАПАЗОНА ПРИ ВНУТРИВЕННОМ ВВЕДЕНИИ
ЗОЛОТЫХ НАНОСТЕРЖНЕЙ**

В.Д. Генин¹, Э.А. Генина^{1,2}, А.Б. Бучарская³, Д.К. Тучина¹, Н.Г. Хлебцов⁴, В.В. Тучин^{1,2,5}, А.Н. Башкатов^{1,2}

¹Саратовский государственный университет,

²Томский государственный университет,

³Саратовский государственный медицинский университет,

⁴Институт биохимии и физиологии растений и микроорганизмов Российской академии наук

⁵Институт проблем точной механики и управления Российской академии наук

В работе исследована кинетика нагрева модельных раковых опухолей при внутривенном введении суспензий золотых наностержней с дозами от 400 до 1200 мкг/мл и облучении в течение 15 минут лазерным излучением на длине волны 808 нм. Объектом исследования стали 40 аутбредных крыс с перевитыми опухолями холангиокарциномы линии РС-1. Полученные результаты позволяют сравнить методику введения золотых наностержней при развитой и неразвитой сосудистой системе опухолевой ткани для обеспечения максимального нагрева опухоли с помощью лазерного излучения. Показано, наибольшее повышение температуры опухоли связано с максимальным накоплением золотых наностержней в опухолевой ткани, что наблюдается при её высокой васкуляризации.

ВВЕДЕНИЕ

Рост числа онкологических заболеваний стимулирует как интенсивную разработку методов ранней диагностики опухолей, так и методов их терапии. Фототермическая противоопухолевая терапия, являющаяся одной из наиболее перспективных областей применения нанотехнологий в медицине, способствует созданию принципиально новых методов лечения рака и модернизации

существующих [1, 2]. В частности, лазерная гипертермия является перспективным методом в онкологии, но ее широкое применение ограничено низкой селективностью лазерного нагрева, влекущей значительное повреждение здоровых тканей, граничащих с опухолью.

Использование наноразмерных термосенсибилизаторов может стать решением данной проблемы [3]. Исследования показали, что золотые наностержни (ЗНС) являются перспективными агентами для фототермической терапии благодаря их длительной циркуляции в кровотоке [4], коллоидной стабильности, легкой спектральной настройке плазмонного резонанса [5] и эффективному преобразованию светового излучения в тепловую энергию [6].

Несмотря на многочисленные исследования в этой области, данный вид терапии требует оптимизации как дозировки и методов введения наночастиц, так и методов их нагрева с использованием оптического излучения ближнего ИК спектрального диапазона, а именно мощности, продолжительности воздействия и глубины проникновения в ткань лазерного излучения.

В данной работе представлены результаты исследования кинетики нагрева опухолей при внутривенном введении золотых наностержней.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

ЗНС были синтезированы и функционализированы тиолированным полиэтиленгликолем (молекулярный вес 5000, Nektar, США) методами, описанными в работах [6, 7]. Геометрические параметры ЗНС, определенные с помощью трансмиссионной электронной микроскопии (Libra-120, Carl Zeiss, Германия), составили 41 ± 8 нм (длина) и 10 ± 2 нм (диаметр). Для исследования были приготовлены суспензии ЗНС с концентрациями 800 и 400 мкг/мл, что соответствует оптической плотности на длине волны 810 нм 40 и 20, соответственно.

Объектом исследования стали 40 аутбредных крыс-самцов весом 200 ± 20 г. Животные содержались в стандартных условиях вивария при фиксированном световом режиме. Работу с животными проводили в соответствии с правилами Европейской конвенции о защите позвоночных животных для экспериментальных и других научных целей (Страсбург, 1986) и «International guiding principles for biomedical research involving animals» [8].

Экспериментальную модель холангиокарциномы крысы линии PC-1 получали путем подкожной инъекции суспензии опухолевых клеток (2×10^6 клеток/0.5 мл раствора Хэнкса). Когда объем опухоли достигал приблизительно 3 см^3 , животные были случайным образом разделены на десять групп (по 4 крысы в каждой группе), после чего шерсть с поверхности кожи над опухолью удалялась, и крысам восьми экспериментальных групп внутривенно вводилась суспензия ЗНС. Описание групп животных, участвовавших в экспериментах, содержится в таблице 1.

Перед началом облучения опухоли крыс исследовались с помощью ультразвуковой (УЗ) системы Voluson E8 Expert (GE Healthcare, США) в доплеровском режиме на частоте 7.2 МГц. Трехмерная доплеровская УЗ визуализация позволяла оценить объем и васкуляризацию опухолей.

Для облучения опухоли использовали 808-нм диодный лазер LS-2-N-808-10000 (Laser Systems Ltd., Россия). Облучение проводили в течение 15 мин при плотности мощности 2.3 Вт/см^2 . Площадь лазерного пятна на поверхности кожи составляла около 0.5 см^2 . Температурный контроль нагрева опухоли проводился с помощью ИК-тепловизора IRI4010 (IRYSYS, Великобритания). Перед всеми процедурами крысы подвергались анестезии препаратом Zoletil 50 (Virbac, Франция) в дозе 0.05 мг/кг.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В результате доплеровского УЗ исследования была выявлена высокая плотность внутриопухолевых сосудов в группах 7-10. Средний диаметр сосудов составил порядка 1 мм. Длина визуализированных фрагментов сосудов различалась в зависимости от их местоположения.

Максимальная скорость кровотока в опухолевых сосудах также значительно различалась и составляла в среднем 5.87 ± 3.41 см/с. В отличие от данных групп, в группах 1-6 отмечалась низкая плотность внутриопухолевых сосудов.

Таблица 1.

Описание групп животных, участвовавших в экспериментах (по 4 крысы в каждой группе).

Номер группы	Режим введения доз суспензии ЗНС	Общая доза суспензии
<i>Плохо развитая сосудистая система</i>		
1	Облучение без введения наночастиц	-
2	Однократное введение (1 мл) за 24 часа до облучения	400 мкг/мл
3	Двукратное введение (по 1 мл, 400 мкг/мл) за 48 и 24 часа до облучения	800 мкг/мл
4	Трехкратное введение (по 1 мл, 400 мкг/мл) за 72, 48 и 24 часа до облучения	1200 мкг/мл
5	Однократное введение (1 мл) за 48 часов до облучения	800 мкг/мл
6	Однократное введение (1 мл) за 24 часа до облучения	800 мкг/мл
<i>Хорошо развитая сосудистая система</i>		
7	Облучение без введения наночастиц	-
8	Однократное введение (1 мл) за 24 часа до облучения	400 мкг/мл
9	Двукратное введение (по 1 мл, 400 мкг/мл) за 48 и 24 часа до облучения	800 мкг/мл
10	Трехкратное введение (по 1 мл, 400 мкг/мл) за 72, 48 и 24 часа до облучения	1200 мкг/мл

Кинетика нагрева экспериментальных опухолей и граничащих с ними тканей представлена на рисунке 1. Как видно из рисунка, лазерное облучение опухолей без предварительного введения ЗНС в группах 1 и 7 вызывало незначительное увеличение температуры поверхности опухоли приблизительно до 40°C вне зависимости от васкуляризации опухоли. Однократное внутривенное введение суспензии ЗНС (группа 2) также не вызывало рост температуры выше 40°C . На наш взгляд, это связано с тем, что накопление достаточного количества частиц в опухоли не происходило в связи с малой васкуляризацией опухоли. Средняя температура облучаемого участка кожи над опухолью в группе 8 (хорошо развитая сосудистая система) при такой же дозе, как и в группе 2 (слабо развитая сосудистая система), достигла значения $49.9 \pm 4.3^{\circ}\text{C}$, что объясняется большим накоплением частиц в сосудах опухоли.

В группах 3-6 максимальная температура достигла в среднем от 47 до 52.2°C . При этом удвоение и утроение дозы не повлияло на рост температуры. В данных группах накопление достаточного количества частиц в опухоли не происходило в связи со слабой васкуляризацией модельной опухоли.

В группе 9 наблюдалось увеличение температуры до $59.4 \pm 10.4^{\circ}\text{C}$ при той же введенной дозе суспензии ЗНС, что и в группах 3, 5 и 6. Данная группа отличалась от групп 3, 5 и 6 более высокой васкуляризацией ткани опухоли, поэтому в группе 9 произошло достаточное накопление частиц для значительного нагрева опухоли.

Группа 10 продемонстрировала увеличение температуры в области опухоли в среднем до 68.2°C . По-видимому, в данной группе произошло максимальное накопление ЗНС как в связи с высокой суммарной дозой введенной суспензии, так и с высокой васкуляризацией опухолевой ткани.

В работе [9] было показано, что прямое внутриопухолевое введение суспензии ЗНС с концентрацией 400 мкг/мл и последующее облучение опухоли лазерным излучением на длине волны 808 нм привело к увеличению температуры в зоне нагрева до $65.5 \pm 5^{\circ}\text{C}$. При данном способе введения в опухоли аккумулировалось максимальное количество частиц. Поскольку в наших

экспериментах (группы 2-6, 8-10) введение суспензии ЗНС проводилось внутривенно, максимальная концентрация могла быть достигнута только при развитой микрососудистой системе опухоли.

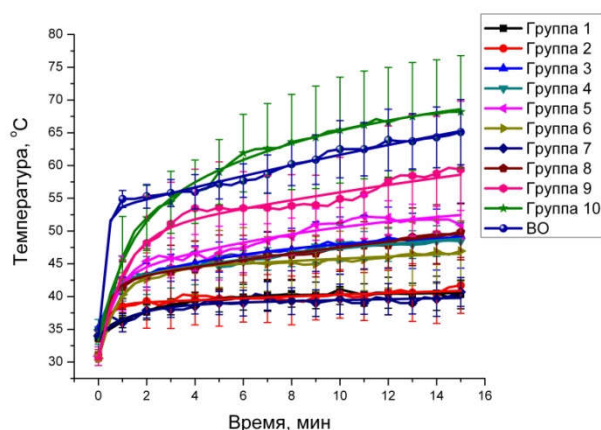


Рис. 1. Кинетика нагрева экспериментальных опухолей и граничащих с ними тканей излучением ближнего ИК спектрального диапазона (группа ВО соответствует группе крыс с однократным внутриопухолевым введением суспензии ЗНС с концентрацией 400 мкг/мл [9])

Для анализа кинетики нагрева, представленной на рисунке 1, было использовано эмпирическое уравнение:

$$T(t) = A_1 \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_1}\right) \right) + A_2 \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_2}\right) \right) + T_0,$$

где T_0 - температура в начальный момент времени (до нагрева), A_1 и A_2 - эмпирические константы, а τ_1 и τ_2 - константы, характеризующиеся скоростью нагрева кожи и опухоли. Предполагалось, что первый член уравнения описывает кинетику нагрева тканей, окружающих опухоль, а второй член описывает кинетику нагрева опухоли. Параметры аппроксимации приведены в таблице 2.

Таблица 2. Параметры аппроксимации экспериментальных данных.

Номер группы	Параметры аппроксимации			
	A_1	A_2	τ_1 , мин	τ_2 , мин
1	1.382±0.394	6.31±1.88	27.841±0.478	1.971±0.062
2	5.688±0.85	7.685±3.137	32.663±6.548	0.302±0.003
3	8.681±2.492	6.175±4.126	6.969±10.129	0.47±0.35
4	10.276±3.601	7.557±1.618	14.32±12.008	0.411±0.034
5	12.931±2.798	11.58±0.877	10.192±4.427	0.534±0.026
6	7.071±2.083	13.127±3.415	28.902±2.233	0.82±0.177
7	3.013±0.242	4.618±0.89	30.339±12.64	1.389±0.956
8	19.383±4.86	8.136±3.537	30.474±11.054	0.456±0.028
9	25.611±17.838	18.57±4.686	32.331±18.769	0.961±0.054
10	23.761±8.006	15.653±4.057	8.663±13.433	1.083±0.808
ВО	40.954±12.99	19.028±0.913	41.86±6.916	0.211±0.008

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Полученные результаты позволяют сравнить методики введения золотых наностержней для обеспечения максимального нагрева опухоли с помощью лазерного излучения. Наибольшее повышение температуры опухоли связано с максимальным накоплением золотых наностержней в опухолевой ткани при трёхкратной внутривенной инъекции по 400 мкг/мл (суммарная доза 1200 мкг/мл) за 72, 48 и 24 часа до облучения при условии достаточного развития сосудистой системы опухоли.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента России НШ-7898.2016.2.

Литература

1. Jain K.K. // BMC Medicine 2010, Vol. 8, p. 83.
2. Abadeer N.S., Murphy C.J. // J. Phys. Chem. C 2016, Vol. 120, p. 4691-4716.

- Huang X., Jain P.K., El-Sayed I.H. et al. // *Lasers Med Sci.* 2008, Vol. 23(3), p. 217-228.
- Dykman L.A., Khlebtsov N.G. // *Chem. Rev.* 2014, Vol. 114, p. 1258–1288.
- Dickerson E.B., Dreaden E.C., Huang X. et al. // *Cancer Lett.* 2008, Vol. 269, p. 57-66.
- Alekseeva A.V., Bogatyrev V.A., Khlebtsov B.N. et al. // *Colloid. J.* 2006, Vol. 68, p. 661–678.
- Khlebtsov B.N., Tuchina E.S., Khanadeev V.A. et al. // *J. Biophotonics* 2013, Vol. 6, p. 338–351.
- International Guiding Principles for Biomedical Research Involving Animals / CIOMS-ICLAS (2012). URL: https://grants.nih.gov/grants/olaw/guiding_principles_2012.pdf (дата обращения: 04.11.2017)
- Bucharskaya A.B., Maslyakova G.N., Dikht N.I. et al. // *BioNanoSci.* 2017, Vol. 7, p. 216-221.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ УВЕЛИЧЕНИЯ ОПТИЧЕСКОЙ ГЛУБИНЫ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ ЧАСТИЦ CaCO_3 В КОЖЕ С ПОМОЩЬЮ ОКТ ПРИ ОПТИЧЕСКОМ ПРОСВЕТЛЕНИИ

С. М. Зайцев¹, Ю. И. Свенская¹, Е. В. Ленгерт¹, А. Н. Башкатов^{1,2}, В. В. Тучин^{1,2,3}, Э. А. Генина^{1,2}

¹Саратовский государственный университет

²Национальный исследовательский Томский государственный университет

³Институт проблем точной механики и управления РАН

В работе представлены результаты оптимизации состава иммерсионных растворов для оптического просветления кожи с целью увеличения оптической глубины детектирования микрочастиц, внедренных в волосяные фолликулы крысы *ex vivo*. В качестве исследуемых частиц использовались частицы карбоната кальция размером 1.0 ± 0.2 мкм. Для усиления проникновения частиц вдоль фолликулов поверхность кожи с нанесенными на исследуемый участок суспензиями частиц обрабатывалась ультразвуком частотой 1 МГц и плотностью мощности 0.5 Вт/см^2 в течение 2 мин. Затем на обработанный участок кожи наносился исследуемый иммерсионный агент. Наибольшая оптическая глубина детектирования исследуемых частиц с помощью спектрального оптического когерентного томографа на длине волны 930 нм была достигнута при использовании в качестве иммерсионного агента раствора олеиновой кислоты и ПЭГ-400 в соотношении 20:80% и составила 404 ± 37 мкм после 25 минут оптического просветления кожи.

ВВЕДЕНИЕ

В результате многолетних исследований наночастиц было установлено, что они способны доставлять лекарства местного применения через кожный барьер [1-3]. Как показано в работах [4, 5], микро- и наночастицы способны проникать в волосяные фолликулы, где они могут оставаться в течение нескольких дней. Успешная загрузка лекарств в наночастицы и их внедрение в волосяной фолликул является эффективным методом для локализованной доставки лекарств. В зависимости от размера частиц, такой способ может позволить выбирать целью различные структуры, такие как стволовые клетки, клетки иммунной системы или кровеносные сосуды, находящиеся в непосредственной близости от волосяных фолликулов [6].

В качестве носителей лекарственных средств и фотосенсибилизаторов были предложены контейнеры из различных материалов, в том числе фосфата кальция [7] и наночастицы диоксида кремния [8]. Для решения проблемы локализации лекарственных веществ в работе [9] было предложено использовать микрочастицы карбоната кальция (CaCO_3).

Для повышения глубины детектирования частиц в коже требуется применение методики оптического просветления биоткани, позволяющей увеличить контраст визуализации частиц [10-12]. Целью работы является исследование возможности увеличения оптической глубины детектирования микроконтейнеров CaCO_3 в волосяном фолликуле с помощью оптической когерентной томографии (ОКТ) при оптическом просветлении кожи а также оценка эффективности используемых иммерсионных агентов.

МЕТОДЫ И МАТЕРИАЛЫ

В работе использовались 9 лабораторных крыс альбиносов *ex vivo* возрастом около 1 года весом 250-300 г.

В качестве исследуемых частиц использовались частицы CaCO_3 диаметром 1.0 ± 0.2 мкм (см. рисунок 1). Изображения частиц получены с помощью сканирующего электронного микроскопа (СЭМ) MIRA II LMU (Tescan, Czech Republic) с рабочим напряжением 20 кВ с диапазоном увеличения от 100 до 40000 раз. Распределение размеров синтезированных частиц было получено с помощью анализа СЭМ изображений. Навеска частиц при аппликации на исследуемый участок составляла 5мкг.

В качестве иммерсионных агентов для увеличения глубины внедрения частиц и последующего оптического просветления кожи использовались 9 различных растворов. Состав и показатели преломления используемых растворов представлены в таблице 1.

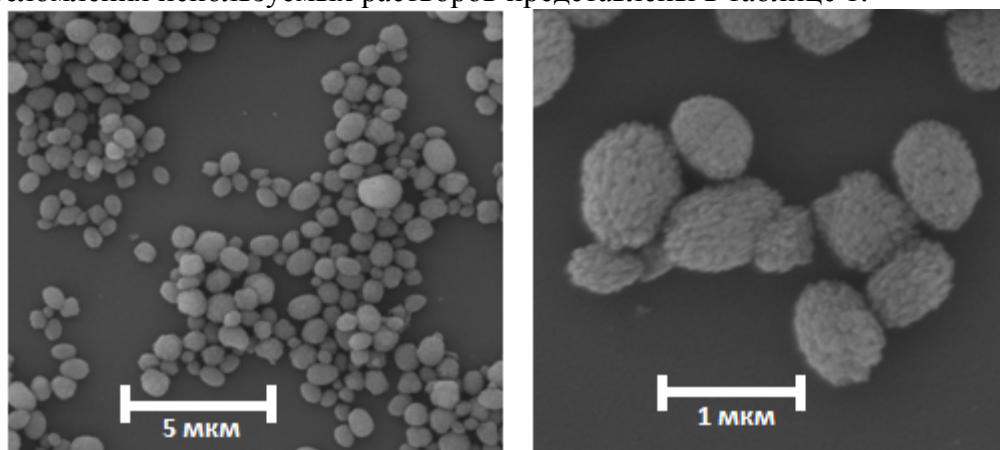


Рис. 1. Изображения частиц CaCO₃, полученные с помощью сканирующего электронного микроскопа.

Таблица 1.

Состав и показатели преломления иммерсионных растворов.

Просветляющий агент	Концентрация, %	Показатель преломления (586 нм)
Смесь ДМСО* и ПЭГ-400**	20:80	1.4605
Смесь ДМСО и ПЭГ-400	10:90	1.4615
Смесь тиазона и ПЭГ-400	20:80	1.4820
Смесь тиазона и ПЭГ-400	10:90	1.4710
Минеральное масло	100	1.4615
Смесь минерального масла и ДМСО	20:80	1.4610
Смесь минерального масла и ДМСО	10:90	1.4620
Олеиновая кислота	100	1.4600
Смесь олеиновой кислоты и ПЭГ-400	20:80	1.4620

*диметилсульфоксид

**полиэтиленгликоль с молекулярной массой 400

В качестве источника УЗ использовался излучатель Dinatron 125 (Dinatronics, США). Частота УЗ составляла 1 МГц, плотность мощности - 0.5 Вт/см² в непрерывном режиме, время воздействия - 2 мин. Параметры УЗ воздействия были подобраны в результате предварительных экспериментов. При данных параметрах УЗ частицы эффективно проникали вглубь фолликулов, но их разрушения не происходило.

На предварительно депилированные участки кожи наносился исследуемый иммерсионный агент объемом 200 мкл, затем поверх агента осуществлялась аппликация навески исследуемых частиц, после этого происходило внедрение внутрь волосяного фолликула с использованием УЗ. Затем излишки агента и частиц удалялись с поверхности кожи. После этого на этот участок дополнительно наносился тот же иммерсионный агент объемом 200 мкл, время экспозиции составляло 1 час.

Для визуализации кожи использовался спектральный оптический когерентный томограф (ОКТ) Thorlabs OCP930SR (Thorlabs, США) с центральной длиной волны излучения 930 нм, шириной спектра излучения 100 нм, продольным разрешением 6.2 мкм, поперечным разрешением 9.6 мкм на воздухе и длиной области сканирования 2 мм. ОКТ-мониторинг исследуемых участков происходил перед аппликацией частиц, после их внедрения, а также в процессе оптического просветления кожи в течение часа с интервалом 5 минут.

По полученным А-сканам ОКТ-изображений была оценена оптическая глубина проникновения частиц.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рисунке 2 представлены ОКТ-изображения волосяных фолликулов в различные моменты времени: до внедрения частиц, после внедрения частиц, и в момент времени, соответствующий максимальному значению оптической глубины детектирования исследуемых частиц.

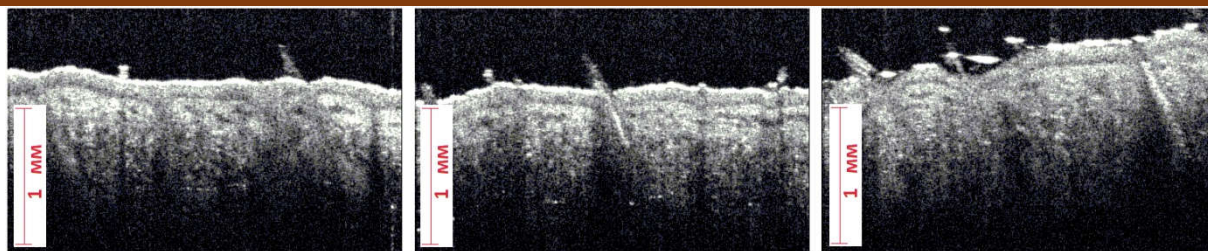


Рис. 2. ОКТ-изображения волосяных фолликулов в различные моменты времени (слева направо): до внедрения частиц CaCO_3 , после внедрения частиц, и в момент времени, соответствующий максимальному значению оптической глубины детектирования исследуемых частиц.

На рисунке хорошо видно, что ОКТ-изображение фолликула в коже не является контрастным. При локализации частиц внутри фолликула контраст ОКТ-изображения фолликула увеличивается за счёт различий в значениях показателя преломления карбоната кальция 1.6 [13] и дермы (1.4) [14]. При высоком рассеянии кожи глубина визуализации частиц ограничивается оптической глубиной зондирования ткани. С увеличением прозрачности окружающей ткани оптическая глубина детектирования фолликула, заполненного частицами CaCO_3 , увеличивается.

В таблице 2 представлены значения максимальной оптической глубины детектирования исследуемых частиц при оптическом просветлении кожи различными иммерсионными агентами и характеристическое время процесса оптического просветления.

На рисунке 3 представлены графики зависимости среднего значения оптической глубины детектирования от времени для различных иммерсионных агентов.

Из таблицы 2 и рисунка 3 видно, что наименьшее среднее значение оптической глубины детектирования наблюдалось при использовании раствора ДМСО и ПЭГ-400 в соотношении 20:80% (221.5 ± 40 мкм). Это может быть связано с дегидратацией и уплотнением кожи под действием исследуемых растворов, что привело к увеличению показателя преломления дермы и, таким образом, снижению контраста изображения фолликулов, заполненных частицами, на фоне дермы. Как описано в работе [15], ПЭГ-400 вызывает значительное уменьшение объёма и веса образцов кожи, что связано с их дегидратацией за счёт гигроскопичности ПЭГ-400. Использование ДМСО как препарата для увеличения проницаемости эпидермиса, по-видимому, усилило эффект дегидратации кожи. Кроме того, увеличение концентрации ДМСО в растворе увеличило скорость проникновения ПЭГ-400 в кожу, о чём говорит уменьшение характеристического времени процесса.

Таблица 2.

Максимальная оптическая глубина детектирования микрочастиц CaCO_3 в фолликулах и характеристическое время процесса оптического просветления кожи с помощью исследуемых иммерсионных агентов.

Иммерсионный агент	Максимальная оптическая глубина детектирования, мкм	Характеристическое время процесса, мин
ДМСО+ПЭГ-400(20×80)	221.5 ± 40	7.5
ДМСО+ПЭГ-400(10×90)	281 ± 51	25.5
Минеральное масло (100%)	334 ± 103	1.3
Минеральное масло+ДМСО (80×20)	317.2 ± 69	5.7
Минеральное масло+ДМСО (90×10)	346.5 ± 57	9.5
Олеиновая кислота (100%)	427.2 ± 106	3.9
Олеиновая кислота+ПЭГ-400 (20×80)	404 ± 37	2.2
Тиазон+ПЭГ-400 (10×90)	369.7 ± 52	8
Тиазон+ПЭГ-400 (20×80)	381 ± 0	9.5

Минеральное масло при использовании его в качестве агента продемонстрировало увеличение оптической глубины детектирования частиц в фолликуле до 334 ± 103 мкм, что приблизительно совпадает с результатами, полученными при использовании двух растворов минерального масла и ДМСО (80:20% - 317.2 ± 69 мкм, 90:10% - 346.5 ± 57 мкм). Увеличение оптической глубины детектирования в данном случае связано с иммерсией эпидермальной ткани, поскольку минеральное масло является липофильным веществом. При этом дегидратации и уплотнения ткани не происходило. Таким образом, несмотря на то, что показатели преломления растворов минерального масла/ДМСО и ДМСО/ПЭГ-400 имеют близкие значения, оптическое просветление кожи в первом случае выше.

Наименьшее значение характеристического времени оптического просветления в случае использования чистого минерального масла объясняется тем, что оптическое просветление ограничивалось по времени смачиванием верхнего рогового слоя эпидермиса, в то время как при добавлении ДМСО проницаемость рогового слоя увеличивалась и минеральное масло диффундировало в более глубокие слои эпидермиса.

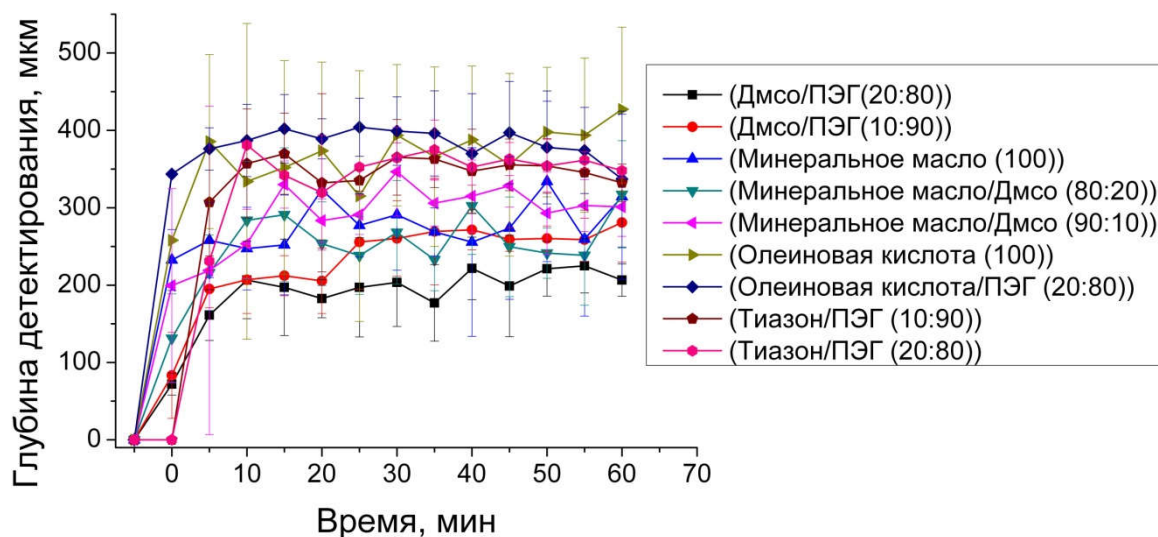


Рис. 3. График зависимости оптической глубины детектирования от времени воздействия иммерсионных агентов. Моменту времени $t = -5$ соответствует момент до внедрения частиц, моменту времени $t = 0$ - момент после внедрения частиц

Просветляющие агенты, представленные растворами Тиазона и ПЭГ-400 в соотношениях 10:90% и 20:80%, достигли значений оптической глубины детектирования 369.7 ± 52 мкм и 381 мкм, соответственно. Полученные результаты хорошо согласуются с данными, представленными в работах [16, 17]. В цитируемых работах отмечается, что вязкие иммерсионные агенты, в том числе на основе ПЭГ, показали хорошее просветляющее действие, проявляющееся в активной дегидратации обработанных тканей и последующего снижения их рассеяния, усиленного тиазоном, представленным в качестве усилителя проницаемости кожи. Однако в работах [18, 19] отмечается эффект увеличения рассеяния, вызванный тиазоном. В работе [18] описан эффект кристаллизации молекул тиазона внутри мышечной ткани при взаимодействии с водой, что, соответственно, приводит к снижению просветления и увеличению рассеяния. По-видимому, с этим эффектом связано постепенное уменьшение значения оптической глубины детектирования частиц после достижения максимального значения, что хорошо видно на рисунке 3.

Как видно из таблицы 2 и рисунка 3, наибольшего среднего значения оптическая глубина детектирования (427.2 ± 106 мкм) частиц карбоната кальция достигла при использовании в качестве иммерсионного агента 100%-й олеиновой кислоты. Раствор олеиновой кислоты и ПЭГ-400 в соотношении 20:80%, показал близкие результаты (404 ± 37 мкм). Однако максимальное значение оптической глубины детектирования при использовании только олеиновой кислоты было достигнуто на 60 минуте оптического просветления, в то время как при использовании раствора олеиновой кислоты и ПЭГ-400 – через 25 минут.

На рисунке 3 можно заметить, что начальные значения оптической глубины детектирования для исследуемых иммерсионных агентов значительно различались. На наш взгляд это обусловлено не только различиями оптических свойств кожи исследуемых крыс, но в большей степени тем, что во время внедрения частиц с помощью УЗ происходило оптическое просветление кожи. Наибольшее оптическое просветление при $t = 0$ было достигнуто при использовании раствора олеиновой кислоты и ПЭГ-400 (20:80%).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведенных исследований с использованием нескольких гидрофильных и липофильных оптических просветляющих агентов, некоторые из которых включали в свой состав иммерсионные агенты и усилители проницаемости рогового слоя эпидермиса, показано, что

наиболее оптимальным иммерсионным агентом для увеличения оптической глубины детектирования исследуемых частиц CaCO_3 в волосяных фолликулах является раствор олеиновой кислоты и ПЭГ-400 в соотношении 20:80%. При его использовании как в качестве усилителя внедрения частиц, так и просветляющего агента была достигнута глубина 404 ± 37 мкм в течение 25 минут оптического просветления. В данном случае была достигнута высокая степень оптического просветления уже в процессе УЗ обработки кожи в течение 2 мин при внедрении суспензии частиц. *Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №17-73-20172).*

Литература

- Lademann J., Richter H., Teichmann A. et al. // Eur. J. Pharm. Biopharm. 2007, Vol. 66, p.159–164.
- Cevc G., Vierl U. // J. Control. Release. 2010, Vol. 141, p.277-299.
- Genina E.A., Svenskaya Yu.I., Yanina I.Yu. et al. // Biomedical Optics Express 2016, Vol. 7(6), p.2082-2087.
- Lademann J., Knorr F., Richter H. et al. // J. Innov. Opt. Health Sci. 2015, Vol. 8(4), p. 1530004.
- Генина Э.А., Башкатов А.Н., Тучин В.В. // Известия Саратовского университета. Сер. Физика. 2012, Т. 12, № 2, с. 26-30.
- Самусев Р. П., Липченко В. Я. Атлас анатомии человека. // М.: Оникс 21 век: Мир и образование, 2002, 704 с.
- Klesing J., Wiehe A., Gitter B. et al. // J. Mater. Sci. 2010, Vol. 21(3), p. 887-892.
- Qian J., Wang D., Cai F. et al. // Biomaterials. 2012, Vol. 33(19), p. 4851-4860.
- Svenskaya Yu. I., Navolokin N. A., Bucharskaya A. B. et al. // Nanotechnologies in Russia 2014, Vol. 9(7-8), p.398-409.
- Генина Э.А., Терентюк Г.С., Башкатов А.Н. и др. // Российские нанотехнологии 2014, Т. 9, с. 87-96.
- Genina E.A., Bashkatov A.N., Kolesnikova E.A. et al. // Journal of Biomedical Optics 2014, Vol. 19(2), p. 021109.
- Генина Э.А., Терентюк Г.С., Хлебцов Б.Н. и др. // Квантовая электроника 2012, Т. 42 (6), с. 478-483.
- Weber M.J. Handbook of Optical Materials. // CRC Press, 2003, 499 p.
- Тучин В.В. Оптика биологических тканей. Методы рассеяния света в медицинской диагностике. // М.: ФИЗМАТЛИТ, 2012, 812 с.
- Тучина Д.К., Генин В.Д., Башкатов А.Н. и др. // Оптика и спектроскопия 2016, Т. 120(1), с. 36-45.
- Deng Z., Jing L., Wu N. et al. // J. Biomed. Opt. 2014, Vol. 19(7), p. 076019.
- Shi R., Guo L., Zhang C. et al. // J. Biophotonics 2017, Vol. 10, p. 887-895.
- Jin X., Deng Z., Wang J. et al. // J. Biomed. Opt. 2016, Vol. 21(10), p. 105004.
- Shi R., Chen M., Tuchin V. V. et al. // Biomedical Optics Express, 2015, Vol. 6(6), p. 1977-1989.

ДИФфуЗИЯ МЕТИЛЕНОВОГО СИНЕГО В КОЖУ КРЫСЫ *EX VIVO*

Е. А. Баско¹, М.В. Клементьева¹, А.Н. Башкатов^{1,2}, В.В. Тучин^{1,2,3}, Э.А. Генина^{1,2}

¹Саратовский государственный университет,

²Национальный исследовательский Томский государственный университет

³Институт проблем точной механики и управления РАН

В работе представлены результаты исследования диффузии метиленового синего, растворённого в воде и 50%-ном водно-спиртовом растворе, в коже крысы *ex vivo*. Оценка эффективных коэффициентов диффузии проводилась на основе анализа кинетики спектров обратно рассеянного излучения в диапазоне 600-700 нм. Эффективные коэффициенты диффузии для водного и водно-спиртового растворов составили $(1.98 \pm 0.06) \times 10^{-6}$ и $(3.34 \pm 0.07) \times 10^{-6}$ см²/с, соответственно.

ВВЕДЕНИЕ

При растущей популярности оптических методов диагностики и лечения различных заболеваний появилась необходимость изучения свойств биосовместимых препаратов и их коэффициентов диффузии в биоткани. В частности, краситель метиленовый синий (МС) широко используется как для маркировки опухолей и других биообъектов с целью их визуализации [1-9], так и для фотодинамической терапии рака [9, 10] и бактериальных инфекций [11-13] благодаря его биосовместимости, безопасности и доступности. Однако, несмотря на широкое применение МС, скорость диффузии данного красителя в коже изучена недостаточно. Ранее был исследован транспорт МС, растворённого в физиологическом растворе, в дерме [14], было показано, что добавление этанола (40%) в раствор МС способствовало ускорению транспорта красителя через эпидермальный барьер [15].

Целью данной работы является исследование транспорта МС, растворённого в дистиллированной воде и 50%-ном водном растворе этилового спирта, в дерме кожи крысы *ex vivo* и оценка эффективного коэффициента диффузии МС.

МЕТОДЫ И МАТЕРИАЛЫ

МС относится к группе тиазиновых красителей. Молекулярная масса составляет 432.32 г/моль, молекулярный вес 371.923. Химическая формула МС представлена на рисунке 1.

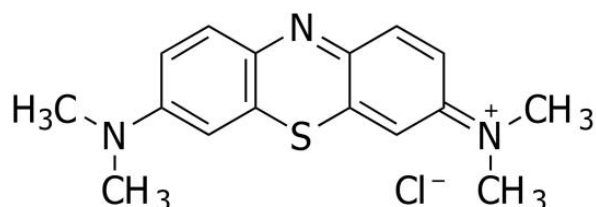


Рис. 1. Строение молекулы метиленового синего

В работе использовались водный и 50%-ный водно-спиртовой растворы МС. Концентрация красителя в растворах составила 0.5 мг/мл.

На рисунке 2 представлены спектры поглощения МС в водном (а) и 50%-ном водно-спиртовом (б) растворах. Полосы поглощения водного раствора имеют два пика на длинах волн (613 нм и 662 нм) и водно-спиртового раствора на длинах волн (603 нм и 663 нм). Наличие двух полос поглощения объясняется присутствием в растворах как мономерной, так и димерной форм красителя. В водном растворе преобладает димерная, а в водно-спиртовом – мономерная форма МС, что связано с повышением растворимости МС при добавлении в раствор этилового спирта.

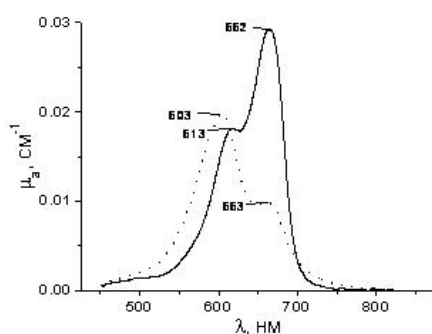


Рис. 2. Спектры поглощения МС в водном (пунктир) и 50%-ном водно-спиртовом (непрерывная кривая) растворах. Концентрация красителя в растворах 0.5 мг/мл

Исследования производились *ex vivo* на 10 образцах кожи белых лабораторных крыс, полученных в результате аутопсии в области бедра или спины различных животных в течение одного часа *postmortem*. До начала эксперимента полностью удалялся волосяной покров с помощью крема для депиляции. Подкожный жировой слой также тщательно удалялся. Размер образца составлял приблизительно $20 \times 20 \text{ мм}^2$. Толщина образцов измерялась с помощью микрометра до и после эксперимента. Средняя толщина образцов составляла $(0.70 \pm 0.02) \text{ мм}$ и $(0.62 \pm 0.03) \text{ мм}$ до начала эксперимента и $(0.65 \pm 0.02) \text{ мм}$ и $(0.68 \pm 0.02) \text{ мм}$ после окончания для водно-спиртового и водного растворов МС, соответственно.

Схема установки представлена на рисунке 3. Для проведения измерений образец кожи закреплялся на кювете в горизонтальном положении, раствор красителя взаимодействовал с кожей только со стороны дермы. С противоположной стороны образец соприкасался с поверхностью интегрирующей сферы (USB-ISP-50, OceanOptics, USA). Измерения производились на спектрометре USB4000-UV-NIR (OceanOptics, USA) в диапазоне длин волн 450-850 нм. В качестве источника света использовалась галогенная лампа HL-2000 (OceanOptics, США). Измерения проводились через каждые 5 минут в течение 2.5-3 часов для 50% водно-спиртового раствора и 5-6 часов для водного раствора МС.

Оценка эффективного коэффициента диффузии проводилась на основе измерения кинетики обратно рассеянного излучения образцом под действием раствора красителя. Для количественной оценки изменения содержания красителя в биоткани и определения эффективного коэффициента диффузии использовался метод, основанный на анализе кинетики изменения коэффициента поглощения биоткани в области полос поглощения красителя. Согласно работам [16-17] коэффициент отражения образца биоткани может быть описан с использованием выражения:

$$R(\lambda) = \frac{\mu'_s(\lambda)}{k_1 + k_2 \mu_a(\lambda)},$$

где k_1 и k_2 – калибровочные константы, учитывающие особенности геометрии освещения и сбора обратно рассеянного излучения, $\mu'_s(\lambda)$ – транспортный коэффициент рассеяния, $\mu_a(\lambda)$ – коэффициент поглощения, λ – длина волны.

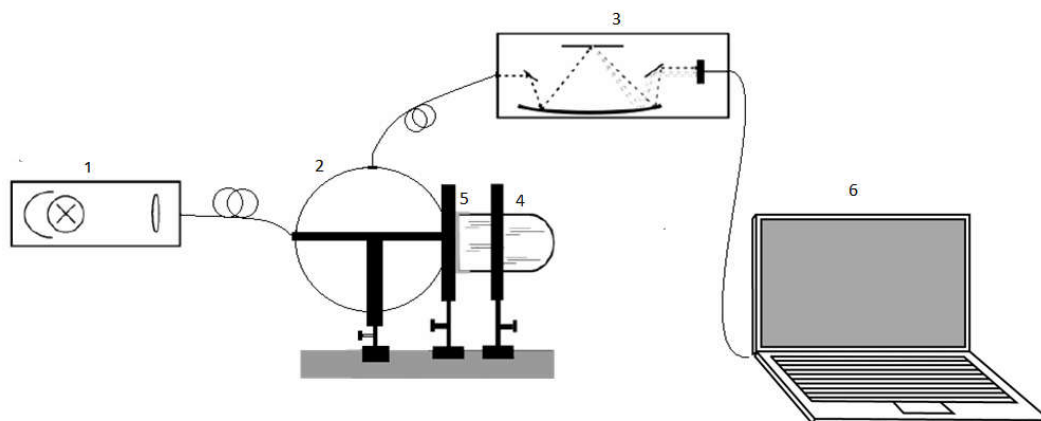


Рис. 3. Схема установки. 1 – галогенная лампа HL-2000, 2 - интегрирующая сфера USB-ISP-50, спектрометр USB4000-UV-NIR, 4 – кювета с раствором МС, 5 – образец биоткани на кювете, 6 – персональный компьютер.

В свою очередь транспортный коэффициент рассеяния может быть представлен в видимом диапазоне длин волн в виде степенной функции: $\mu'_s(\lambda) = A/\lambda^w$, где константы A и w определяются концентрацией рассеивателей, отношением показателя преломления рассеивателей к показателю преломления окружающей их среды и т.д. [18]. Очевидно, что волновой экспонент w , определяющий наклон степенной функции, может меняться вследствие дегидратации или набухания образца биоткани при взаимодействии с растворами красителя. Для компенсации данного явления в каждый момент времени, в работе [19], было предложено перейти от значений коэффициента отражения к значениям эффективной оптической плотности (ЭОП): $A = -\ln(R)$, с последующей аппроксимацией ЭОП полиномиальной зависимостью вне области полос поглощения красителя и вычитанием данной зависимости из спектров ЭОП, измеренных в каждый момент времени. Поскольку при проведении данных экспериментов использовались обескровленные образцы кожи, то данное вычитание учитывало собственное поглощение биоткани (предполагалось, что оно не изменяется в процессе измерений), и таким образом получалась спектральная зависимость ЭОП образца кожи ΔA , определяемая только влиянием поглощения красителя. Анализ кинетики данного процесса и позволил определить скорость транспорта красителя в биоткани.

Геометрически образец биоткани представлялся в качестве плоско-параллельной пластины конечной толщины. Так как края биоткани жестко закреплялись на кювете, а регистрация зондирующего излучения собиралась в центральной части образца, т.е. далеко от границ образца, краевыми эффектами пренебрегалось и, на основе второго закона Фика, решалась одномерная задача диффузии:

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}, \quad (1)$$

где $C(x,t)$ – концентрация красителя в образце биоткани, D – коэффициент диффузии, t – время, x – пространственная координата по толщине образца биоткани. Так как объем раствора МС значительно превышал объем образца кожи, то граничные условия имели вид:

$$C(0,t) = C_0 \text{ и } \frac{\partial C(l,t)}{\partial x} = 0, \quad (2)$$

где C_0 – концентрация красителя в растворе, l – толщина образца биоткани. Начальное значение концентрации отражает отсутствие красителя во всех точках образца до его взаимодействия с красителем, т.е.

$$C(x,0) = 0. \quad (3)$$

При усреднении по толщине образца, решение уравнения диффузии (1), с учетом граничных (2) и начального (3) условий, в первом приближении, имеет вид:

$$C(t) \approx C_0(1 - \exp(-t\pi D/l^2)) \quad (4)$$

Таким образом, величина разностной ЭОП ΔA может быть представлена в виде:

$$\Delta A(t, \lambda) = \mu_a^{MC}(t, \lambda)l = \mu_{a0}^{MC}C_0(1 - \exp(-t\pi D/l^2))l, \quad (5)$$

где μ_a^{MC} - коэффициент поглощения МС в биоткани, μ_{a0}^{MC} - коэффициент поглощения МС при концентрации 1 мг/мл.

Коэффициент диффузии D определялся путем минимизации целевого функционала:

$$f(D) = \sum_{i=1}^{N_i} (\Delta A(D, t_i) - \Delta A^*(t_i))^2, \quad (6)$$

где N_i – общее количество экспериментальных точек, полученное при регистрации кинетики ЭОП на выбранной фиксированной длине волны, $\Delta A(D, t_i)$ - эффективная оптическая плотность, рассчитанная по формуле (5), $\Delta A^*(t_i)$ - экспериментально измеренное значение эффективной оптической плотности в момент времени t . Для минимизации целевого функционала (6) использовался «комплексный» метод минимизации [20].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рисунке 4 представлены типичные спектры обратно рассеянного излучения (диффузного отражения) от образцов кожи в разные промежутки времени воздействия 50%-ного водно-спиртового (а) и водного раствора МС (б). Хорошо видно, что с течением времени происходит изменение формы спектров обратно рассеянного излучения. Данное изменение связано с уменьшением отражённого сигнала в диапазоне длин волн, соответствующем полосе поглощения МС, за счёт проникновения красителя вглубь кожи.

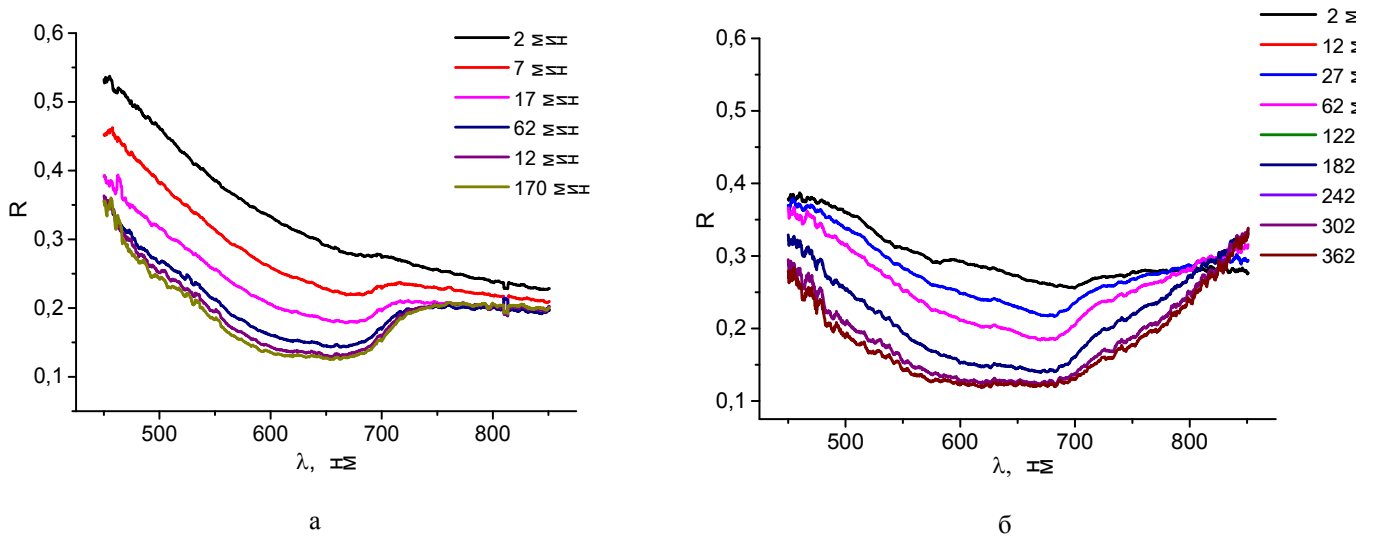


Рис. 4. Спектры диффузного отражения образцов кожи под действием 50%-ного водно-спиртового (а) и водного (б) растворов МС

Также можно заметить, что скорость изменения спектров постепенно снижается и, затем, практически прекращается после приблизительно 120 мин при использовании в качестве растворителя водно-спиртового раствора МС и после приблизительно 300 мин при использовании водного раствора МС. Это связано с прекращением проникновения красителя в кожу, что соответствует полному окрашиванию ткани.

Следует отметить, что проникновение растворителя влияет на рассеивающие свойства биоткани. Как следует из измерений толщины образцов до и после эксперимента, водно-спиртовой раствор вызывает сжатие ткани, а водный – набухание. На рисунке 4 (а) хорошо видно небольшое снижение коэффициента диффузного отражения на длинах волн за пределами полосы поглощения красителя. Такое поведение свидетельствует об уменьшении рассеяния биоткани, по-видимому, за счёт увеличения плотности упаковки волокон при сжатии образца.

При набухании ткани под действием воды, коэффициент диффузного отражения постепенно увеличивается, что можно видеть на рисунке 4 (б) в спектральной области выше 800 нм.

На рисунке 5 представлены результаты вычислений разностной ЭОП(ΔA) для одного образца кожи из каждой группы для 50%-ного водно-спиртового(а) и водного(б) растворов МС. Из рисунка следует, что помимо увеличения ЭОПкожи в полосе поглощения МС при окрашивании ткани водным раствором красителя, происходит изменение соотношения мономеров и димеров в ткани. Известно, что при увеличении концентрации МС в растворе доля молекул красителя в димерной форме увеличивается. Константа димеризации составляет 0.17 мМ [21]. Изменение формы спектров свидетельствует об увеличении концентрации красителя в образце и переходе молекул красителя из мономерной формы в димерную.

На рисунке 6 продемонстрирована типичная кинетика изменения разностной ЭОП образцовокожи, измеренная на длинах волн, соответствующих полосам поглощения МС, под действием 50%-ного водно-спиртового (а) и водного (б) растворов красителя. Как видно из представленных рисунков, процесс транспорта МС в коже носит сложный характер, т.к. сопровождается взаимодействием молекул красителя с компонентами биоткани, что приводит к димеризации красителя, поэтому использование понятия коэффициента диффузии в его классическом представлении в данном случае неприменимо. Для определения скоростных характеристик окрашивания биоткани можно использовать «эффективный коэффициент диффузии», который оценивается по изменению оптических параметров биоткани в процессе окрашивания. Данное представление является несколько упрощённым, т.к. не учитывает особенности молекулярного взаимодействия красителя с биотканью, однако позволяет получить представление о скорости окрашивания биоткани в целом.

Эффективный коэффициент диффузии МС определялся на основе анализа кинетики разностной ЭОП. Для каждого образца вычисления выполнялись на пяти длинах волн в диапазоне 600-700 нм, полученные значения усреднялись. Среднее значение и среднеквадратичный разброс данных, усредненных по образцам биоткани составили $(1.98 \pm 0.06) \times 10^{-6}$ см²/с для водного раствора МС и $(3.34 \pm 0.07) \times 10^{-6}$ см²/с для 50%-ного водно-спиртового раствора МС.

Результаты оценки эффективного коэффициента диффузии показывают, что в среднем скорость окрашивания кожи МС при использовании в качестве растворителя 50% водно-спиртового раствора в 1.6 раз выше, чем при использовании водного раствора. Это может быть связано, во-первых, со свойствами этилового спирта увеличивать проницаемость биотканей [15,22], а, во-вторых, со значительной димеризацией МС в ткани при использовании водного раствора красителя. В работе [23] представлен коэффициент диффузии раствора МС в слизистой оболочки верхнечелюстной пазухи человека. Среднее значение коэффициента диффузии для водного раствора МС с концентрацией красителя 50 мкг/мл составило $(4.8 \pm 2.9) \times 10^{-7}$ см²/с. Значительное различие коэффициентов диффузии объясняется различием строения тканей слизистой оболочки и кожи. Так как структура слизистой оболочки более плотная, чем структура кожи, то значение эффективного коэффициента диффузии также оказывается ниже.

В работе [14] среднее значение коэффициента диффузии МС, растворённого в физиологическом растворе с концентрацией 1 мг/мл, составило 2.2×10^{-8} см²/с, что также значительно меньше, чем полученное в настоящей работе. Это может быть связано с неточностью определения коэффициента диффузии в работе [14] с помощью оценки окраски микроскопических образцов кожи.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе были измерены коэффициенты диффузии водного и 50%-ного водно-спиртового растворов МС с концентрацией красителя 0.5 мг/мл в коже крысы *ex vivo*. Значение коэффициента диффузии составило $(1.98 \pm 0.06) \times 10^{-6}$ см²/с для водного раствора и $(3.34 \pm 0.07) \times 10^{-6}$ см²/с для 50%-ного водно-спиртового раствора МС. Добавление этилового спирта в растворитель приводит к увеличению коэффициента диффузии красителя в среднем в 1.6 раз.

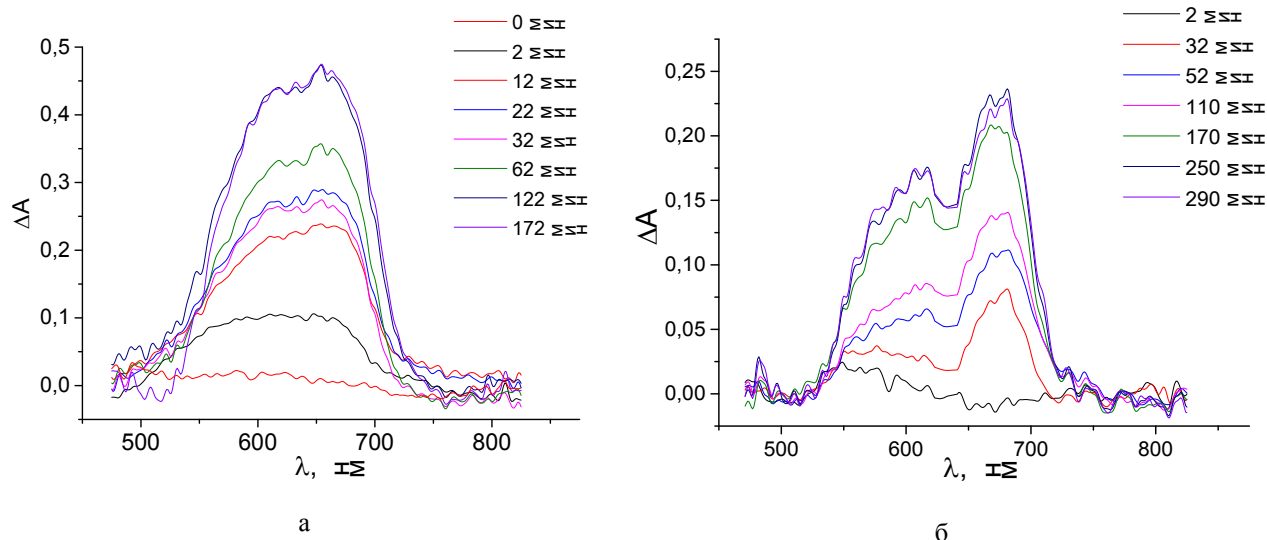


Рис. 5. Спектры разностной эффективной оптической плотности образцов кожи в разные промежутки времени под действием 50%-ного водно-спиртового (а) и водного (б) растворов МС

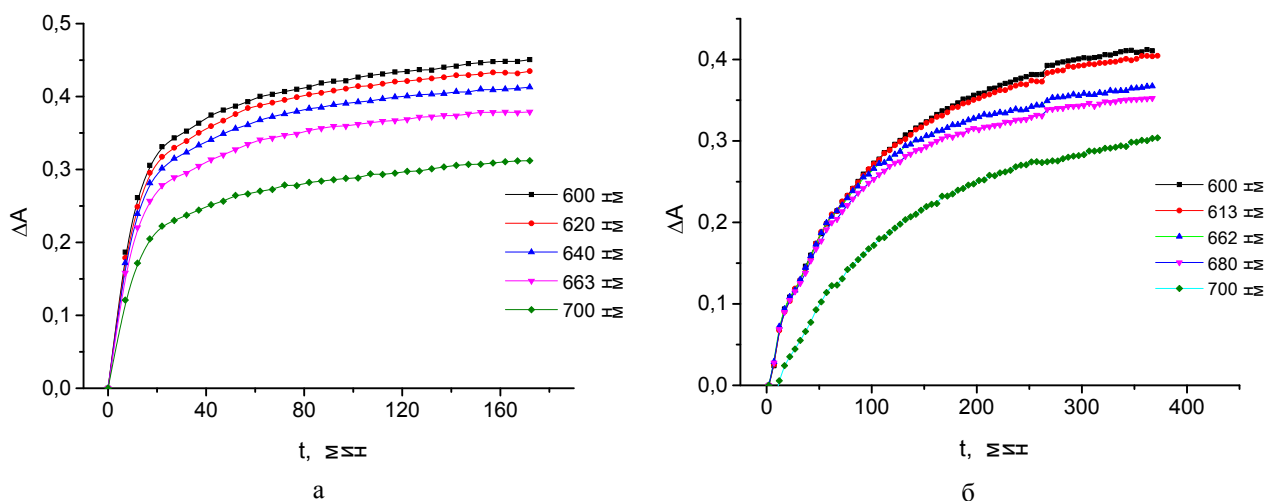


Рис. 6. Кинетика разностной эффективной оптической плотности образцов кожи на разных длинах волн под действием 50%-ного водно-спиртового (а) и водного (б) растворов МС

Литература

1. Al-Arashi M.Y., Salomatina E., Yaroslavsky A.N. // *Lasers Surg. Med.* 2007, Vol. 39, p. 696-705.
2. Yaroslavsky A.N., Feng X., Neel V.A. // *Lasers in Surgery and Medicine* 2017, Vol. 49(9), p. 43-54.
3. Yaroslavsky A.N., Park J., Mroz P. et al. // *J. Biomedical Optics* 2010, Vol. 15(2), p. 026023.
4. Yaroslavsky A.N., Neel V., Anderson R.R. // *Optics letters* 2004, Vol. 29(17), p. 2010-2012.
5. Yaroslavsky A.N., Neel V., Anderson R.R. // *The Journal of investigative dermatology* 2003, Vol. 121(2), p. 259-266.
6. Mordon S., Devoisselle J.D., Mitchell V. // *Proc. SPIE* 2002, Vol. 4609, p. 37-46
7. Su Y., Xie Y., Nan G. // *J. Hand Surg. Am.* 2015, Vol. 40(4), p. 685-687.
8. Cuccia D.J., Bevilacqua F., Durkin A.J. et al. // *Appl. Opt.* 2003, Vol. 42(16), p. 2940-2950.
9. Ширяев А.А., Мусаев Г.Х., Лощенов М.В. и др. // *Biomedical Photonics* 2016, Т.5, №4, с. 15-24.
10. Baran T.M., Giesselman B.R., Hu R. et al // *Lasers Surg. Med.* 2010, Vol. 42(8), p. 728-735.
11. Usacheva M.N., Teicher M.C., Biel M.A. // *Journal of Photochemistry and Photobiology* 2003, Vol. 71, p. 87-98.
12. Genina E.A., Bashkatov A.N., Chikina E.E. et al. // *Laser Physics* 2006, Vol. 16, №7, p. 1128-1133.
13. George S., Kishen A. // *J. Biomed. Opt.* 2007, Vol. 12(3), p. 0340291-10.
14. Genina E.A., Bashkatov A.N., Tuchin V.V. // *Proc. SPIE* 2003, Vol. 5486, p. 315-323.
15. Genina E.A., Bashkatov A.N., Tuchin V.V. // *Medical Laser Application* 2008, Vol.13, p.31-38.
16. Zonios G., Bassukas I., Dimou A. // *Appl. Opt.* 2008, Vol. 47(27), p. 4965-4973.
17. Zonios G., Dimou A. // *Appl. Opt.* 2010, Vol. 49(27), p. 5026-5031.
18. Bashkatov A.N., Genina E.A., Kochubey V.I. et al // *J.of Physics D: Applied Physics* 2005, Vol. 38(15), p. 2543-2555.
19. Mourant J.R., Johnson T.M., Los G. et al. // *Phys. Med. Biol.* 1999, Vol. 44, p. 1397-1417.
20. Б. Банди. Методы оптимизации // Радио и связь, 1998.

21. Bergmann K., O'Konski C.T. // J. Phys. Chem. 1963, Vol. 67, p. 2169-2177.
 22. Sznitowska M. // Int. J. Pharmacol. 1996, Vol. 137, p. 137-140.
 23. Генина Э.А., Башкатов А.Н., Чикина Е.Э. и др. // Биофизика 2007, Т. 52, № 6, с. 1104-1111.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ТЕОРИИ КОЛЕБАНИЙ К ОПИСАНИЮ КОМПЛЕКСОВ ИЗ МАГНИТОСОМ И ФИЛАМЕНТОВ ЦИТОСКЕЛЕТА

А.С. Дронкин, Б. А. Медведев

Саратовский государственный университет

Рассмотрена возможность использования классического подхода для описания комплексов из магнитосом и филаментов цитоскелета. Предложена модель комплексов в виде системы связанных осцилляторов с дальнейшим применением методов теории колебаний и волн для анализа ее динамики. Отмечены преимущества данного подхода по сравнению с квантово-механическим, а также намечены дальнейшие шаги к его совершенствованию.

ВВЕДЕНИЕ

Магнитосомы — клеточные органоиды, однодоменные магнитные наночастицы с магнитным моментом, превышающим элементарный на 7-9 порядков. Они представляют собой магнитное ядро, состоящее либо из магнетита (Fe_3O_4), либо из грейгита (Fe_3S_4) и покрытое липидным бислоем. Кристаллы магнетита имеют кубическую форму (обратная шпинель). Магнитосомы встречаются во многих видах живых организмах, включая магнитотактических бактерий (МТБ), птиц, рыб, насекомых [1]. Их наличие объясняет такое явление как магнитотаксис, то есть способность ориентироваться в пространстве, основываясь на информации о внешнем магнитном поле. В 90-х годах магнитосомы были найдены в тканях мозга человека [2]. Их концентрация в тканях мозга человека составляет приблизительно 5×10^6 кристаллов на грамм живого вещества, а в мозговой оболочке может быть более 10^8 кристаллов на грамм. Размеры магнитосом у человека варьируются, в предельном случае достигая 200 нм, но основная часть (около 90%) наночастиц имеет размер от 10 до 70 нм [3].

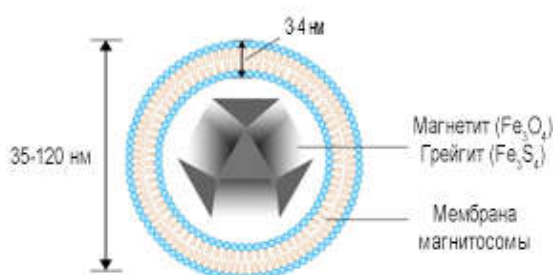


Рис.1. Схема структуры магнитосомы.

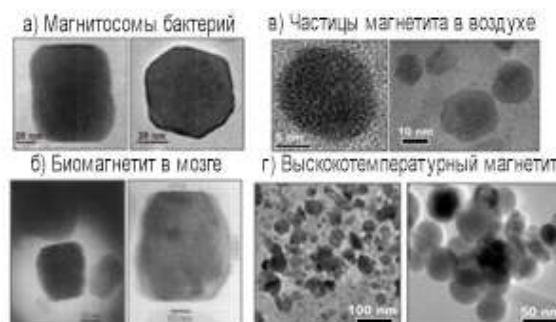


Рис.2. Примеры наночастиц из магнетита

Стоит отметить, что форма магнитосом у бактерий и у магнитосом в тканях мозга практически идентична и несколько отличается от магнетита, получаемого искусственно, что позволяет предполагать биогенное происхождение магнетита у человека (рис. 2).

МОДЕЛЬ КОМПЛЕКСОВ

Как уже было упомянуто, магнитосомы располагаются непосредственно в тканях головного мозга человека. Клетки головного мозга делятся на нейроны и глиальные клетки. В данной работе будем предполагать, что магнитосомы находятся внутри нейронов и связаны с цитоскелетом. Такое предположение является возможным, исходя из сравнения линейных размеров клетки и магнитосом. Рассмотрим несколько подробнее структуру цитоскелета. В цитоскелете выделяют несколько основных структур, которые заметны на фотографиях, полученных с использованием электронной микроскопии - это микрофиламенты, промежуточные филаменты, микротрубочки (рис.3). Промежуточные филаменты нейронов носят названия нейрофиламентов. Одной из их функций является поддержания упорядоченной структуры в расположении органелл внутри клетки, поэтому логично предположить, что именно с ними в ассоциации находятся магнитосомы. Нейрофиламенты образуют довольно плотную сеть в аксоне, в которой могут «запутываться» магнитосомы. К такому выводу можно прийти, сравнивая линейные размеры магнитосом и ячеек сети нейрофиламентов. Именно комплексы такого вида мы предлагаем рассматривать в данной работе.



Рис. 3. Основные структурные элементы цитоскелета.

При определенных условиях может происходить ослабление связи между цитоскелетом и магнитосомами, в результате чего последние способны терять свое устойчивое положение и переходить к неконтрольному дрейфу во внутриклеточном пространстве. Это повлечет нарушение гомеостаза и механический стресс клетки, что в свою очередь может вызывать гиперактивацию механочувствительных кальциевых каналов. В результате этого произойдет увеличение частоты осцилляций кальция в клетке, что впоследствии приведет к запуску апоптоза. Таким образом, магнитосомы могут стать причиной возникновения нейродегенеративных заболеваний, таких как болезни Альцгеймера и Паркинсона [4], чем и определяется актуальность исследования методов описания комплексов из магнитосом и филаментов цитоскелета.

КЛАССИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОПИСАНИЮ КОМПЛЕКСА

В работе [5] было рассмотрено применение квантово-механического подхода к описанию комплексов из магнитосом и белков цитоскелета. Приведенный в ней метод 2-х частичной матрицы плотности дает возможность анализировать силу связи между двумя квазимолекулами, однако его сложно реализовать для рассматриваемых нами комплексов, так как в них взаимодействие происходит между большим количеством элементов. Более того, в рамках данного метода необходимо предполагать, что магнитосома является квазимолекулой, что может быть некорректным, если размеры последней окажутся больше, чем 100 нм. С другой стороны, при применении методов классической физики мы не сталкиваемся с такого рода ограничениями.

Составим простую модель. Будем рассматривать комплекс из магнитосом и филаментов цитоскелета как систему связанных осцилляторов. Тогда для описания ее динамики можно использовать методы из теории колебаний и волн [6,7]. Заменим силы, действующие на магнитосому в потенциальном поле, созданном сетью нейрофиламентов и ближайшими элементами ансамбля магнитосом, на упругие силы, подчиняющиеся закону Гука. Тогда мы можем считать, что динамика магнитосомы подобна динамике сложного пружинного маятника. Для простоты будем рассматривать взаимодействие только двух магнитосом между собой и с одной нитью нейрофиламентов. В результате мы получим систему связанных осцилляторов, которая схематично представлена на рисунке 4.

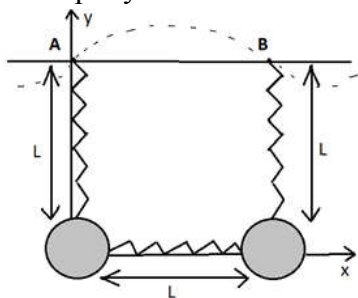


Рис. 4. Схематичное изображение рассматриваемой системы

Поведение нити нейрофиламентов будем считать подобным поведению шнура, вдоль которого бежит волна вида $A \cdot \sin(\omega t - kx + \phi)$. Конкретизируем, что точки крепления пружин (A и B на рис. 4) находятся на расстоянии половины длины волны, а движение магнитосом не оказывает влияния на динамику выделенной нами для рассмотрения части цитоскелета. Также будем считать, что все взаимодействия между элементами комплекса однотипны, то есть в представленной модели все пружины являются одинаковыми, имеют жесткость K , и длину в состоянии покоя L . Получаемая в итоге приведенных упрощений модель, описывается следующей системой уравнений:

$$\begin{aligned} \ddot{x}_1 &= \frac{k}{m} \left(\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2} - L \right) \\ \ddot{y}_1 &= \frac{k}{m} \left(\sqrt{(L - y_1)^2 + (x_1)^2} + A \sin(\omega t) - L \right) \\ \ddot{x}_2 &= -\frac{k}{m} \left(\sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2} - L \right) \\ \ddot{y}_2 &= \frac{k}{m} \left(\sqrt{(L - y_2)^2 + (x_2 - L)^2} + A \sin(\omega t + \phi) - L \right) \end{aligned} \quad (1)$$

Решая ее методами вычислительной техники, предварительно конкретизировав такие параметры как L , K/m , A , ω и переходя к безразмерным переменным, мы можем получить значения координат и скоростей для каждого момента времени. Этого достаточно для наглядной демонстрации динамики элементов составленной модели. В частности, для некоторого набора параметров, были получены следующие временные реализации и фазовые траектории, соответствующие периодическому движению первой «магнитосомы» вдоль оси X (рис.5) и вдоль оси Y (рис.6).

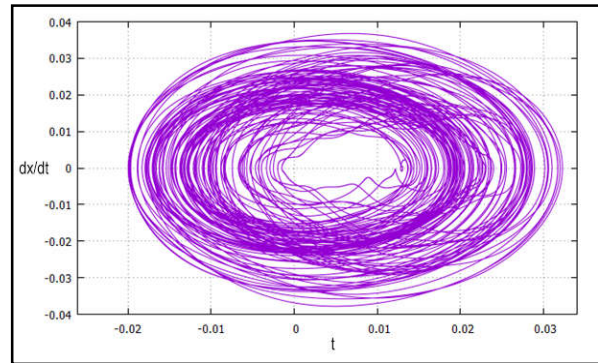
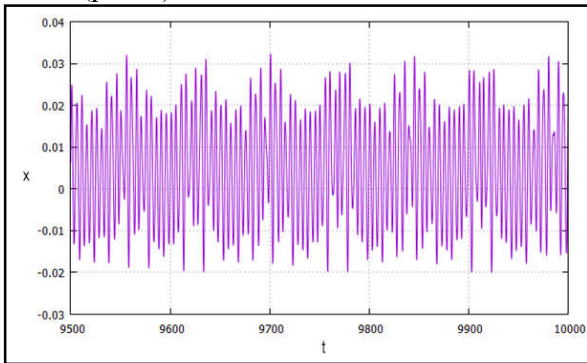


Рис.5. Временная реализация и фазовый портрет, описывающие колебания магнитосомы вдоль оси X

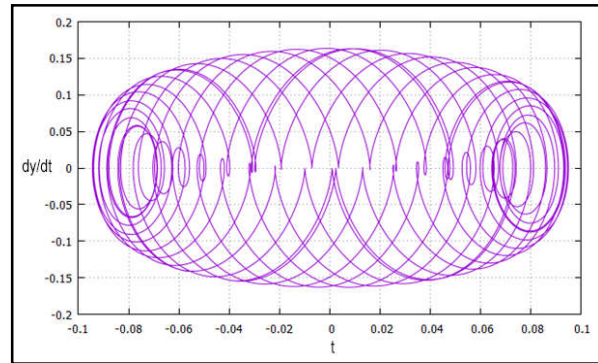
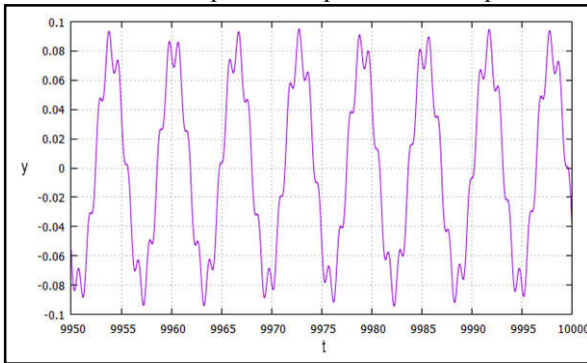


Рис.6. Временная реализация и фазовый портрет, описывающие колебания магнитосомы вдоль оси Y.

Анализируя временные реализации и фазовые траектории, можем отметить следующие закономерности. Колебания вдоль оси X имеют сходство с гармоническими колебаниями, модулированными по амплитуде. Изменение фазового портрета происходит между устойчивым и неустойчивым фокусом, что в сумме дает изображение, несколько напоминающее набор замкнутых траекторий типа неустойчивого цикла (рис.5). Закон, по которому происходит изменение амплитуды колебаний, не является очевидным, несколько напоминая случайный процесс. Вдоль оси Y (см. рис.6) движение также является периодическим с переменной амплитудой, однако его вид отличен от того, что рассматривался на рис.5. Можно сделать вывод, что «магнитосома» движется некоторыми рывками, то замедляясь, то ускоряясь, и довольно часто меняя направление своего движения. При этом следует отметить, что в первом приближении, в предлагаемой модели не были учтены условия, при которых мог бы произойти отрыв «магнитосомы» от цитоскелета, поэтому утверждать, способен ли такой характер движения вызывать разрыв связи преждевременно.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотренная модель служит для демонстрации метода. Однако, при описании комплекса из магнитосом и белков цитоскелета системой связанных осцилляторов был сделан ряд упрощений,

которые, строго говоря, делают модель достаточно приближенной, в связи с чем в дальнейшем планируется предпринять следующие шаги:

1. Задать взаимодействие между элементами комплекса потенциалом Леннарда-Джонса, или же использовать его только для описания связи между магнитосомами, а их крепление к сети нейрофиламентов рассматривать с точки зрения белкового взаимодействия.
2. Увеличить количество элементов в модели, то есть брать более двух магнитосом и не одну нить нейрофиламента, а «ячейку» сети.
3. Перейти к рассмотрению динамики не в плоскости, а в пространстве.

Тогда мы также получим систему связанных осцилляторов, которую сможем анализировать, используя те же методы, что применялись в данной работе, однако динамика элементов будет более приближена к реальному поведению магнитосом в рассматриваемых комплексах. Также станет возможным анализ условий и динамики процесса отрыва магнитосом от цитоскелета.

Литература

1. Киршвинк Дж. Биогенный магнетит и магниторецепция. Новое о биомagnetизме/Под ред. Дж. Киршвинка, Д. Джонса, Б. Мак-Фаддена в 2т.М.: Мир, 1989,Т.2. - 525 с.
2. Joseph L. Kirschvink, Atsuko Kobayashi- Kirschvink and Barbara J. Woodford // Biophysics 1992, Vol. 89,p. 7683-7687.
3. Бинги В.Н., Рубин А.Б. //Биомедицинские технологии и радиоэлектроника 2007, № 2-4, с.63—76.
4. Искусных И. Ю., Попова Т. Н. // Биомедицинская химия 2010, Т. 56, Вып. 5, с. 530-539.
5. Дронкин А.С., Медведев Б.А., Бочкарева Т.В. / Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM-2016: материалы Международного симпозиума и Международной молодежной научной школы SaratovFallMeeting2016 / под ред. Г. В. Симоненко, В. В. Тучина. /С.: Новый ветер, 2016, С. 185-189.
6. Рабинович М. И., Трубецков Д. И. Введение в теорию колебаний и волн. Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2000, 560 с.
7. Анищенко В.С. Знакомство с нелинейной динамикой: Лекции соросовского профессора: Учебное пособие. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2002, 144 с.

ГОЛОГРАФИЯ И ВОЛОКОННАЯ ОПТИКА**ЭФФЕКТЫ ДЕКОРРЕЛЯЦИИ В ЦИФРОВОЙ ГОЛОГРАФИЧЕСКОЙ
ИНТЕРФЕРОМЕТРИИ РАССЕИВАЮЩИХ ОБЪЕКТОВ***Б.А. Гризбил^{1,2}, П.В. Рябухо^{1,2}, Л.А. Максимова¹, В.П. Рябухо^{1,2}*¹ Институт проблем точной механики и управления РАН² Саратовский государственный университет

Экспериментально исследован апертурный эффект декорреляции спекл-полей в цифровой голографической интерферометрии, вызываемый смещением дифракционного спекл-модулированного поля рассеивающего объекта в плоскости апертуры оптической системы. Исследованы зависимости степени декорреляции от размеров и формы апертуры объектива в схеме записи голограмм сфокусированного изображения. По результатам экспериментов построены графики контраста полос интерференционных изображений, восстановленных с двухэкспозиционных голограмм, в зависимости от величины смещения объектного поля в апертуре объектива. Для реализации метода цифровой голографической интерферометрии разработан программный интерфейс формирования голографических интерферограмм с возможностями обработки и корректировки пространственного спектра цифровых голограмм.

ВВЕДЕНИЕ

Методы лазерной голографической интерферометрии – аналоговой и цифровой [1-9], позволяют выявлять и количественно определять фазовые возмущения в объектном волновом поле, вызываемые микросмещениями поверхности объекта [2-8]. Переменные в пространстве фазовые возмущения в области поверхности объекта и, соответственно, в области изображения этой поверхности, определяют формирование соответствующей системы интерференционных полос – голографической интерферограммы, при взаимном наложении и интерференции объектных волновых полей или их численных образов, восстановленных с голограмм. Кроме фазовых возмущений в объектном волновом поле могут возникать разного рода декорреляционные эффекты [10-12], так что в определенной степени нарушается взаимная корреляция интерферирующих полей и, как следствие, снижается контраст наблюдаемых интерференционных полос.

Наиболее возможными причинами взаимной декорреляции интерферирующих спекл-модулированных полей в голографической интерферометрии рассеивающих объектов являются следующие процессы.

Прежде всего, декорреляция может быть вызвана изменением микроструктуры рассеивающей поверхности объекта, обусловленным, например, пластической деформацией изучаемого объекта под действием нагрузки, воздействием на поверхность агрессивной среды и ее коррозией, химическими процессами на поверхности и т.д. При стохастическом изменении микроструктуры поверхности стохастически изменяется и спекл-структура рассеянного поверхностью лазерного излучения и, как следствие, возникает декорреляция объектного поля. Декорреляция интерферирующих полей снижает контраст полос голографических интерферограмм, отражающих детерминированные смещения поверхности, вплоть до полного их исчезновения при полной декорреляции полей.

Другая причина возникновения взаимной декорреляции спекл-полей связана с апертурными ограничениями в оптических схемах записи голограмм – выходом из апертуры оптической системы части дифракционного объектного поля и входом в апертуру другой части дифракционного поля.

Кроме того взаимная декорреляция спекл-полей может быть вызвана непосредственно самим смещением рассеивающей поверхности, в результате которого претерпевает смещение в пространстве спекл-модулированное объектное поле, в том числе и в плоскости восстановленного изображения поверхности. При наложении друг на друга взаимно смещенных спекл-полей возникает их взаимная декорреляция.

На практике голографической интерферометрии возможны сочетания попарно или всех трех вышеназванных причин декорреляции объектных спекл-полей.

Апертурные эффекты декорреляции спекл-полей в области изображения объекта возникают при нормальных, но переменных по поверхности объекта, смещениях, таких как наклоны поверхности, повороты, изгибные деформации и т.п. В этом случае эффекты декорреляции обусловлены тем или иным поперечным смещением дифракционного поля в апертуре оптической

системы. В данной работе изучались апертурные эффекты декорреляции спекл-полей для различных форм и размеров апертуры объектива голографической схемы.

СХЕМНЫЕ РЕШЕНИЯ ЦИФРОВОЙ ГОЛОГРАФИЧЕСКОЙ ИНТЕРФЕРОМЕТРИИ СМЕЩЕНИЙ РАССЕИВАЮЩЕГО ОБЪЕКТА

В работе использовалась оптическая схема записи цифровых голограмм сфокусированного изображения объекта (рис.1) и специализированный алгоритм обработки цифровых голограмм, формирования и визуализации интерферограмм по результатам компьютерной обработки серии цифровых голограмм, соответствующих различным положениям поверхности объекта.

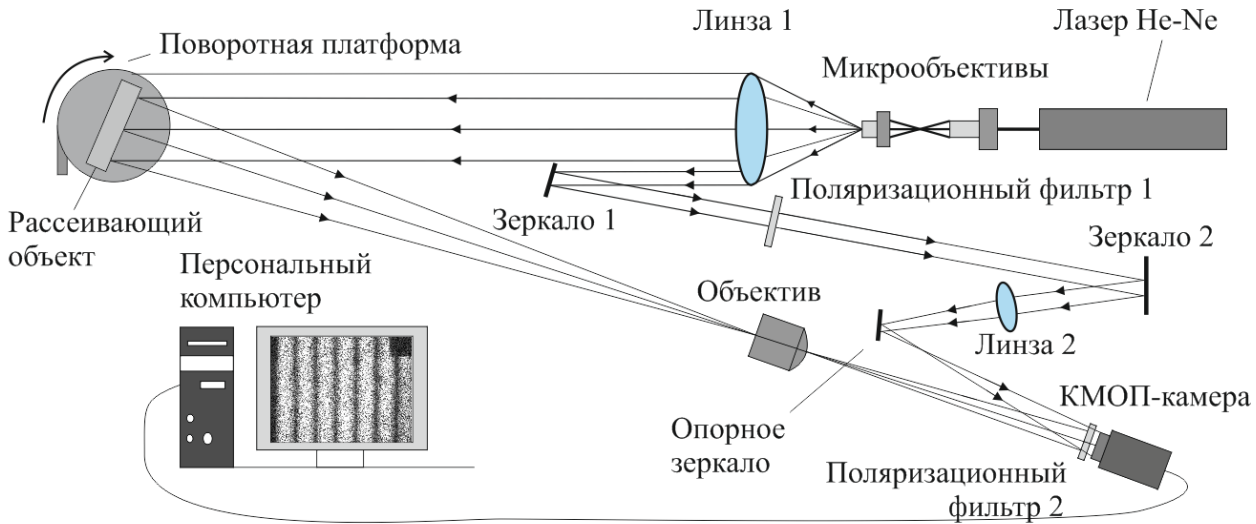


Рис. 1. Оптическая схема записи голограмм сфокусированного изображения объекта и реализация метода голографической интерферометрии.

В качестве источника излучения использовался одномодовый He-Ne лазер, формирующий поперечно пространственно когерентный пучок света с длиной волны колебаний 632.8 нм с длиной когерентности $l_c \sim 150$ мм. При помощи системы микрообъективов и линзы 1 создавался коллимированный пучок лазерного излучения. Основная часть этого пучка - предметного, отразившись от исследуемого объекта, проходила через апертуру заданной формы и размера, а затем через объектив и поляризационный фильтр 2 падала на КМОП матрицу цифровой фотокамеры, где формировалось сфокусированное изображение объекта. На участке схемы линза 1 - исследуемый объект из коллимированного лазерного пучка света с помощью малого зеркала 1 выделялся опорный пучок, который последовательно проходил через поляризационный фильтр 1, отражался от зеркала 2, фокусировался с помощью линзы 2 и, отразившись от опорного зеркала и пройдя через поляризационный фильтр 2, падал на матрицу КМОП камеры, где складывался и интерферировал с предметной волной. В результате прохождения опорного пучка через линзу 2 формируется квазисферическая опорная волна. Для корректной записи голограмм необходимо выравнивание длин оптических путей предметного и опорного с точностью до долей длины временной когерентности – примерно с точностью 10 - 20 мм. Используемая в наших экспериментах цифровая монохромная КМОП-камера (THORLABS DCU223M) дает возможность регистрации до 30 кадров в секунду при 1280x768 пикселей. Период расположения пикселей составляет 4.8 мкм при физических размерах матрицы 5x4 мм. Разрешающую способность матричного фотодетектора определяет пространственный период расположения пикселей матрицы, который ограничивает возможный угол падения опорной волны на матрицу величиной примерно 5° - в таком случае средний пространственный период интерференционных полос Λ записываемой голограммной структуры примерно равен $\Lambda \approx \lambda / \sin \theta \approx 7.2$ мкм. Полученная цифровая голограмма загружалась в компьютер и в дальнейшем при помощи специального программного обеспечения обрабатывалась для получения интерференционного изображения – интерферограммы - поверхности объекта с системой полос, отражающих смещения точек поверхности объекта.

В качестве рассеивающего объекта использовался однородный металлический параллелепипед, одна сторона которого выкрашена равномерно в серый цвет металлизированной краской для увеличения отражения и имела рассеивающий свет микроструктуру. Устанавливался параллелепипед на специальную поворотную платформу так, чтобы ось вращения совпадала с поверхностью объекта и проходила через ее центр. Поворотная платформа снабжена микрометрическим винтом для отсчета угла поворота с точностью 0.6 угловых минут.

ПРОЦЕДУРА РЕКОНСТРУКЦИИ И ФОРМИРОВАНИЯ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННОГО ИЗОБРАЖЕНИЯ РАССЕИВАЮЩЕГО ОБЪЕКТА

Серия последовательно записанных цифровых голограмм подвергалась численной обработке для получения интерференционных изображений. Процесс численной обработки голограмм производился с помощью специально разработанного программного интерфейса, позволяющего быстро и без особых усилий восстанавливать и корректировать спектр пространственных частот голограммы, проводить полосовую пространственно частотную фильтрацию, восстанавливать интерференционное изображение и сохранять полученные результаты на каждом этапе. В основе данного программного интерфейса лежит четыре основных этапа [13].

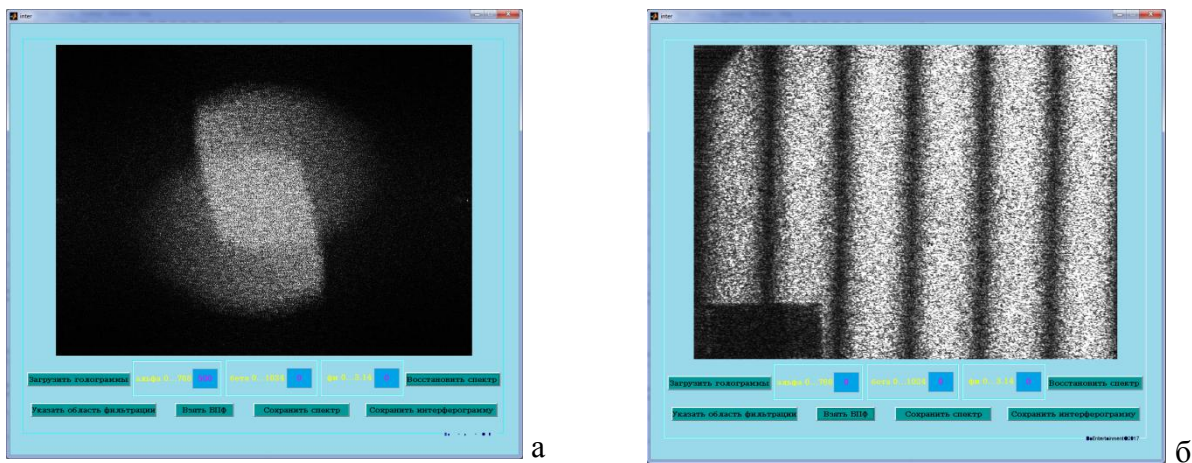


Рис. 2. Внешний вид программного интерфейса: а - пример восстановленного пространственного спектра с откорректированным положением его объектной составляющей; б - восстановленное интерференционное изображение – голографическая интерферограмма.

Первый этап состоял в представлении в дискретном матричном виде изображения голограмм по интенсивности оптического поля $I(x,y)$ и далее в сложении двух матриц голограмм, соответствующих двум различным пространственным положениям поверхности объекта. После сложения полученная суммарная матрица того же размера подвергалась алгоритму быстрого дискретного преобразования Фурье. В результате получался комплексный фурье-массив, представляющий собой пространственный спектр суммы двух голограмм. В соответствие с уравнением голографии [1-6]

$$I_j(x, y) = I_{Sj}(x, y) + I_R(x, y) + U_{Sj}(x, y)U_R^*(x, y) + U_{Sj}^*(x, y)U_R(x, y), \quad (1)$$

где $I_{Sj}(x, y)$, $I_R(x, y)$ и $U_{Sj}(x, y)$, $U_R(x, y)$ - соответственно, интенсивности и комплексные амплитуды поля изображения поверхности объекта и поля опорной волны при записи одной j -той голограммы, пространственный спектр как отдельной, так и суммарной голограммы будет содержать четыре составляющих, соответствующих каждому слагаемому в (1).

Поскольку в ходе численной обработки использовался алгоритм быстрого преобразования Фурье, то пространственный спектр - числовая матрица фурье-массива имеет тот же размер, что и матрицы цифровых голограмм, размер которых определяется размером матричного фотодетектора в пикселях.

Во втором этапе производилась полосовая пространственная частотная фильтрация полученного спектра с целью выделения спектральных составляющих, соответствующих объектным волновым полям – в выражении (1) соответствующих третьему или четвертому слагаемым.

В третьем этапе производилась второе (обратное) фурье-преобразование отфильтрованной части суммарного спектра голограмм для восстановления комплексной амплитуды суммарного волнового поля изображения объекта.

На четвертом этапе производилось формирование интерферограммы - интерференционного изображения платы по интенсивности - квадрату модуля комплексной амплитуды суммарного поля, отражающего смещение поверхности объекта, например, при повороте его на определенный достаточно малый угол, что использовалось в работе для исследования апертурных декорреляционных эффектов.

ИССЛЕДОВАНИЕ АПЕРТУРНОГО ЭФФЕКТА ДЕКОРРЕЛЯЦИИ СПЕКЛ ПОЛЕЙ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ РАЗМЕРА АПЕРТУРЫ

Взаимная декорреляция комплексных амплитуд полей изображений поверхности объекта определяет снижение контраста интерференционных полос средней интенсивности, образующихся в восстанавливаемом интерференционном изображении - интерферограмме. Контраст интерференционных полос на интерферограмме отражает степень взаимной корреляции комплексных амплитуд объектных полей $U_{Sj}(x, y)$ и $U_{Sm}(x, y)$, образующих интерферограмму. При равенстве средних интенсивностей полей контраст полос численно равен степени взаимной корреляции полей. Для определения контраста полос, полученные цифровые интерферограммы подвергались численной обработке и строились графики осцилляции среднего значения интенсивности интерференционной картины (усредненной вдоль интерференционных полос) поперек полосам. В наших экспериментах получали строго вертикальные интерференционные полос (рис.3) – поэтому усреднение интенсивности поля в интерферограмме выполнялось вдоль столбцов матрицы – вдоль полос, а распределение средней интенсивности в интерферограмме строилось вдоль строк матрицы – поперек полосам, в зависимости от номера столбца интерференционного изображения.

Выражение для средней интенсивности $\langle I(x, y) \rangle$ в интерференционной картине можно записать в следующем виде [11]

$$\langle I(x, y) \rangle = \langle I_{Sj}(x, y) \rangle + \langle I_{Sm}(x, y) \rangle + 2 \sqrt{\langle I_{Sj}(x, y) \rangle \langle I_{Sm}(x, y) \rangle} \left| \mu_{jm}(\Delta\xi) \right| \cos(\Delta\varphi_{jm}(x, y)), \quad (2)$$

где $\mu_{jm}(\Delta\xi)$ - комплексный коэффициент взаимной корреляции комплексных амплитуд полей изображений объекта $U_{Sj}(x, y)$ и $U_{Sm}(x, y)$, соответствующих j -тому и m -тому положениям поверхности объекта, $\Delta\xi$ величина смещения объектного поля в апертуре объектива, формирующего изображение поверхности объекта, $\Delta\varphi_{jm}(x, y)$ - разность фаз полей изображений поверхности объекта в j -том и m -том её положениях (в наших экспериментах возникала линейно изменяющаяся разность фаз вдоль горизонтальной оси x , $\Delta\varphi_{jm}(x, y) = (2\pi/\lambda)\Delta\alpha_{jm}x$, λ - длина волны, $\Delta\alpha_{jm}$ - угол взаимного наклона поверхностей объекта в его различных положениях j и m , $\langle I_{Sj}(x, y) \rangle$ и $\langle I_{Sm}(x, y) \rangle$ - средние интенсивности полей изображений поверхности объекта в ее различных положениях, $\langle \dots \rangle$ - угловые скобки означают усреднение интенсивности поля.

При равенстве $\langle I_{Sj}(x, y) \rangle$ и $\langle I_{Sm}(x, y) \rangle$, что часто реализуется на опыте, контраст полос средней интенсивности V равен $\left| \mu_{jm}(\Delta\xi) \right|$, как это следует из (2),

$$V(\Delta\xi) = \left| \mu_{jm}(\Delta\xi) \right|, \quad (3)$$

если контраст определяется по формуле

$$V = \frac{\langle I \rangle_{\max} - \langle I \rangle_{\min}}{\langle I \rangle_{\max} + \langle I \rangle_{\min}}. \quad (4)$$

где $\langle I \rangle_{\max}$ и $\langle I \rangle_{\min}$ - средние интенсивности в светлых и темных интерференционных полосах.

В наших экспериментальных исследованиях использовались прямоугольная и круглая сменные апертурные диафрагмы объектива, формирующего изображение поверхности объекта на матрице фотодетектора. Прямоугольная диафрагма, ориентировалась длинной стороной вертикально – параллельно оси поворота (наклона) поверхности объекта. Запись голограмм и получение голографических интерферограмм производились при различной ширине или диаметре апертурной диафрагмы. Записывалась серия голограмм при различных углах наклона поверхности объекта при одном и том же размере апертурной диафрагмы. Голографические интерферограммы формировались по парам голограмм с возрастающим углом взаимного наклона поверхности. Производилось усреднение спекл-модуляции [10] в интерферограммах по столбцам пикселей, параллельным полосам и строились графики зависимости средней интенсивности поперек интерференционных полос. По осцилляциям средней интенсивности строились графики контраста полос средней интенсивности в зависимости от величины смещения объектного поля в плоскости апертурной диафрагмы $\Delta\xi$, которая определялась по величине угла наклона поверхности объекта и расстоянию от поверхности до плоскости апертуры.

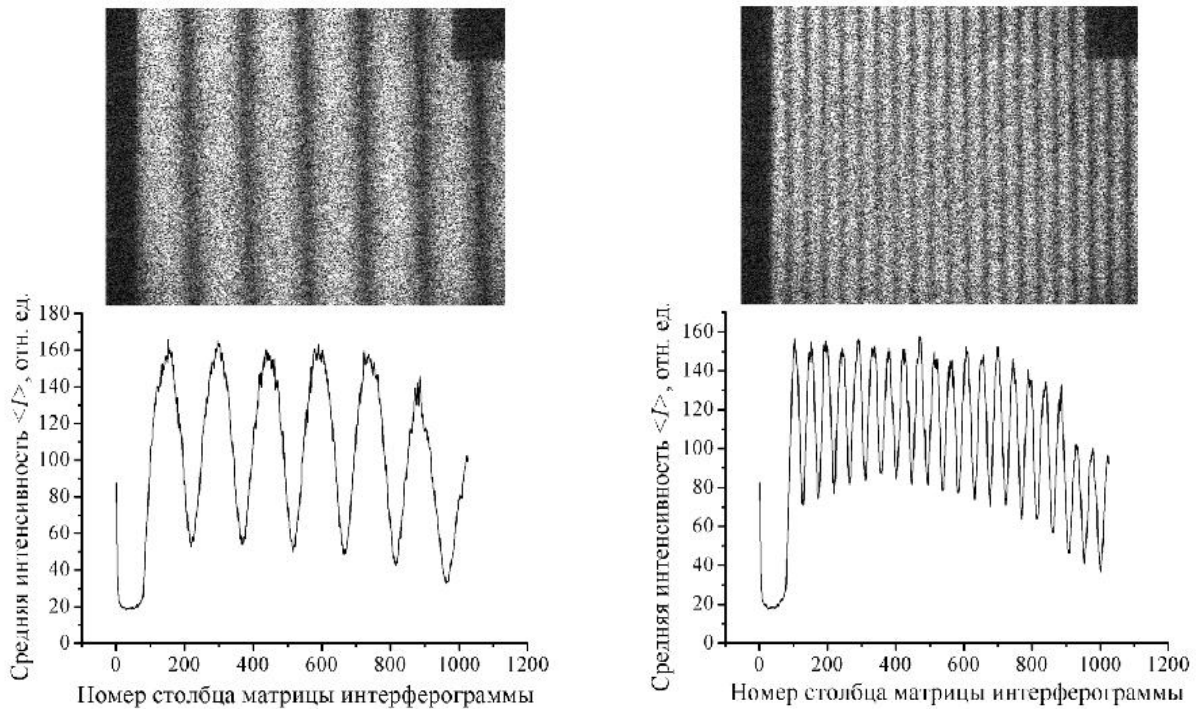


Рис. 3. Интерферограммы и графики изменения средней интенсивности поперек интерференционных полос разного периода.

Графики изменения контраста полос вследствие апертурной декорреляции представлены на рис.4 и 5. С увеличением угла наклона поверхности объекта увеличивается величина смещения поля $\Delta\xi$ в апертуре объектива и наблюдается падение контраста интерференционных полос средней интенсивности. Контраст полос становится практически нулевым, когда величина смещения поля равна ширине апертуры объектива. С физической точки зрения это означает, что при смещении объектного спекл-модулированного поля в апертуре объектива декорреляционно изменяется спекл-структура поля изображения поверхности, поскольку одни спеклы поля уходят из апертуры, а другие, которых не было в апертуре при исходном положении поверхности, приходят в апертуру объектива – в апертуре структурно изменяется спекл-поле. При смещении поля на ширину апертуры полностью обновляется спекл-структура в апертуре и, как следствие, полностью

обновляется спекл-структура поля изображения и возникает полная декорреляция этого поля. Кривые контраста полос на рис.4 и 5 в целом подтверждают эти теоретические представления.

На рис.5 представлены кривые изменения контраста полос в результате апертурной декорреляции поля изображения при использовании круглой апертурной диафрагмы.

Для оценки повторяемости проявления эффектов апертурной декорреляции нами выполнена серия экспериментов при одной и той же круглой апертуре диаметром $D \approx 4,7$ мм. Результаты трех экспериментов, представленные на рис.6, демонстрируют высокую степень повторяемости проявления этого эффекта

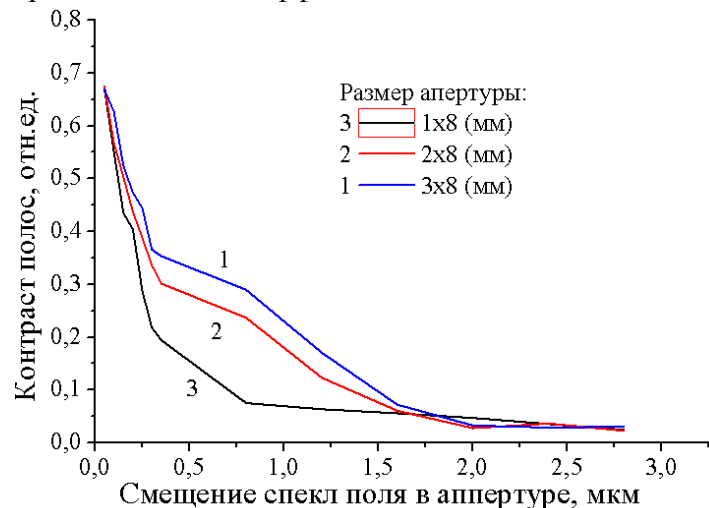


Рис. 4. Изменение контраста интерференционных полос средней интенсивности в зависимости от величины смещения спекл-поля $\Delta\xi$ в прямоугольной апертуре объектива в результате увеличения угла наклона поверхности объекта при различной ширине A апертуры и одной и той же высоте апертуры $B = 8$ мм:
1 - $A = 3$ мм; 2 - $A = 2$ мм; 3 - $A = 1$ мм.

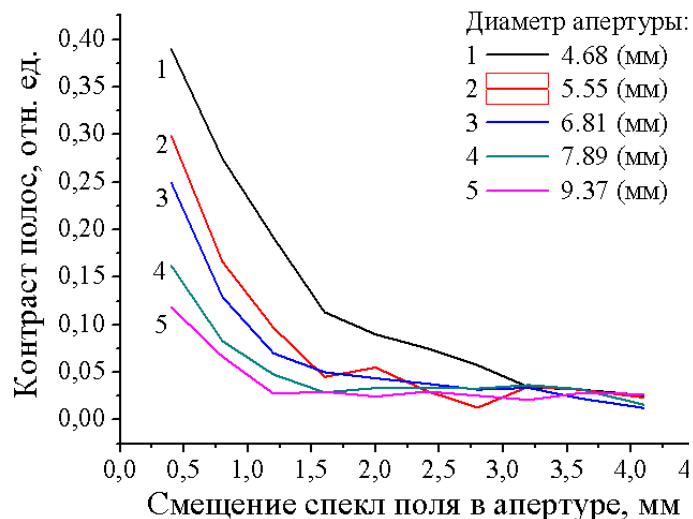


Рис. 5. Изменение контраста интерференционных полос средней интенсивности в зависимости от величины смещения спекл-поля в плоскости круглой апертуры объектива в результате увеличения угла наклона поверхности объекта при использовании апертур разного диаметра D :
1 - $D \approx 4,7$ мм; 2 - $D \approx 5,6$ мм; 3 - $D \approx 6,8$ мм; 4 - $D \approx 7,9$ мм; 5 - $D \approx 9,4$ мм

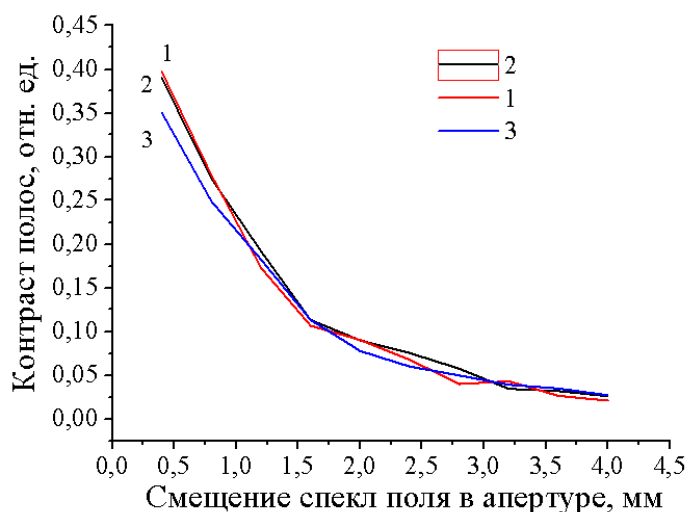


Рис. 6. Графики контраста полос в зависимости от величины смещения спекл-поля в круглой апертуре объектива диаметром $D \approx 4,7$ мм при многократном повторении эксперимента с поворотом поверхности объекта:
1 – эксперимент 1; 2 – эксперимент 2; 3 – эксперимент 3.

ОБСУЖДЕНИЕ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При увеличении угла наклона рассеивающей поверхности объекта уменьшается период интерференционных полос, наблюдаемых на голографической интерферограмме, восстанавливаемой с голограммы сфокусированного изображения. Визуально наблюдается уменьшение контраста интерференционных полос, которые исчезают, когда период полос

становится приблизительно равным поперечным размерам спеклов изображения. Создается впечатление, что именно спекл-модуляция разрушает интерференционную картину. Однако в настоящей работе показано, что этот эффект уменьшения контраста полос носит не модуляционный, а декорреляционный характер, обусловленный смещением спекл-поля в апертуре объектива, формирующего изображение, и, как следствие, декорреляцией спекл-поля изображения поверхности объекта.

В эксперименте нами также установлено, что при исчезновении интерференционных полос при визуальном наблюдении наблюдается достаточно высокая контрастность полос средней интенсивности – наблюдаются синусоидальные осцилляции средней интенсивности интерферограммы. Это свидетельствует о наличии более глубокой корреляции спекл-полей, чем воспринимается при визуальном наблюдении интерференционной картины. Можно также сделать вывод, что путем усреднения тем или иным способом интенсивности спекл-модулированных изображений возможно наблюдение сигнала интерференции восстановленных с голограммы полей и, тем самым, возможны измерения больших величин смещений объекта, чем ожидается, что фактически определяет расширение диапазона измерений с помощью метода цифровой голографической интерферометрии.

В цифровой голографической интерферометрии эффекты декорреляции более заметны, чем в обычной аналоговой голографической интерферометрии, поскольку из-за сравнительно низкого пространственного разрешения матричных фотоэлектрических детекторов используются малые апертуры оптических систем записи цифровых голограмм.

Аналогичные эффекты апертурной декорреляции, как нами также установлено, наблюдаются и в других оптических системах записи цифровых голограмм – при использовании схем записи голограмм Френеля и Фурье – линзовой или безлинзовой. В этих схемах эффекты декорреляции комплексных амплитуд восстанавливаемых с голограмм полей возникают из-за смещения дифракционного спекл-модулированного поля в апертуре матрицы фотодетектора.

Литература

1. Кольер Р., Беркхарт К., Лин Л. Оптическая голография. М.: Мир, 1973. 686 с.
2. Островский Ю.И., Бутусов М.М., Островская Г.В. Голографическая интерферометрия. М.: Наука, 1977. 336 с.
3. Вест Ч. Голографическая интерферометрия. М.: Мир, 1982. 504 с.
4. Джоунс Р., Уайкс К. Голографическая и спекл-интерферометрия. М.: Мир, 1986. 328с.
5. Schnars U., Jueptner W. Digital Holography. Berlin: Springer-Verlag, 2004. 164 p.
6. Kreis, T. Handbook of Holographic Interferometry: Optical and Digital Methods. Wiley, 2005. 547 p.
7. Алексеенко И.В., Гусев М.Е. // Автометрия 2008, Т. 44, № 1, с. 111–117.
8. Гусев М.Е., Воронин А.А., Гуревич В.С. и др. // Наносистемы: физика, химия, математика 2011, Т. 2, № 1, с. 23–39.
9. Диков О.В., Савонин С.А., Качула В.И. и др. // Компьютерная оптика 2012, Т.36, №1, с. 51-64.
10. Laser speckle and related phenomena. Topics in Applied Physics/Ed. J.C. Dainty V.9. Berlin: Springer-Verlag, 1975. 286 p.
11. Гудмен Дж. Статистическая оптика. М.: Мир, 1988. 528с.
12. Goodman, J.W. Speckle Phenomena in Optics: Theory and Applications. Greenwood Village: Roberts and Company Publishers, 2009. 384 p.
13. Kreis, T. // Journal of the Optical Society of America A 1986, Vol. 3, Issue 6, p. 847-855.

ПРОЯВЛЕНИЕ МОДУЛЯЦИОННОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ ПРИ РАСПРОСТРАНЕНИИ ОПТИЧЕСКИХ ИМПУЛЬСОВ В ВОЛОКНАХ С ПЕРЕМЕННОЙ ПО ДЛИНЕ ДИСПЕРСИЕЙ

А.И. Колюхов, А.И. Пан

Саратовский государственный университет

В работе рассмотрен способ генерации новых частот при помощи оптического волокна с переменной по длине дисперсией. За счет наличия нелинейности появляется связь между пространственной и временной модуляцией излучения. При мере распространении лазерного импульса в волокне появляются боковые частоты, определяемые резонансными условиями при параметрическом усилении. Представленный метод позволяет создавать гребенчатый спектр с разностью частот между соседними полосами порядка нескольких терагерц.

ВВЕДЕНИЕ

Модуляционная неустойчивость (MI) представляет собой нелинейный процесс, широко изученный в различных областях физики, в том числе в плазме, гидродинамике и оптике. При наличии мощной непрерывной волны (CW) модуляционная неустойчивость приводит к появлению и усилению боковых полос в спектре выходного импульса. В нелинейной волоконной оптике такой процесс может наблюдаться в волокнах как с аномальной, так и с нормальной дисперсией групповой скорости (GVD). Для эффективной перекачки энергии в боковые полосы необходимо выполнение условия нелинейного фазового синхронизма. Условия волнового синхронизма могут быть выполнены за счет дисперсии четвертого порядка, двойного лучепреломления или многомодовой структуры волокна [1]. Однако эффективность таких параметрических процессов может сильно уменьшаться при наличии продольного изменения параметров волокна. Флуктуации диаметра волокна приводят к быстрому падению коэффициента усиления и увеличению ширины полосы усиления [2]. Однако, если продольные изменения параметров волокна довольно велики и являются периодическими, то в спектре выходного импульса появляются новые детерминированные резонансные боковые полосы [3-5]. Для осуществления резонанса можно использовать периодическое изменение потерь, усиления или поляризации. В данной работе мы рассмотрели наличие резонансов при периодическом изменении дисперсии.

МОДУЛЯЦИОННАЯ НЕУСТОЙЧИВОСТЬ КВАЗИПЕРИОДИЧЕСКОЙ ДИСПЕРСИИ

Эволюцию оптического поля ψ в световоде можно описать нелинейным уравнением Шредингера (NLSE), которое включает как керровскую нелинейность γ , так и продольно меняющуюся дисперсию второго порядка $\beta_2(z)$

$$i \frac{\partial \psi}{\partial z} - \frac{\beta_2(z)}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} + \gamma |\psi|^2 \psi = 0 \tag{1}$$

Где ψ - комплексное электрическое поле, z - расстояние распространения, t - приведенное время.

Параметрический резонанс, индуцированный продольными вариациями хроматической дисперсии, может осуществляться в волокнах с пространственным периодом от нескольких десятков метров [4] до нескольких километров [5]. Рассмотрим профиль дисперсии волокна, который эволюционирует с расстоянием z в соответствии со следующим синусоидальным правилом

$$\beta_2(z) = \beta_{2av} + \beta_{2amp} \sin(2\pi z / \Lambda) \tag{2}$$

Где Λ - пространственный период дисперсионного колебания, β_{2av} - средняя дисперсия волокна, а β_{2amp} - половина амплитуды дисперсии от максимума к пику. При наличии синусоидальных продольных изменений $\beta_2(z)$ и при накачке непрерывной волной мощности P модуляционная неустойчивость приводит к появлению боковых полос резонансного усиления, угловое изменение частоты которых относительно накачки может быть аналитически предсказано следующим образом [6]:

$$\Omega_p^2 = \frac{2\pi p / \Lambda - 2\gamma P}{\beta_{2av}} \tag{3}$$

С $p = 1, 2, 3 \dots$ Соответствующий экспоненциальный коэффициент усиления для p -й боковой полосы можно оценить аналитическим выражением [7]:

$$g(\Omega_p) = 2\gamma P \left| J_p \left(\frac{\beta_{2amp} \Omega_p^2}{2\pi / \Lambda} \right) \right| \tag{4}$$

где J_p - функция Бесселя порядка p .

РАСПРОСТРАНЕНИЕ ИМПУЛЬСА В ОПТИЧЕСКОМ ВОЛОКНЕ

На рисунке 1(a) показан начальный импульс в форме гиперболического секанса

$$\psi = A \operatorname{sech}(t/t_0) \tag{5}$$

Пиковая мощность импульса 3.2 Вт , длительность импульса $t_0 = 100 \text{ пс}$.

На рисунке 1(b) показан спектр начального импульса. Рассмотрим распространение данного импульса в соответствии с уравнением (1). Коэффициент дисперсии изменяется в соответствии с уравнением (2). Период модуляции $\Lambda = 20 \text{ м}$. Коэффициент дисперсии второго порядка $\beta_{2av} =$

$1 \text{ ps}^2/\text{км}$. Коэффициент нелинейности $\gamma = 10 \text{ (Вт км)}^{-1}$. Центральная длина волны $\lambda_0 = 1554.7 \text{ нм}$.

Как видно из рисунка 2 на расстоянии равном 0.5 км появляются две боковых частоты, условие синхронизма для этих частот задано уравнениями (3)-(4). По мере дальнейшего распространения на расстоянии 0.8 км появляются дополнительные частоты и на выходе из волокна на расстоянии $z = 1 \text{ км}$ мы видим что спектр выходного импульса состоит из нескольких отдельных частотных компонентов.

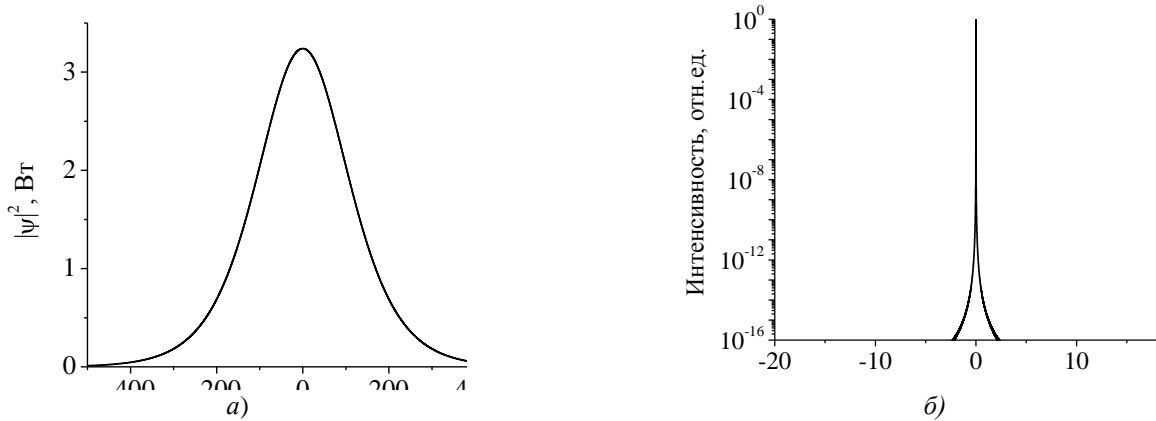


Рис. 1. Форма начального импульса (a) и (b) спектр начального импульса в логарифмическом масштабе.

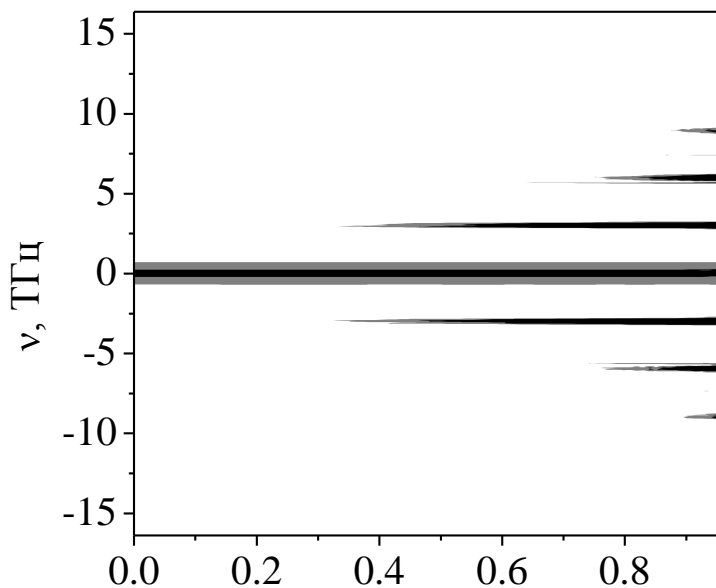


Рис. 2. Спектр импульса в зависимости от длины распространения z .

Как видно из рисунка 3(a) на пике импульса появляется высокочастотная модуляция, и данная модуляция в спектре отражается как набор частот. Частотное расстояние между соседними полосами равно 3 ТГц . Такой спектр можно использовать в оптических измерениях, в качестве задающего генератора для других лазерных систем с многочастотным спектром, для генерации терагерцового излучения методом оптического выпрямления.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате работы было рассмотрено распространение оптических импульсов при условии периодического изменения коэффициента дисперсии второго порядка. Рассмотрено условия фазового синхронизма для генерации новых частот в оптических волокнах с переменным по длине диаметром, построена математическая модель распространения импульсов в оптических волокнах и изучены эффекты генерации новых частот при использовании волокон с периодическим изменением дисперсии вдоль волокна.

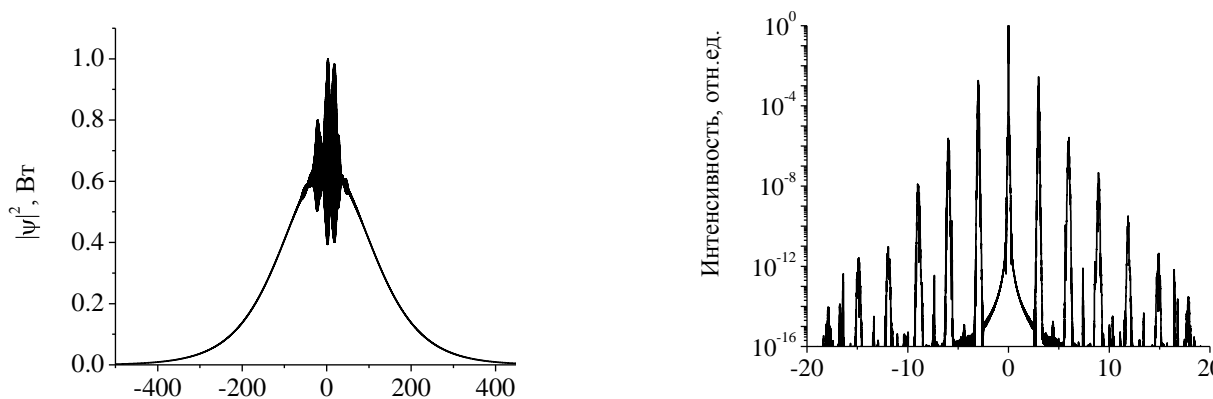


Рис. 3. Форма выходного импульса и его частотный спектр после распространения на дистанции $z = 1$ км.

Работа выполнена при поддержке Российским Научным Фондом, грант No.17-12-01564.

Литература

1. Kibler B., Billet C., Dudley J.M. et al. // Opt. Lett. 2004, Vol. 29, p.1903-1905.
2. Kuo B.P.P., Fini J.M., Grüner-Nielsen L et al. // Opt. Express 2012, Vol. 20, p.18611- 18619.
3. Smith N.J., Doran N.J. // Opt. Lett. 1996, Vol. 21, p.570.
4. Finot C., Fatome J., Sysoliatin A. et al. // Opt. Lett. 2013, Vol. 38, p. 5361-5364.
5. Droques M., Kudlinski A., Bouwmans G. et al. // Opt. Lett. 2012, Vol. 37, p. 4832-4834.
6. Ambomo S., Ngabireng C.M., Dinda P.T. et al. // J. of the Optical Society of America B 2008, Vol. 25, p. 425-433.

НЕУПРУГОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ОПТИЧЕСКИХ СОЛИТОНОВ В ВОЛОКНАХ С МОДУЛЯЦИЕЙ ДИАМЕТРА

П.А. Маврин, А.И. Конюхов

Саратовский государственный университет

В работе рассмотрен метод управления амплитудой, групповой скоростью и длительностью оптических солитонов в одномодовых световодах с переменной по длине дисперсией. Показано, что в волокнах с переменной по длине дисперсией взаимодействие солитонов может носить неупругий характер. При таком взаимодействии, солитоны могут изменять свои параметры.

ВВЕДЕНИЕ

Управление оптическими солитонами подразумевает собой возможность изменения числа солитонов, их амплитуд, групповых скоростей. При упругом взаимодействии солитоны сохраняют свои параметры. Изменение параметров оптических солитонов возможно при неупругих столкновениях. Неупругие столкновения описываются нелинейным уравнением Шредингера, в котором присутствуют некоторые слагаемые, описывающие возмущение. В качестве таких возмущений может использоваться спектральная фильтрация, нелинейные потери, нелинейное усиление, дисперсия высших порядков. В данном случае модифицированное нелинейное уравнение Шредингера часто называют комплексным уравнением Гинзбурга-Ландау [1]. Данное уравнение описывает достаточно большой класс задач, связанный с неупругим взаимодействием солитонов. Солитонные пары, описываемые комплексным уравнением Гинзбурга-Ландау, могут существовать в различных формах. Возможно формирование связанных солитонных состояний, формирование структур, которые изменяются периодически, квазипериодически или хаотично. Для управления динамикой солитонов возможно использование модуляции фазы поля во времени. Фазовая модуляция может использоваться для управления временным интервалом между солитонами. Другой подход для управления взаимодействием солитонов основан на использовании поляризованных оптических солитонов. В данном случае роль возмущения играет фазовая кросс-модуляция в системе двух связанных нелинейных уравнений Шредингера [3-5]. Анализ данной системы показывает возможность управление групповыми скоростями и амплитудами солитонных импульсов.

НЕЛИНЕЙНОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

Динамика солитонов в волокне с периодической модуляцией диаметра [6] подчиняется нелинейному уравнению Шредингера с переменными коэффициентами [7]:

$$\frac{\partial A}{\partial z} + i \frac{\beta_2(z)}{2} \frac{\partial^2 A}{\partial \eta^2} = i\gamma(z)|A|^2 A(z, \eta) \tag{1}$$

где $A(z, \eta) = (cn\varepsilon_0 S_{eff} / 2)^{1/2} E(z, \eta)$, c – скорость света в вакууме, n – показатель преломления, ε_0 – диэлектрическая постоянная, S_{eff} – эффективная площадь основной моды волокна, $E(z, \eta)$ – комплексная амплитуда напряженности электрического поля, z – длина распространения, η – время в бегущей системе координат ($z=z, \eta=t-z/u$), где u – групповая скорость импульса. Параметр η определяет временной интервал между импульсом, распространяющимся с групповой скоростью u , и исследуемым импульсом. При изменении диаметра волокна изменяются коэффициент нелинейности и коэффициент дисперсии второго порядка [8]:

$$\gamma(z) = \langle \gamma \rangle (1 - 0.028 \sin(2\pi z / z_m)), \quad \beta_2(z) = \langle \beta_2 \rangle (1 + 0.2 \sin(2\pi z / z_m)), \tag{2}$$

где z_m – период модуляции волокна, $\langle \gamma \rangle = 8.2 \text{ Вт}^{-1} \text{ км}^{-1}$, $\langle \beta_2 \rangle = -12.76 \text{ пс}^2 / \text{км}$.

НЕУПРУГИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ОПТИЧЕСКИХ СОЛИТОНОВ В ВОЛОКНАХ С ПЕРЕМЕННОЙ ДИСПЕРСИЕЙ В СЛУЧАЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ СОЛИТОННОЙ ПАРЫ

Рассмотрим взаимодействие двух синфазных солитонов. Расстояние между импульсами при моделировании было выбрано достаточно большим, чтобы импульсы перекрывались незначительно. При таких обстоятельствах для солитонной пары, распространяющейся в волокне с постоянным диаметром ($z_m = \infty$) существует аналитическое решение в виде полуограниченных импульсов [2]. Аналитическое решение показывает наличие периодического притяжения и отталкивания импульсов.

На рисунке 1 синфазные солитоны притягиваются и после столкновения расходятся. Расстояние, после прохождения которого начальные импульсы сталкиваются, определяется соотношением: $z_c = z_0 (\lambda_1^2 - \lambda_2^2)^{-1}$, где $z_0 = (\pi/2) \eta_0^2 \langle \beta_2 \rangle^{-1}$ – период солитона, определенный для волокна с постоянным диаметром. Периодическое изменение дисперсии меняет характер взаимодействия солитонов (рис. 2). В начале исходные импульсы плавно притягиваются, затем следует момент резкого сближения. После объединения солитоны отталкиваются и расходятся с разными групповыми скоростями. Изменение групповой скорости импульса связано со сдвигом его несущей частоты

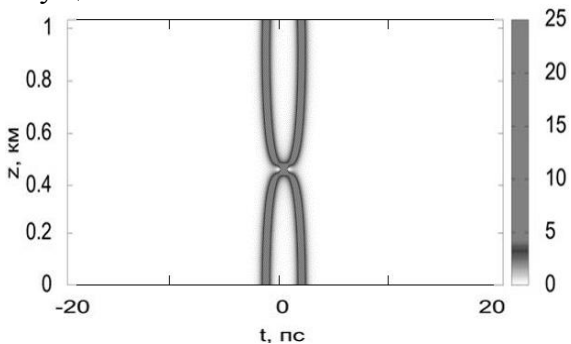


Рис. 1. Синфазные солитоны в волокне с постоянной дисперсией. Черный цвет соответствует максимуму интенсивности.

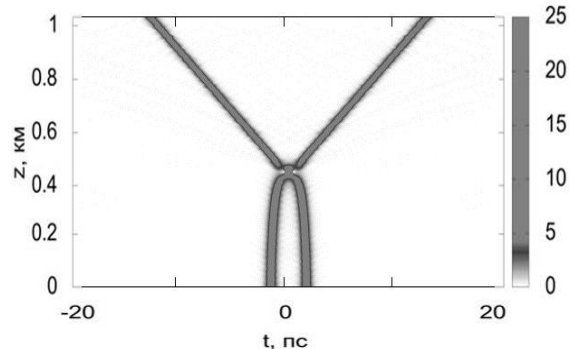


Рис. 2. Разделение солитонной пары. Период изменения дисперсии $z_m=0.2$ км

При изменении периода модуляции волокна меняется характер взаимодействия солитонов. На рис. 3 показан режим, при котором возможно объединение солитонов. В результате воздействия модуляции дисперсии получается центральный интенсивный солитон и два сопутствующих солитона. При периоде модуляции $z_m=0.1$ км (рис. 4) был достигнут режим, при котором временное расстояние между солитонами остаётся неизменным на больших дистанциях распространения.

РАСПРОСТРАНЕНИЕ СОЛИТОНА ВТОРОГО ПОРЯДКА

Выше были рассмотрены три вида возможных взаимодействий солитонной пары при распространении в волокне. При переходе к рассмотрению динамики солитона второго порядка возможно наблюдение такого эффекта как разделение солитона второго порядка, а также периодическую осцилляцию солитона.

На рисунке 5 показано как солитон осциллирует с определенным периодом z_0 [1,2] и сохраняет данный режим на большой протяженности волокна. При появлении модуляции в волокне наблюдается режим разделения солитона на два. Сценарий взаимодействия такой же, как и при прохождении пары солитонов в волокне с переменным диаметром.

По рисунку 7 можно оценить, как меняется динамика солитонов при изменении модуляции диаметра вблизи значения периода солитона z_0 . При изменении периода модуляции от 0.14 км до 0.1 км вызывает значительное изменение поведение солитона второго порядка. При $z_m=0.14$ км происходит разделение солитона на два фундаментальных (рис. 7а). При $z_m=0.12$ км солитон после переходного процесса разделяется на два импульса, между которыми наблюдается притяжение (рис.7б). Это притяжение приводит к их слиянию на расстоянии порядка 12 периодов z_0 . Динамика солитона, изображенная на рис. 7в имеет общие черты с режимом слияния пары солитонов в один.

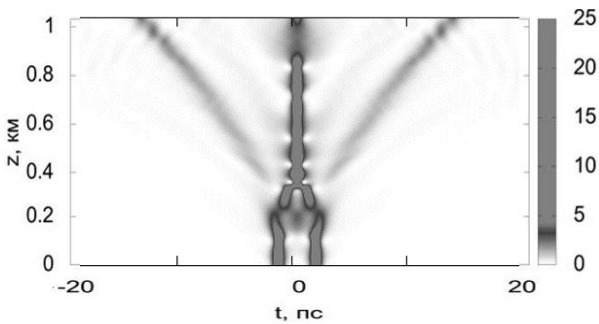


Рис. 3. Объединение двух солитонов. Период изменения дисперсии $z_m=2$ км

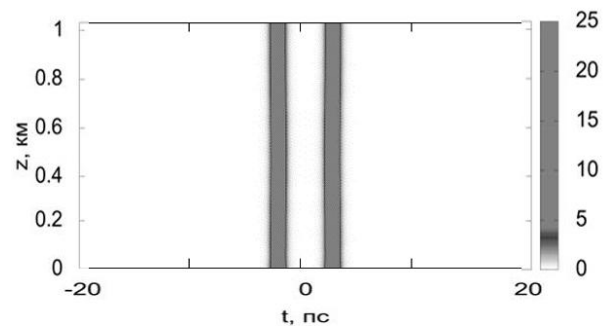


Рис. 4. Связанное состояние двух солитонов. Период изменения дисперсии $z_m=0.1$ км

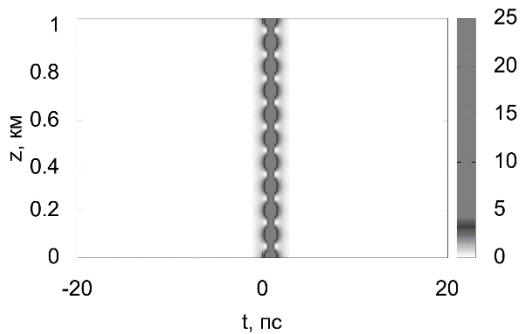


Рис. 5. Периодическая осцилляция солитона. Модуляция отсутствует $z_m=\infty$.

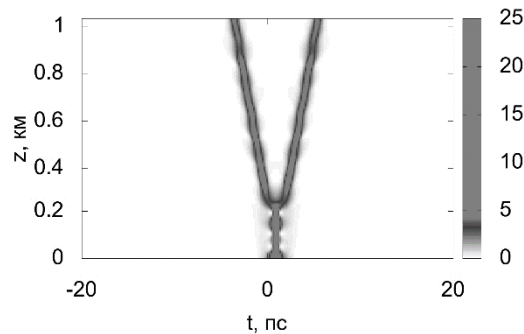


Рис. 6. Разделение солитона второго. Период изменения дисперсии $z_m=0.1231$ км равен периоду солитона z_0 .

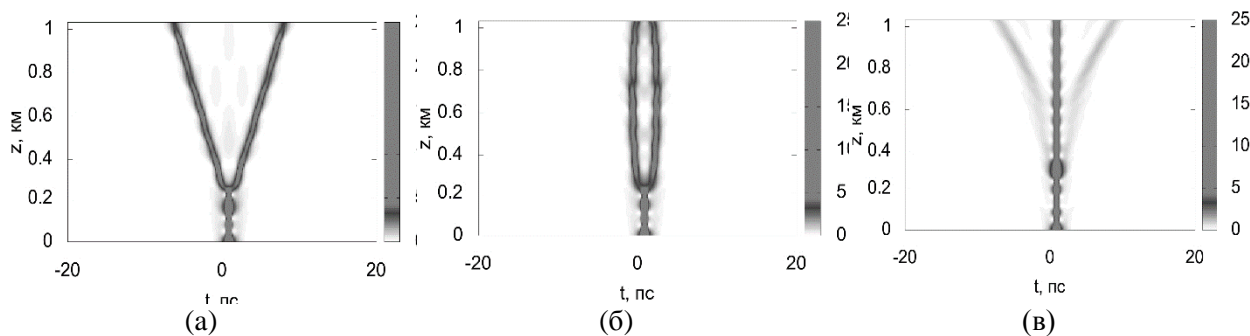


Рис. 7. Солитон второго порядка при различном периоде модуляции волокна $z_m=0.14$ км (а), $z_m=0.12$ км (б), $z_m=0.1$ км (в).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В качестве метода управления солитонным взаимодействием был использован метод периодической модуляции диаметра волокна. За счет выбора периода модуляции достигался определенный режим. Были рассмотрены три типа режимов для взаимодействия солитонной пары и два режима для солитона второго порядка. Данные режимы могут найти практическое применение в области управления лазерными импульсами, оптической обработке информации. Разделяя солитонную пару в волокне с периодическим изменением дисперсии возможно создать последовательность из пикосекундных импульсов с двумя несущими частотами. Получившиеся импульсы можно использовать для создания терабитовых линий связи с частотным разделением каналов, а также в терагерцовой спектроскопии. Объединяя два солитона, можно получить один импульс с довольно высокой пиковой мощностью. Такой эффект можно использовать для преобразования цуга импульсов (близко расположенных импульсов) в импульсы с повышенной мощностью. Наличие притяжения между синфазными солитонами в оптических линиях связи может приводить к потере информации. Используя волокно с переменным диаметром можно изменять расстояние столкновения двух солитонов, распространяющихся на малом расстоянии друг от друга. А реализуя связанные состояния возможно избегать столкновения солитонов. Используя при работе с лазерами режим разделения солитона второго порядка можно создавать импульсы, между которыми либо не будет возникать притяжения, либо оно будет довольно слабым.
Работа выполнена при поддержке Российским Научным Фондом, грант No.17-12-01564.

Литература

1. Ахмедиев Н.Н., Анкевич А. Солитоны. Нелинейные импульсы и пучки, М.: Физматлит, 2003, с. 304.
2. Ахманов С.А., Выслоух В.А., Чиркин А.С. Оптика фемтосекундных лазерных импульсов, М.: Наука, 1988, с. 312.
3. Binh L.N. Optical multi-bound solitons, CRC Press, 2016, p. 567.
4. Soto-Crespo J.M. // Physical Review E 2007, Vol. 75, p. 016613.
5. Chang W. // Physical Review A 2009, Vol. 80, p. 013815.
6. Sysoliatin A.A. et al. // Laser Physics 2007, p. 1306-1310.
7. Маймистов А.И. // Квантовая электроника 2010, № 40, с. 756.
8. Sysoliatin A.A. et al. Dynamics of optical pulses propagating in fibers with variable dispersion, in Book Numerical Simulations of Physical and Engineering Processes, 2011, p. 277-300.

ГЕНЕРАЦИЯ ДИСПЕРСИОННОЙ ВОЛНЫ В ВОЛОКНАХ С ПЕРЕМЕННЫМ ДИАМЕТРОМ*Е.В. Щуркин, А.И. Конюхов*

Саратовский государственный университет

В работе представлены результаты численного моделирования, демонстрирующие спектральное уширение солитонов в волокне с периодическим изменением диаметра вдоль волокна. Показано, что периодическая модуляция вследствие изменения условий фазового согласования приводит к изменению формы спектра.

ВВЕДЕНИЕ

На распад фемтосекундных солитонов, распространяющихся в оптических волокнах, доминирующее влияние оказывает вынужденное комбинационное рассеяние, дисперсия высших порядков [1-3]. При распространении в волокне многосолитонный импульс распадается на фундаментальные солитоны и дисперсионную волну на расстоянии много меньшем периода солитона [1,4]. Структура высокочастотной части спектра на выходе волокна определяется условиями фазового синхронизма для дисперсионной волны [4]. В работе рассмотрена возможность управления спектральным составом излучения, которое формируется в результате распада многосолитонного импульса в волокне с периодическим изменением дисперсии [1,5].

ГЕНЕРАЦИЯ ДИСПЕРСИОННОЙ ВОЛНЫ

Дисперсионной волной называют волну, у которой амплитуда не достаточна для формирования волн солитона, и под действием дисперсии амплитуда таких волн уменьшается, импульс расплывается [4]. У дисперсионной волны различная групповая и фазовая скорость [3-4]. Для возбуждения дисперсионной волны на заданной частоте необходимо обеспечить выполнение

условия фазового синхронизма между дисперсионной волной и солитоном [3,4]. Чтобы проанализировать условия фазового синхронизма, разложим амплитуду $A(z, t)$ в ряд Фурье по координате z . Коэффициенты в модифицированном уравнении Шредингера являются периодическими функциями z . Принимая это во внимание, найдем решение в виде ряда Фурье [6]:

$$A(z, \omega) = \sum_{j=-N}^N F_j(\omega) \exp(i\beta_j z), \quad (1)$$

где

$$\beta_j = \beta(\omega) + j 2\pi/z_m, \quad (2)$$

z_m – период модуляции волокна. Для периодической среды условия фазового синхронизма модифицируются [1] $\Delta k_{jl}(\omega_d) = 0$, где

$$\Delta k_{jl}(\omega) = \frac{2\pi}{z_m}(j-l) + \beta(\omega) - \beta(\omega_0) - (\omega - \omega_0)\beta_1 - \gamma P_0, \quad (3)$$

$\beta(\omega)$ – постоянная распространения основной моды волокна, $\beta_1 = \partial\beta/\partial\omega$ – коэффициент дисперсии первого порядка, $j, l = 1, 2, 3, \dots$. При $z_m = \infty$, т.е. для волокна без модуляции, существует лишь одна резонансная частота для дисперсионной волны. При наличии модуляции ($z_m \neq 0$) появляется несколько частот, удовлетворяющих условию синхронизма (3).

В волокне с переменным диаметром изменение амплитуды основной моды описывается модифицированным уравнением Шредингера

$$\frac{\partial A(z,t)}{\partial z} = -i \frac{\beta_2(z)}{2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} + \frac{\beta_3(z)}{6} \frac{\partial^3 A}{\partial t^3} + iP_{NL} \quad (4)$$

где $\beta_2 = \beta_2^{(0)}(1 + 0.2 \sin(z/z_m))$, $\beta_3 = \beta_3^{(0)}(1 + 0.095 \sin(z/z_m))$, $\beta_2^{(0)} = -12.76 \text{ пс}^2 \text{ км}^{-1}$, $\beta_3^{(0)} = 1 \text{ пс}^2 \text{ км}^{-1}$.

Нелинейная поляризация среды P_{NL} задается уравнением

$$P_{NL} = \omega\omega(1 - f_R)\gamma(z)|A|^2 A(z, t) + f_R\gamma(z)QA(z, t), \quad (5)$$

где $f_R = 0.18$, $Q(t)$ – нелинейная восприимчивость, вызванная вынужденным комбинационным рассеянием, которая определяется из уравнения $(\partial^2 Q/\partial t^2 + 2T_2^{-1}\partial Q/\partial t + \Omega^2 |A(z, t)|^2 Q = 0$, где $T_2 = 32 \text{ фс}$, $\Omega = 13.1 \text{ ТГц}$. Начальный импульс задавался в виде $A(0, t) = A_0 \text{sech}(t/t_0)$, где $t_0 = 200 \text{ фс}$ – длительность импульса. Динамика солитона, в основном, определяется его порядком $N = t_0(\gamma P_0)/|\beta_2|$, где $P_0 = |A_0|^2$ – пиковая мощность начального импульса. В расчетах использовалось $N=5$.

На начальном этапе распространения многосолитонный импульс испытывает самосжатие, что сопровождается уширением его спектра. Как видно из рис. 3 при $z=0.025 \text{ км}$ происходит генерация дисперсионной волны на частоте $\Omega = \omega - \omega_0 = 40 \text{ пс}^{-1}$, где ω_0 – несущая частота импульса. При $z=0.035 \text{ км}$ импульс сжимается. При $z = 0.045 \text{ км}$ снова происходит уширение импульса, поддерживающее дисперсионную волну.

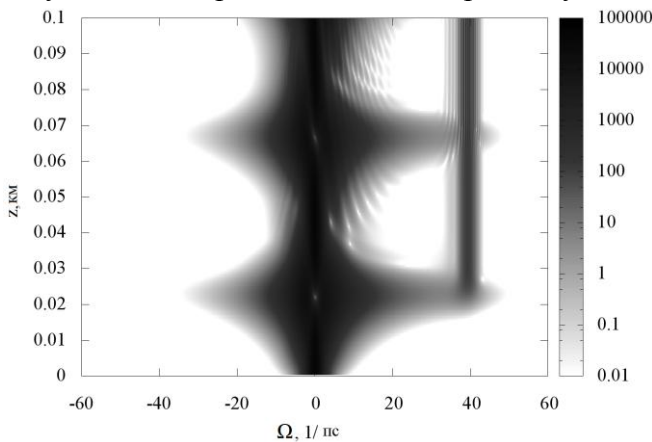


Рис. 1 Уширение спектра импульса, в волокне с постоянным диаметром ($z_m = \infty$). График построен в логарифмическом масштабе. Черный цвет соответствует максимуму интенсивности.

На рис.1 показан режим, соответствующий наличию отдельной резонансной частоты для дисперсионной волны. При наличии модуляции можно выделить несколько резонансных частот.

При малом периоде модуляции данные частоты (3) расположены близко, что способствует заполнению частотных провалов при генерации дисперсионных волн.

На рис. 2 показано спектральное уширение импульса при периоде модуляции равным десятой части периода солитона [4]. При $z=0.02$ км происходит генерация дисперсионной волны и уширение импульса, в результате часть энергии импульса перетекает в дисперсионную волну. В отличие от режима соответствующего $z_m = \infty$ (рис. 1), при наличии модуляции ($z_m = 0.002$ км), частотный диапазон от 0 до 40 ps^{-1} (рис.2) является заполненным.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для исследования особенности спектрального уширения в волокнах с переменным диаметром было рассмотрено распространение сверхкоротких световых импульсов в микроструктурном волокне с периодической модуляцией диаметра сердцевины. Рассмотрена модель генерации суперконтинуума, а также рассчитан спектр импульса при наличии генерации дисперсионной волны. В работе представлены результаты численного моделирования, демонстрирующие спектральное уширение солитонов в волокне с периодическим диаметром. Показано, что периодическая модуляция вследствие изменения условий фазового согласования приводит к дополнительному спектральному уширению импульса и исчезновению провала между спектрами солитона и дисперсионной волны.

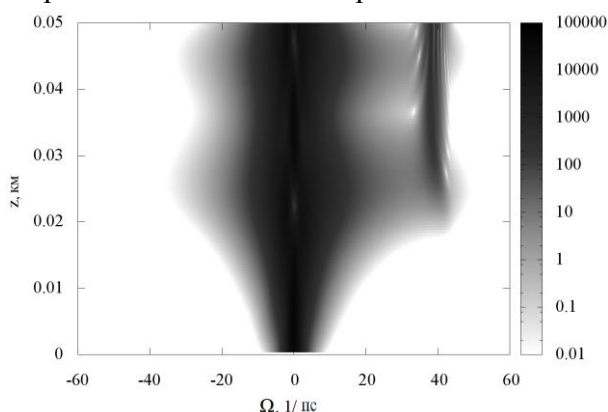


Рис. 2 Уширение спектра импульса, в волокне с периодом модуляции $z_m = 0.002$ км.

Работа выполнена при поддержке Российским Научным Фондом, грант No.17-12-01564.

Литература

1. Дорохова М.А., Конюхов А.И., Мельников Л.А. и др. // Известия Саратовского университета, Новая серия, Серия Физика 2014, Вып. 1, Т. 14, С. 32-35.
2. Шен И.Р. Принципы нелинейной оптики. М: Наука 1989, 557 с.
3. Желтиков А.М. // УФН 2006, Т. 176, С.623–649.
4. Ахмедиев Н.Н., Анкевич А. Солитоны. М.: ФИЗМАТЛИТ 2003, 304 с.
5. Пластун А.С., Конюхов А.И., Мельников Л.А. и др. // Известия Саратовского университета, Новая серия, Серия Физика 2016, Вып. 2, Т. 16, С. 81-86.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ НА ИНФОРМАЦИОННЫЙ СИГНАЛ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКОГО ГИРОСКОПА

С.В. Сердобинцев, С.В. Овчинников

Саратовский государственный университет

Проведены исследования зависимости выходного сигнала прецизионного ВОГ от вибрационного воздействия, воздействий температуры и магнитного поля. Путем использования в ВОГ оптимизированного блока обработки цифровой информации и заливки оптоволокна эластичным компаундом уход нулевого сигнала ВОГ снижены на порядок. Уменьшить ошибку сигнала ВОГ из-за эффекта Фарадея можно путем экранирования контура от магнитного поля. Также можно уменьшить чувствительность системы к магнитному полю путем контроля состояния поляризации. Рассмотрены составляющие погрешности гироскопа, обусловленные воздействием температуры. Разработан метод программной компенсации такой погрешности, что позволило уменьшить температурные искажения информационного сигнала ВОГ в 2 – 4 раза.

Уже три десятилетия волоконно-оптические гироскопы (ВОГ) успешно используются в системах навигации, ориентации и стабилизации. За это время технологии изготовления оптических компонентов были значительно улучшены, что позволило ВОГ перейти из ниши датчиков угловой скорости средней точности к классу датчиков навигационной точности. На сегодняшний день прецизионные ВОГ вытесняют кольцевые лазерные гироскопы класса точности $0,01-0,001^\circ/\text{ч}$ и используются в навигационных системах морского, наземного и аэрокосмического базирования.

Однако при кажущейся простоте прибора и высокой чувствительности его к угловой скорости вращения он, как и любое радиоэлектронное устройство, подвержен воздействию внешних факторов, что приводит к паразитным дрейфам и, как следствие, к снижению точности измерений. К таким воздействиям относятся нестационарные температурные поля, акустические шумы и вибрации, переменные электрические и магнитные поля и т.д. [1].

Целью данной работы является изучение влияния температуры, низкочастотных вибраций (до 2000 Гц) и магнитного поля на стабильность информационного сигнала ВОГ и разработка способов минимизации шумов информационного сигнала.

Принципиально неустранимые шумы – так называемые квантовые или фотонные шумы (дробовые шумы). Эти шумы появляются лишь в присутствии полезного оптического сигнала на входе фотодетектора и обусловлены случайным распределением скорости прихода фотонов на фотодетектор, что приводит к случайным флуктуациям тока фотодетектора. Дробовые шумы – это фундаментальный предел чувствительности прибора.

В оптической гироскопии для намотки чувствительного контура ВОГ используют три вида волокна: многомодовое, одномодовое и одномодовое с устойчивой поляризацией. Длина периметра контура определяется с учетом двух основополагающих факторов. С одной стороны, увеличение длины контура повышает точность системы в целом, так как величина невзаимного фазового сдвига пропорциональна длине волокна. С другой стороны, для более длинного волоконного контура на работу системы в большей степени оказывают влияние параметры затухания и нерегулярности волокна. Для систем, где требуется высокая чувствительность к низким скоростям вращения, выбирают оптимальную длину контура с учетом всех возможных факторов, влияющих на точность системы. Обычно используются волокна длиной от 200 м до 1500 м.

В силу большой длины волокна внешняя вибрация может привести к ситуации, когда по оптическому волокну побежит механическая волна, что недопустимо, поскольку это может привести к ситуации возникновения «световода со случайными колебаниями радиуса сердцевинки». При одновременном температурном воздействии ситуация еще более усложняется.

Изменение температуры ВОГ и вариация механических напряжений в волокне приводят к изменениям оптических постоянных распространения и геометрических параметров волокна. Из-за этого в контуре ВОГ появляется фазовая невзаимность и на фотодетекторе образуются «фазоразностные шумы» $\Delta\varphi$.

Нами были проведены испытания оптоволоконных гироскопов в одноканальном и трехканальном исполнении на вибростенде LDS V830 со съемом информационного сигнала. Использовалась синусоидальная и широкополосная случайная вибрация. При съеме информации с прибора во время вибрации наблюдалось пиковое изменение нулевого сигнала.

Было предположено, что причиной данного изменения является несколько факторов. А именно: колебание волокна из-за наличия мест неплотного прилегания волокна к корпусу в местах укладки (пустоты) и неучет этого обстоятельства в блоке цифровой обработки. Были приняты следующие меры.

Вместе с использованием в приборе фильтра второго порядка была проведена доработка программного обеспечения с целью повышения вибрационной устойчивости прибора. Для этого были изменены настройки основного контура регулирования каналов ВОГ.

Места неплотного прилегания волокна к корпусу были пролиты эластичным связующим компаундом.

Затем были проведены сравнительные виброиспытания прибора со старыми и новыми настройками основного контура регулирования каналов ВОГ. В обоих случаях использовался фильтр второго порядка.

Прибор был установлен на вибростенде одной измерительной осью (OX) вниз.

Применялись следующие режимы вибрации:

- синусоидальная вибрация с амплитудой ускорения 5g в диапазоне частот от 10 до 2000 Гц;
- случайная широкополосная вибрация.

Во время вибрации во всех случаях наблюдалось пиковое изменение нулевого сигнала ВОГ. Однако результаты испытаний показали существенное уменьшение пикового изменения нулевого сигнала на выделяемых резонансных частотах 960, 1600 и 1950 Гц.

Таким образом, амплитуда смещения нулевого сигнала зависит от качества прилегания волокна к корпусу в местах укладки и правильности настройки оптоволоконного контура. При дополнительной проливке компаундом мест укладки волокна и настройке прибора амплитуда ухода нулевого сигнала уменьшается. Необходимо помнить, что материал компаунда и стекловолокно должны быть согласованы по КТР с учетом анизотропии волокна.

Магнитное поле за счет эффекта Фарадея вызывает ошибку в измерении угловой скорости вращения ВОГ. Эта ошибка определяет уход показаний прибора, который зависит от величины и ориентации магнитного поля, а также от двулучепреломления волокна в контуре. Ошибка тестируемого ВОГ, связанная с магнитным полем 0,5 мТл, имеет типовое значение порядка 2 – 3 град/ч. Уменьшить эту ошибку можно путем экранирования контура от магнитного поля. Кроме того, эффективным способом уменьшения ошибки может явиться уменьшение чувствительности системы к магнитному полю путем контроля состояния поляризации волн.

Погрешности выходного сигнала ВОГ из-за температурного воздействия можно разделить на две части:

1) Мультипликативная погрешность:

- искажение масштабного коэффициента (МК), вызванное изменением площади оптического контура;
- искажение МК, вызванное нестабильностью длины волны источника света;
- искажение МК, вызванное изменением коэффициента преломления волокна.

2) Аддитивная погрешность:

- электронный сдвиг нуля, вызванный нестабильностью характеристик электронных компонент ВОГ при изменении температуры;
- термооптический сдвиг нуля, вызванный асимметричным растяжением участков волокна, намотанных на катушку, при ее тепловом расширении;
- эластооптический сдвиг нуля, вызванный зависимостью коэффициента преломления волокна от его напряженно-деформированного состояния.

Существующие методы температурной компенсации искажения выходного сигнала ВОГ можно условно разделить на три группы:

1. Интерполяция параметров калибровки, полученных при нескольких постоянных значениях температуры. Достоинства этого метода – простота реализации, недостатки – низкая эффективность при динамическом изменении температуры.

2. Динамическая модель зависимости параметров калибровки от температуры и скорости изменения температуры с использованием одного датчика температуры, расположенного во внутреннем объеме ВОГ. Достоинства этого метода – подходит для ВОГ среднего и низкого класса точности, недостатки – не компенсирует термооптическое смещение нуля.

3. Динамическая модель зависимости параметров калибровки от температуры, и пространственно-временного распределения температуры с использованием нескольких датчиков температуры, расположенных в непосредственной близости к волоконному контуру. Достоинства этого метода – он обеспечивает высокую точность компенсации, недостатки – сложность в реализации. Мы рассматривали именно такую модель.

При наличии неравномерного нестационарного температурного поля в ВОГ в сигналах измерительных каналов появляется смещение. Для сравнения форм кривых распределения температуры и смещения сигналов ВОГ приведем их на рис. 1.

Видно, что кривые смещения нулевого сигнала трех каналов прибора достаточно точно повторяют форму изменения его температуры.

Можно предположить, что, если ввести дополнительное смещение в измерительные каналы, по форме повторяющее изменения температуры, но с противоположным знаком, влияние температуры на нулевой сигнал прибора уменьшится (или полностью исключится).

Для вычисления необходимого дополнительного смещения необходимо вычислять в каждый момент времени величину температурного изменения. Для этого введем на код АЦП, соответствующий показаниям термодатчика, два рекурсивных фильтра. Фильтры различаются постоянными времени, каждую из которых можно менять в пределах от 0,1 секунды до 10 минут. Вычислив разницу в показаниях фильтров в каждый момент времени, мы получим опорную величину, зависящую от изменения кода АЦП (который определяется температурой прибора) во времени. Для получения нужной величины дополнительного смещения умножим полученное число на масштабный коэффициент, который определяется опытным путем.

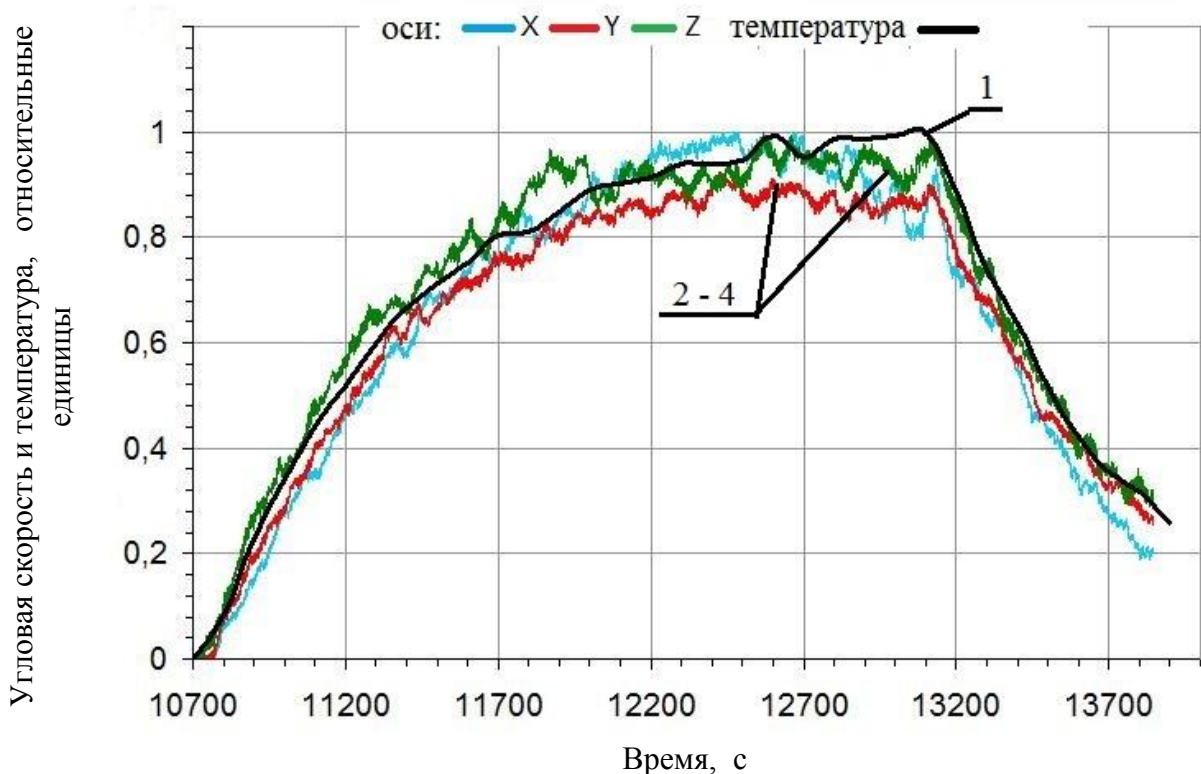


Рис. 1. Сравнительные временные изменения температуры (кривая 1) и нулевых сигналов ВОГ по осям 0X, 0Y и 0Z (кривые 2–4)

Условное текущее значение рекурсивного фильтра (цифровой код) определяется выражением

$$T_i[j] = T_i[j-1] + \left(T_{ADC} - \frac{T_i[j-1]}{8192} \right) \cdot K_i,$$

где i – номер фильтра; j – номер текущего шага вычислений; T_i – значение рекурсивного фильтра; T_{ADC} – последний считанный код АЦП; K_i – коэффициент, определяющий постоянную времени.

Разница значений фильтров вычисляется по формуле

$$\Delta T[j] = K_M \cdot \frac{(T_1[j] - T_2[j])}{32768},$$

где T_1 , T_2 – значения первого и второго фильтров соответственно; K_M – число, определяющее масштабный коэффициент.

В результате разработан метод компенсации влияния изменений температуры с помощью использования двух рекурсивных фильтров. При использовании в трехосном приборе данного метода удалось снизить смещения нулевого сигнала в измерительных каналах, возникающие при изменении температуры прибора, в 2 – 4 раза.

Литература

1. Андропова И.А., Малыкин Г.Б. // УФН 2002, Т. 172, № 8, с. 849–873.

СПЕКТРОСКОПИЯ АТОМОВ И МОЛЕКУЛ

ИНТЕРПРЕТАЦИЯ КР СПЕКТРА КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ D-РИБОЗЫ
НА ОСНОВЕ КОНЦЕПЦИИ ЛОКАЛЬНОЙ СИММЕТРИИА.В. Новоселова¹, В.В. Нечаев², К.Н. Дворецкий³, М.Л. Чернавина¹, К. В. Березин¹¹Саратовский государственный университет²Саратовский государственный технический университет им. Ю.А. Гагарина³Саратовский государственный медицинский университет

Методом функционала плотности, с использованием гибридного функционала B3LYP и расширенного набора базисных функций 6-311+G(d,p) выполнен расчет равновесных молекулярных конфигураций и проведено моделирование спектров комбинационного рассеяния света кристаллической D-рибозы на основе новых экспериментальных данных о ее структуре. Получены оптимизированные геометрические параметры, колебательные волновые числа и интенсивности в спектрах инфракрасного поглощения и комбинационного рассеяния света двух циклических изомеров D-рибозы (α - и β -рибопираноза), а так же их водородосвязанных комплексов с четырьмя 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. Обсуждается природа полос кристалличности в поликристаллическом состоянии D-рибозы.

ВВЕДЕНИЕ

D-рибоза относится к природным биологическим соединениям, которое входит в состав РНК и коферменты нуклеотидной природы. В этих соединениях рибоза всегда присутствует в фуранозной форме [1]. Именно поэтому молекула D-рибозы в форме β -фуранозы, относящаяся к углеводам-пентозам, уже хорошо изучена. Ее углеродный скелет состоит из пяти атомов углерода, с четырьмя из которых связаны гидроксильные группы, пятый атом углерода входит в состав альдегидной группы. Ее водные растворы, как и ряда других моносахаридов [2], могут быть использованы в качестве иммерсионного агента при оптическом просветлении биотканей. Кроме этого рибоза используется как пищевая добавка в рационе питания при больших физических нагрузках предположительно улучшая результативность спортивных тренировок, хотя ее эффективность в этом качестве не имеет достаточно строго обоснования.

Из экспериментов по ЯМР [3-5] известно, что рибоза (как и другие моносахариды) в растворах существует в виде равновесной смеси ациклической и циклических форм (аномерные α - и β -рибопиранозы и α - и β -рибофуранозы) с преобладанием β -пиранозной формы. Соотношение этих форм в растворе приблизительно таково: β -рибопираноза (59%), α -рибопираноза (20%), β -рибофураноза (13%), α -рибофураноза (7%), ациклическая (0.1%). Строение всех возможных форм рибозы показано на рис. 1.

До самого последнего времени структура рибозы в кристаллическом состоянии оставалась неизвестной вследствие трудностей получения монокристаллов. В экспериментальной работе [6], с применением методов ЯМР и рентгеноструктурного анализа и было установлено, что молекулы D-рибозы кристаллизуются в виде шестичленной циклической пиранозной формы, в которой соотношение α - и β -форм определяется особенностями кристаллизации и составляет 1,7:1.

Ранее было обнаружено, что некоторые полосы, наблюдаемые в колебательных спектрах ДНК и РНК, чувствительны к конформации сахарофосфатного остова [7].

Не смотря на то, что D-рибоза является Данные о квантово-механических расчетах структуры и колебательных спектров D-рибозы в кристаллической фазе в литературе отсутствуют.

Целью нашей работы было теоретическое моделирование спектра комбинационного света D-рибозы в кристаллическом состоянии на основе новой структурной модели, и интерпретация экспериментального спектра в терминах локальной симметрии.

МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Расчеты проведены с использованием программы Gaussian'03 методом B3LYP/6-311+G(d,p). Для лучшего согласия с экспериментом полученные волновые числа нормальных колебаний исследуемых молекул были уточнены методом линейного масштабирования [8,9] по формуле:

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

где $\nu_{\text{экс}}$, $\nu_{\text{теор}}$ – опытное и вычисленное значение волнового числа в см^{-1} , a и b – коэффициенты, подлежащие определению. Численные значения a и b были найдены в [10] для базиса 6-311+G(d,p). Для интерпретации колебаний использовалась программа визуализации форм колебаний Molekel [11].

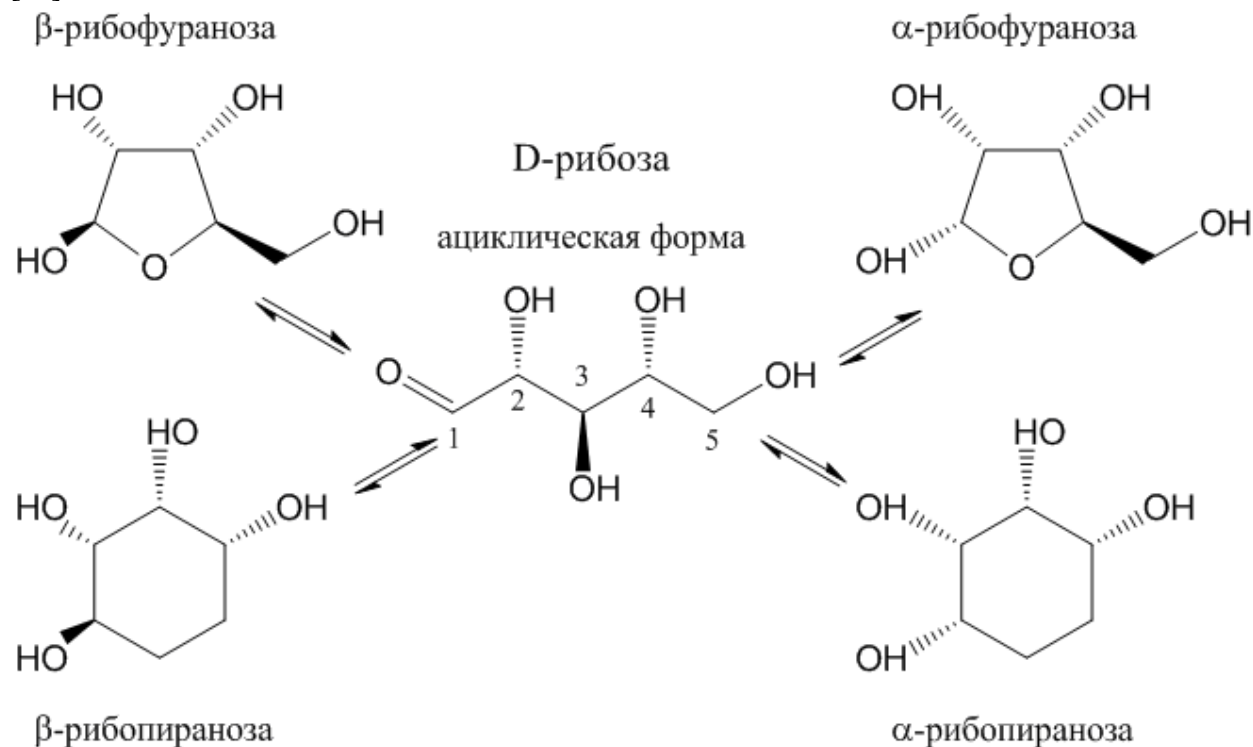


Рис. 1. Различные формы D-рибозы, находящиеся в растворе

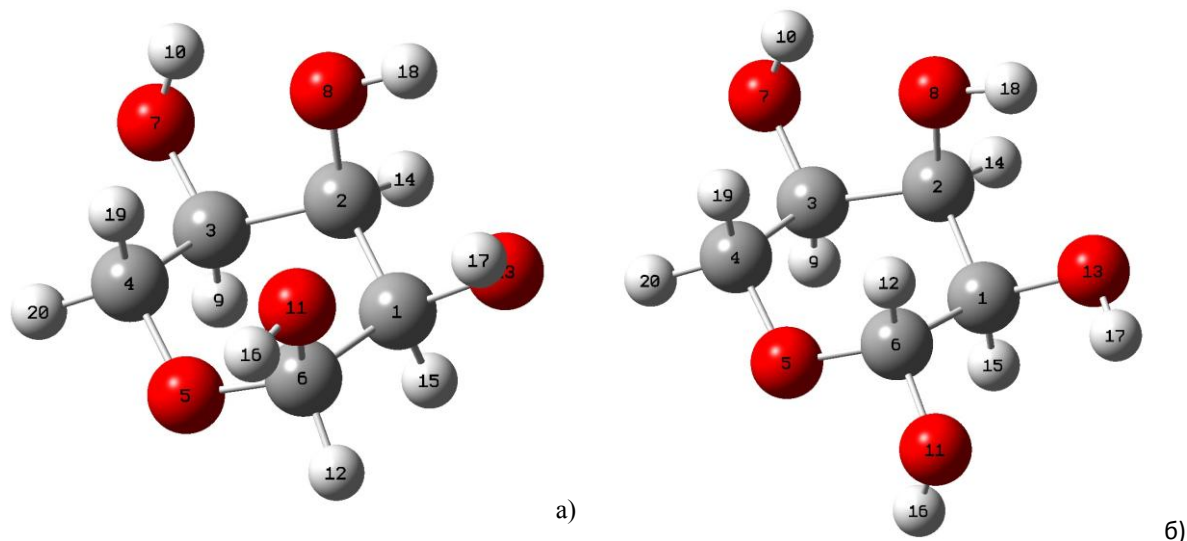


Рис. 2. Молекулярная структура α -D-рибозы а) и β -D-рибозы б)

Структуры α - и β -D-рибозы различаются пространственным расположением OH-группы в положении 2. Вычисленные и экспериментальные [6] длины валентных связей α - и β -D-рибозы представлены в табл.1.

Сравнение рассчитанной структуры изолированных молекул D-рибозы и ее комплексов с четырьмя молекулами воды показывает, что водородная связь практически не оказывает влияния на длину СН-связей. Максимальное изменение OH-связей D-рибозы не превышают 0.013 \AA , CO-связей пиранозного кольца – 0.024 \AA , CC – 0.005 \AA , CO-заместителей – 0.006 \AA . Согласие теоретической и экспериментальной структур находится в пределах ошибки используемого приближения $\sim 0.01 \text{ \AA}$ для CO- и CC-связей.

Сравнение длин связей α -, β -D-рибозы, рассчитанных методом B3LYP/6-311+G(dp), и результатов рентгено-структурного анализа [6].

Связи	Длины связей, Å				Эксперимент
	α -D-рибоза	α -D-рибоза + 4H ₂ O	β -D-рибоза	β -D-рибоза + 4H ₂ O	
C ₁ C ₂	1.529	1.535	1.542	1.540	1.52
C ₂ C ₃	1.533	1.529	1.530	1.535	1.53
C ₃ C ₄	1.536	1.533	1.529	1.531	1.54
C ₄ O ₅	1.433	1.435	1.422	1.446	1.45
C ₆ O ₅	1.414	1.431	1.401	1.424	1.44
C ₁ C ₆	1.535	1.544	1.542	1.540	1.50
C ₂ O ₈	1.429	1.429	1.425	1.425	1.42
C ₃ O ₇	1.417	1.418	1.417	1.418	1.41
C ₆ O ₁₁	1.402	1.404	1.422	1.416	1.37
C ₁ O ₁₃	1.423	1.417	1.423	1.413	1.45

В кристаллическом состоянии все молекулы рибозы объединены между собой водородными связями за счет четырех гидроксильных групп и за счет наличия кислородного атома в пиранозном цикле. Для улучшения согласования расчетных колебательных спектров D-рибозы с экспериментальными и учета влияния водородных связей, была оптимизирована геометрия D-рибозы комплексов α - и β -D-рибозы с четырьмя молекулами воды и рассчитаны их спектры КР. В них каждая из молекул воды связана двумя водородными связями с рибозой (см. рис. 3).

Анализ спектра КР выполнялся в два этапа. На первом из них была произведена теоретическая интерпретация всех форм нормальных колебаний рассматриваемых комплексов на основе локальной симметрии.

КОНЦЕПЦИЯ ЛОКАЛЬНОЙ СИММЕТРИИ

Интерпретация колебательного спектра D-рибозы затруднена низкой симметрией молекулы и высокой степенью смешивания нормальных колебаний. Смысл подхода локальной симметрии состоит в выделении наиболее симметричных фрагментов у сложной молекулы и классификации колебаний в рамках локальной точечной группы симметрий.

В основе пиранозной формы рибозы лежит циклогексановое кольцо конформации «кресло», в котором один атом углерода заменен на кислород. Данное соединение известно, как пиран.

Молекула рибозы представляет собой пиран, в котором четыре атома водорода в группах СН₂ замещены гидроксильной группой. Таким образом, колебания циклического остова могут быть проклассифицированы по более высокой группе симметрий пирана (C_s) или циклогексана (D_{3d}). Колебания ОН-заместителей, очевидно, относятся к локальной группе (C_s). Глюкоза имеет 54 нормальных колебаний. Шесть валентных С-О и С-С колебаний, три плоских и три неплоских колебаний цикла. Каждая СН-вязь дает одно валентное и два деформационных колебания (всего 18). Каждая ОН-группа дает шесть колебаний (валентные колебания С-О, валентные колебания ОН, два деформационных колебания всей группы ОН как целого, крутильное колебание ОН и угловое деформационное колебание ОН). В результате, все нормальные моды D-рибозы были отнесены к колебаниям пиранозного кольца и гидроксильных заместителей.

На рисунке 4 представлены сравнения теоретического и экспериментального спектра КР рибозы [12]. Низкочастотные полосы в диапазоне 250-600 см⁻¹ и высокочастотные в области 1200-1500 см⁻¹ хорошо воспроизводятся в расчете (рис. 5). Интенсивности полос в среднечастотной области, относящиеся к деформационным колебаниям гидроксильных заместителей, наиболее сильно возмущены влиянием водородных связей и хуже согласуются с расчетом. Полоса 418 см⁻¹ относится к симмет-

ричной деформации кольца, а полоса 544 см^{-1} является дыхательным колебанием пиранозного цикла. Наиболее высокочастотный пик в теоретическом спектре относится к симметричной деформации молекулы воды. Ему отвечает широкая полоса в спектре водного раствора рибозы. Следует отметить, что среднечастотная часть спектра носит название полос кристалличности. Согласно нашим расчетам, эти полосы происходят из-за повышения частот крутильных колебаний Н-связанных гидроксильных заместителей.

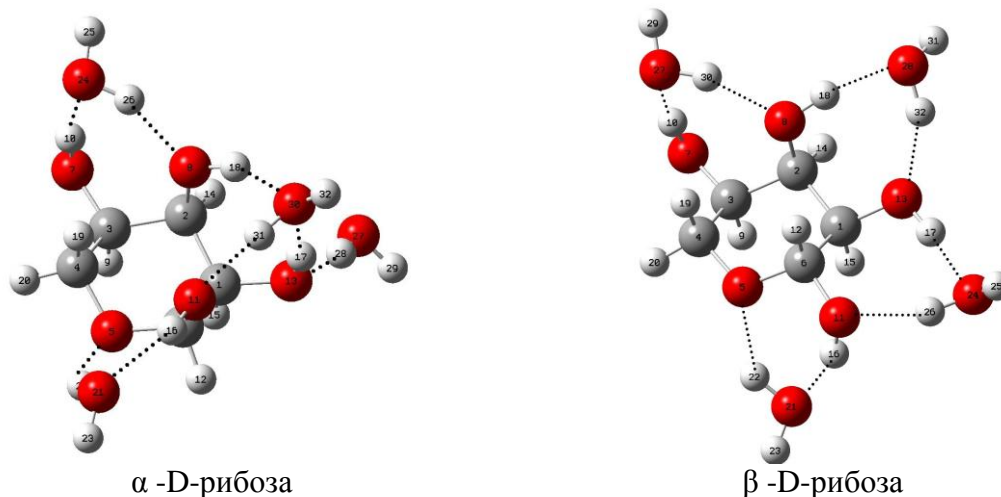


Рис. 3. Оптимизированные методом V3LYP/6-311+G(d,p) структуры комплексов D-рибозы с четырьмя молекулами воды.



Рис. 4. Теоретико-групповая корреляция в ряду структурных аналогов пиранозной формы рибозы.

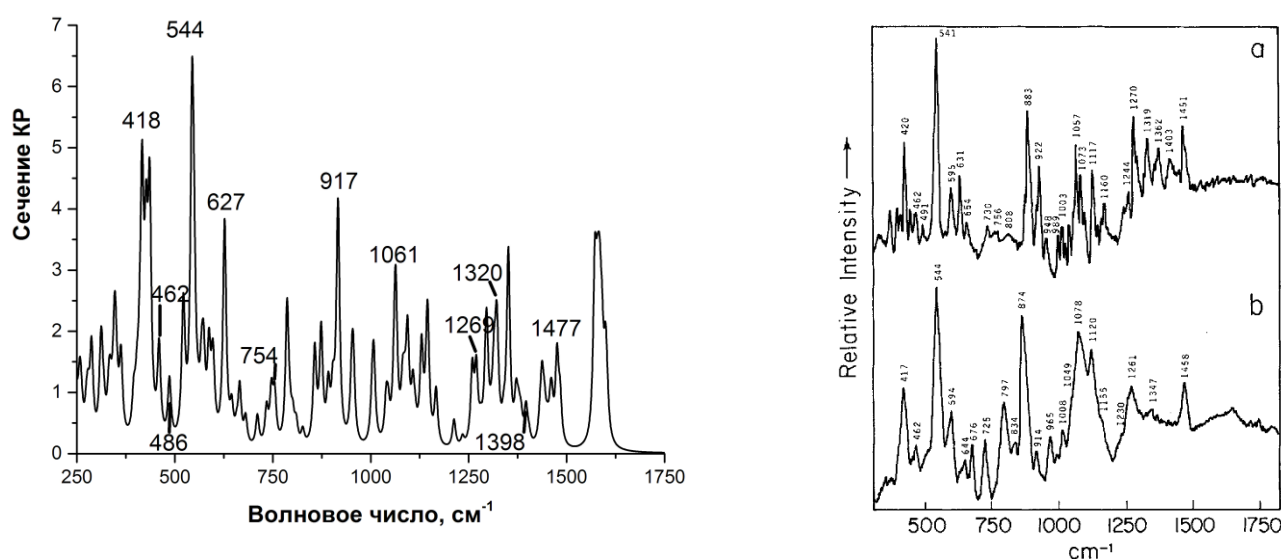


Рис. 5. Теоретический и экспериментальные КР спектры кристаллической D-рибозы и ее водного раствора [12]

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполнены расчеты структуры и КР спектров кристаллической альфа- и бета-D-рибозы в изолированном состоянии и в комплексе с четырьмя молекулами воды методом функционала плотности. На основании сравнения форм колебаний родственных рибозе соединений с более симметричной структурой выделены колебания пиранозного кольца и гидроксильных заместителей. Объяснена природа полос кристалличности в поликристаллическом состоянии.

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. Rudrum M., Shaw D. F. // J. Chem. Soc. 1965, Vol. 45, № 12, p.52-57.
4. Lemieux R. U., Stevens J. D. // J. Chem. 1966, Vol. 44, №3, p. 249-262.
5. Breitmaier E., Hollstein U. // Org. Magn. Reson. 1976, Vol. 8, №11, p. 573-575.
6. Sisak D., McCusker L.B., Zandomenighi G. et al. // Angew. Chem. Int. Ed. 2010, Vol. 49, p. 4503-4505.
7. Heidari A. // Austin J. Analyt. and Pharm. Chem. 2016, Vol. 3, № 1, p. 1 – 14.
8. Yoshida H., Takeda K., Okamura J. et al. // J. Chem. Phys. A 2002, Vol. 106, № 14, p. 3580-3586.
9. Березин К.В., Нечаев В.В., Кривохижина Т.В. // Оптика и спектроскопия 2003, Т. 94, № 3, с. 398-401.
10. Yoshida H., Ehara A., Matsuura H. // Chem. Phys. Lett. 2000, Vol. 325, № 4, p. 477-483.
11. Ugo Varetto, Molekel 5.4. <http://ugovaretto.github.io/molekel/>
12. Carmona P., Molina M. // Journal of Raman Spectroscopy 1990, Vol. 21, № 7, p. 395-400.

УСТАНОВЛЕНИЕ СТРОЕНИЯ N-, O-, S-СОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ СПЕКТРАЛЬНЫМИ МЕТОДАМИ

М.А. Ивонин, Н.О. Василькова, Д.К. Дымолазова, Н.В. Сафарова, В.В. Сорокин, А.П. Кривенько

Саратовский государственный университет

Осуществлено детальное одно- и двумерное ЯМР исследование на ядрах ^1H , ^{13}C серии новых триазоло-, тетразола-, бензимидазоло(пиримидинов)хиназолинов, содержащих линейносвязанные арильные (гетарильные) заместители. Выделены ключевые сигналы для отнесения позиционных изомеров, положения в них двойной связи. Термическая зависимость спектров ЯМР ^1H азолоазинов свидетельствует о существовании динамических процессов, обусловленных изомеризацией тетразола-азидного типа.

Ядерный магнитный резонанс (ЯМР) является одним из наиболее оперативных и информативных методов идентификации и установления строения органических соединений, а также динамических процессов, происходящих в молекулах. В ряде случаев исчерпывающую информацию несут положение сигналов в спектре ЯМР ^1H , их мультиплетность и интегральные интенсивности. Однако для сложнопостроенных соединений необходимы дополнительные исследования на ядрах ^{13}C , а также использование двумерных спектров ЯМР (COSY, HSQC, HMBC и др.)

Нами на примере серии новых соединений **1-5** ряда (рис. 1) бензимидазоло-, триазоло-, и тетразола (пиримидинов) хиназолинов с арильными и гетарильными заместителями [1-3] показано, как применение комплексов нескольких спектральных методов можно использовать для изучения строения и таутомерии поли(гетеро)циклических систем. Наличие в составе молекул фармакофорных фрагментов (бензимидазольное, триазольное, тетразольное, пиримидиновое кольца) делают подобные соединения перспективными в плане дальнейшего изучения их практически полезных свойств, поэтому установление тонкой структуры важно в том числе и для интерпретации данных о биологической активности.

Состав соединений **1-5** подтвержден данными элементного анализа, а в качестве спектральных методов выбраны ЯМР ^1H , ^{13}C , COSY ^1H - ^1H , HMBC ^1H - ^{13}C , ИК-спектроскопия.

При синтезе соединений бензимидазолохиназолинового ряда образуются ангулярно построенные системы **1**, ввиду отсутствия динамических процессов. В ЯМР ^1H спектре орто-хлорфенил-1,2,3,4,5,6-гексагидробенз[4,5]имидазоло[1,2-а]хиназолина (**1**) (рис. 2) имеются синглеты протонов H^5 (6,24 м.д.) и NH (10,62 м.д.), мультиплеты протонов алицикла (1,34-2,35 м.д.), бензимидазольного фрагмента (6,87-6,72 м.д.) и фенильного заместителя (7,10-7,57 м.д.). В ЯМР ^{13}C спектрах количество и характер сигналов соответствует предложенному строению.

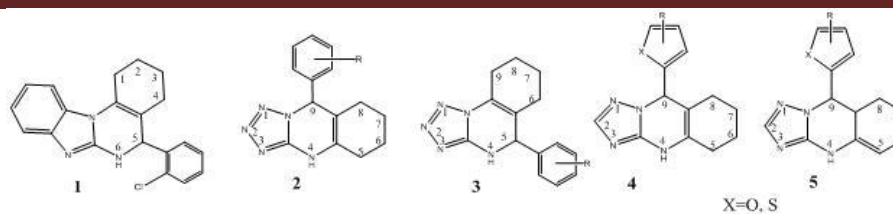
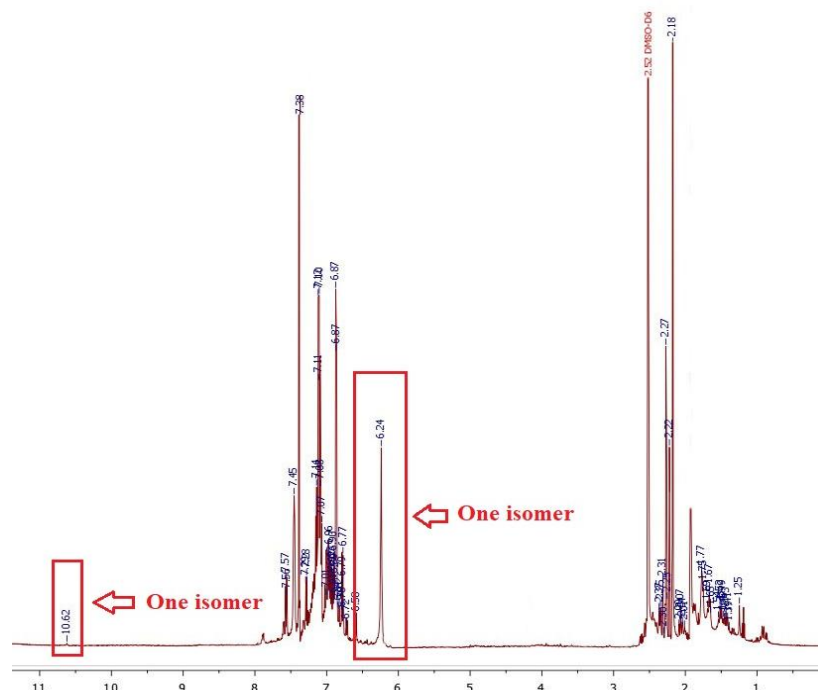


Рис. 1. Примеры серии новых соединений

Изомеры по положению двойных связей фиксированы в ряду гетарилзамещенных триазологексагидрохиназолинов **4,5**. В спектре ЯМР ^1H изомерной смеси присутствуют синглеты метиновых H^9 (5.35 м.д.) и NH-протонов (8.69 м.д.) для соединения **4** и протонов H^{8a} (1.84-1.86 м.д.), H^5 (7.25 м.д.), NH (6.81 м.д.) и H^9 (4.71 м.д.) для соединения **5**. Положение двойной связи в изомере **5** подтверждено с привлечением данных экспериментов ^1H - ^1H COSY, в которых отмечено спин-спиновое взаимодействие протонов H^9/H^{8a} (рис. 3).

Ряды тетразолохиназолинов получены нами в виде смеси позиционных изомеров (углового и линейного строения). Отнесение сигналов в ЯМР ^1H спектрах сделано с учетом данных, полученных нами ранее [4], согласно которым угловой изомер характеризуется сигналом H^5 (6.65 м.д.), а линейный - по химическому сдвигу метинового протона H^9 (6.41 м.д.) пиримидинового фрагмента (рис. 4.а.). Соотношение изомеров установлено по интегральной интенсивности ключевых сигналов протонов H^5 , H^9 (3:1). Число sp^2 и sp^3 гибридных атомов углерода в ЯМР ^{13}C спектрах соответствует строению полученных соединений. Наличие в спектре НМВС изомерной смеси соединений **2,3** кросс-пиков между сигналом протона H^5 и атомов углерода C^6 , C^{3a} , C^{5a} , C^{9a} и $\text{C}^{1'}$, подтверждает присутствие ангулярностроенного тетразолохиназолина **3** (рис.4.б.).

Термическая зависимость спектров ЯМР ^1H (опыты в ампуле ЯМР-спектрометра) свидетельствуют о протекании динамических процессов, обусловленных таутомерными превращениями позиционных изомеров тетразоло-азидного типа.

Рис.2. ЯМР ^1H спектр 5-(2-хлорфенил)-1,2,3,4,5,6-гексагидробенз[4,5]имидазоло[1,2-а]хиназолина (**1**)

В ИК-спектре смеси изомеров **2,3** в таблетке KBr зарегистрированы характеристичные полосы поглощений азидной формы (ν_{as} 2133 cm^{-1} и ν_{s} 1196 cm^{-1}), тетразольного кольца (752-704 и 1474-1444 cm^{-1}).

Полученные экспериментальные данные о строении азолохиназолинов **1-5** позволили сформулировать закономерности и особенности реакций их образования в зависимости от строения реа-

гентов, и могут служить справочным материал для установления строения родственно построенных соединений.

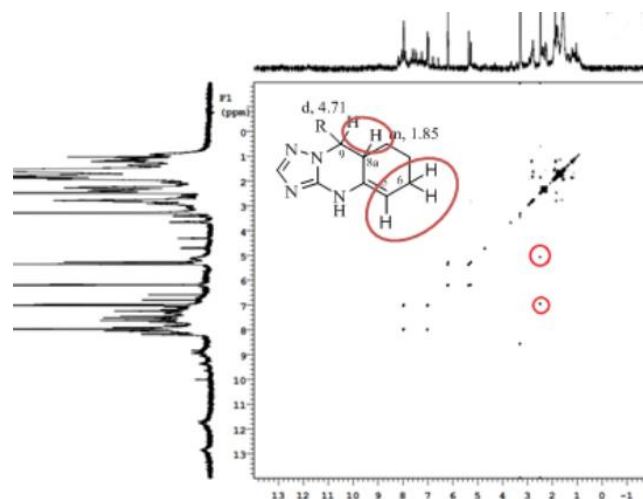


Рис. 3. Фрагмент COSY ^1H - ^1H спектра триазологексагидрохиназолина **5**.

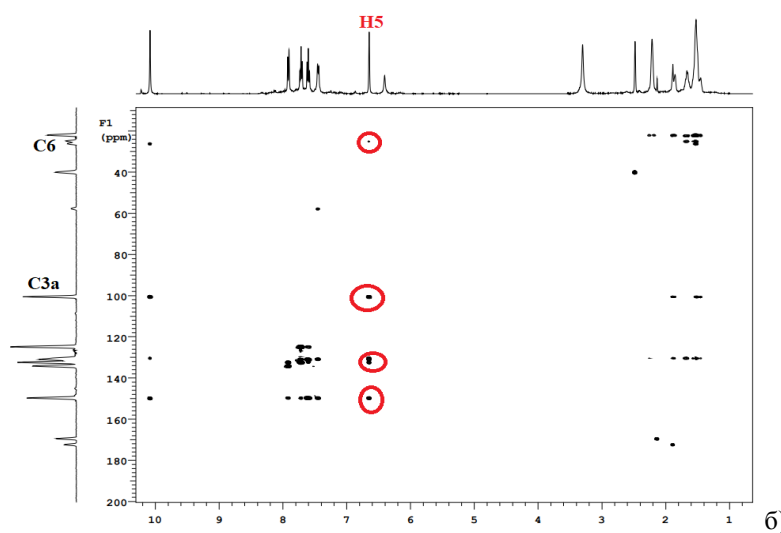
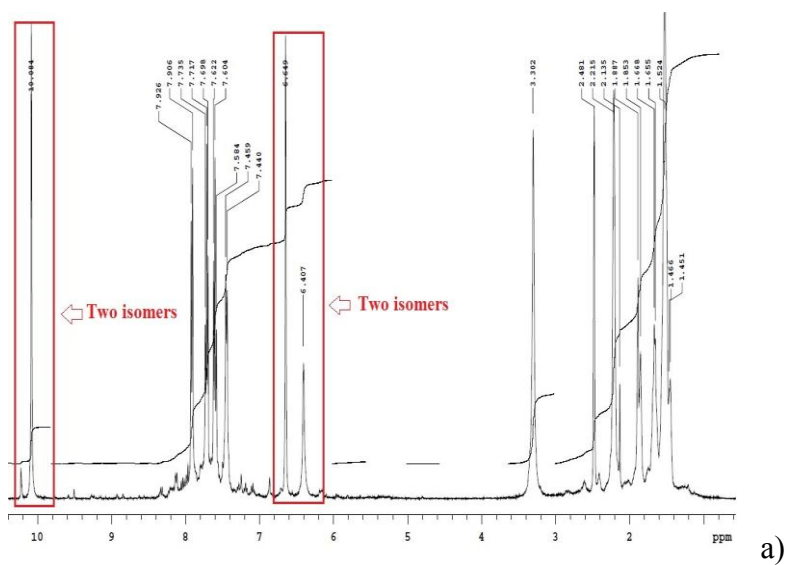


Рис.4. а) ЯМР ^1H и б) НМВС ^1H - ^{13}C изомерных тетраологексагидрохиназолинов **2,3**

Литература

1. Ивонин М.А., Дымолазова Д.К., Сорокин В.В. и др. // Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер. Химия. Биология. Экология 2016, Т. 16, вып. 4, с. 370–371.
2. Vasil'kova N.O., Anis'kov A.A., Kriven'ko A.P. // Russian Journal of Organic Chemistry 2015, Vol. 51, Issue 12, p.1766-1769.
3. Кривенько А.П., Василькова Н.О., Матикенова А.А. и др. Новое в химии тетраолоциклопиримидинов. Сб. науч. трудов XX Менделеевского съезда по общей и прикладной химии. Т.1. Фундаментальные проблемы химической науки. Екатеринбург: Уральское отделение Российской академии наук. 26–30 сентября 2016, Екатеринбург. 2016 г. С. 236.
4. Василькова Н.О., Кривенько А.П. Трехкомпонентный синтез орто-фенилзамещенных тетраологексагидрохиназолинов. Влияние орто-эффекта на соотношение позиционных изомеров. Сб. науч. тр. Международное научное издание. SWorld. Одесса. 2015. Т.25. Вып.№1 (38). С. 4-7.

ПРИМЕНЕНИЕ КВАЗИПОТЕНЦИАЛА К АНАЛИЗУ СПЕКТРОВ ЭКЗОТИЧЕСКИХ АТОМОВ

Н.А. Бойкова, О.А. Бойкова

Саратовский государственный университет

Найдены различные способы построения квазипотенциала для связанных состояний.

Проблема уточнения и согласования значений фундаментальных физических постоянных представляет собой одну из актуальных задач науки [1]. Согласование значений фундаментальных констант предполагает совместную обработку и корреляцию разнородных данных, полученных на основе измерений и расчетов, выполненных с помощью разных методов.

При решении этих задач фундаментальное значение имеет исследование энергетических спектров экзотических атомов (мюония, позитрония, мюонного водорода, антиводорода и других). Применение лазерной физики холодных атомов [2] к исследованию тонких эффектов взаимодействий в связанных состояниях частиц является экспериментальным стимулом повышения точности теоретических результатов [3]. Теоретическое исследование спектров одиночных атомов с требуемой точностью может быть выполнено только на основе квантовой теории.

Одним из методов, применяемых для релятивистского описания связанных состояний в квантовой электродинамике, является квазипотенциальный подход А.А. Логунова и А.Н. Тавхелидзе [4]. Квазипотенциальное уравнение для случая двух фермионов имеет вид [5]

$$[(\hat{G}_0^+)^{-1} - V] \varphi = 0, \quad (1)$$

где G_0 – функция Грина невзаимодействующих частиц, символы \hat{G} и G^+ означают интегрирование по временным компонентам и проектирование на состояния с положительной энергией соответственно, V – квазипотенциал. В результате выполнения указанных операций для $(\hat{G}_0^+)^{-1}$ получаем

$$(\hat{G}_0^+)^{-1} = (2\pi)^3 F^{-1}(\vec{p}, \vec{q}), \quad F(\vec{p}, \vec{q}) = \delta(\vec{p}, \vec{q})(E - \varepsilon_{1p} - \varepsilon_{2p})^{-1}, \quad \varepsilon_{ip} = \sqrt{\vec{p}^2 + m_i^2}, \quad i = 1, 2. \quad (2)$$

Релятивистский квазипотенциал V определяется следующим выражением [6]

$$V(\vec{p}, \vec{q}, E) = F^{-1} - (\hat{G}^+)^{-1}. \quad (3)$$

Выражение (3) является наиболее общим для квазипотенциала взаимодействия двух частиц.

Выделим кулоновское ядро (K_c) как основную часть квантовоэлектродинамического взаимодействия в двухчастичной системе.

$$K_c(\vec{p}, \vec{q}) = -\frac{e_1 e_2 \gamma_{10} \gamma_{20}}{(\vec{p} - \vec{q})^2}, \quad (4)$$

где γ_{i0} – матрицы Дирака. Тогда ядро однофотонного взаимодействия $K(\vec{p}, \vec{q})$ удобнее рассматривать в кулоновской калибровке и представить в виде

$$K = K_c + K_T, \quad K_T(k_0, \vec{k}) = -\frac{4\pi\alpha}{(k_0^2 + i\varepsilon - \vec{k}^2)} (\vec{\gamma}_1 \vec{\gamma}_2 - \frac{(\vec{\gamma}_1 \vec{k})(\vec{\gamma}_2 \vec{k})}{\vec{k}^2}). \quad (5)$$

Выполним разложение квазипотенциала в ряд, опираясь на уравнение Бете–Солпитера

$$V(\vec{p}, \vec{q}, E) = F^{-1} - \tau_0 + \tau_0 F \tau_0 + \dots, \quad (6)$$

где

$$\tau_0 = F^{-1} \overline{GTG}^+ F^{-1}, \quad T = K + KGK. \quad (7)$$

Ограничиваясь рассмотрением однофотонных и двухфотонных взаимодействий, для оператора τ_0 получаем

$$\tau_0 = (K_T)_{0F}^+ + (K_c G_0 K_T)_{0F}^+ + (K_T G_0 K_c)_{0F}^+ + (K_{cT})_{0F}^+ + (K_{Tc})_{0F}^+ + (K_T G_0 K_T)_{0F}^+ + (K_{TT})_{0F}^+, \quad (8)$$

где $(K_T)_{0F}^+ = F^{-1} \overline{G_0 K_T G_0}^+ F^{-1}$.

Для квазипотенциала (6) с учетом итерации имеем

$$V^{(2)} = (K_T)_{0F}^+, \quad (9)$$

$$V^{(4)} = (K_c G_0 K_T)_{0F}^+ + (K_T G_0 K_c)_{0F}^+ - K_c^+ F (K_T)_{0F}^+ - (K_T)_{0F}^+ F K_c^+ + \\ + (K_{cT} + K_{Tc})_{0F}^+ + (K_{TT})_{0F}^+ + (K_T G_0 K_T)_{0F}^+ - (K_T)_{0F}^+ F (K_T)_{0F}^+.$$

Соответствие каждой приводимой диаграмме итерационного члена улучшает ее поведение в инфракрасной области и является важной чертой квазипотенциала. Разности вкладов от приводимой диаграммы и ее итерации обеспечивают от квазипотенциала $V^{(4)}$ поправки к кулоновскому уровню энергии более высокого порядка по α . С увеличением числа обменов фотонами в высших порядках теории возмущений тенденция возрастания порядка по α от разности приводимых диаграмм и соответствующих итераций сохраняется.

Определение квазипотенциала (6) упрощается в результате выполнения интегрирования по нулевым компонентам импульсов. С помощью интегрального представления δ -функций Дирака оператор $\overline{G_0 T G_0}$ из выражения для τ_0 (7) можно представить в виде

$$\overline{G_0 T G_0} = -\frac{1}{(2\pi)^4} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} d\tau_0 \int_{-\infty}^{\infty} S_1(p_1) S_2(p_2) e^{ip_0 t} dp_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-k_0 t} dk_0 \otimes \\ \otimes \int_{-\infty}^{\infty} e^{k_0 \tau} T(k_0, k_0', \vec{p}, \vec{q}, E) dk_0' \int_{-\infty}^{\infty} S_1(q_1) S_2(q_2) e^{iq_0 \tau} dq_0 \quad (10)$$

Учтем выражения фермионных пропагаторов через проекционные операторы

$$S_1(E + p_0, \vec{p}) = \left(\frac{A_1^+(\vec{p})}{(E + p_0 - \varepsilon_{1p} + i\varepsilon)} + \frac{A_1^-(\vec{p})}{(E + p_0 - \varepsilon_{1p} - i\varepsilon)} \right) \gamma_{10}, \quad (11)$$

$$S_2(E - p_0, -\vec{p}) = \left(\frac{A_2^+(-\vec{p})}{(E - p_0 - \varepsilon_{2p} + i\varepsilon)} + \frac{A_2^-(-\vec{p})}{(E - p_0 - \varepsilon_{2p} - i\varepsilon)} \right) \gamma_{20}.$$

с помощью теории вычетов для оператора τ_0 можно получить

$$\tau_0 = T_+(\vec{p}, \vec{q}, E) + \sum_{i,k=1}^2 (\varepsilon_{ip} - E_i) \Delta T_{ik+}'(\vec{p}, \vec{q}, E) (\varepsilon_{kq} - E_k) + \\ + \sum_{i=1}^2 (\varepsilon_{ip} - E_i) \Delta T_{i+}'(\vec{p}, \vec{q}, E) + \sum_{i=1}^2 (\varepsilon_{iq} - E) \Delta T_{i+}''(\vec{p}, \vec{q}, E_i) \quad (12)$$

где $T_+(\vec{p}, \vec{q}, E) = u_1(\vec{p}) u_2(-\vec{p}) \gamma_{10} \gamma_{20} T(p_0 = 0, q_0 = 0, \vec{p}, \vec{q}, E) u_1(\vec{q}) u_2(-\vec{q})$.

Анализ показывает [6], что при исследовании уровней энергии двухчастичных изолированных атомов с точностью α^5 достаточно ограничиться первым членом суммы в выражении (12), то есть положить

$$\tau_0 \approx T_+(\vec{p}, \vec{q}, E). \quad (13)$$

В слабо связанных системах частицы находятся вблизи массовой поверхности. Поэтому при рассмотрении двухфотонных взаимодействий с точностью α^5 можно использовать приближение рассеяния и выполнить переход

$$T_+(\vec{p}, \vec{q}, E) \rightarrow T_+(0, 0, E). \quad (14)$$

В области больших виртуальных импульсов элементы амплитуды рассеяния могут быть приближенно отнесены к массовой поверхности, то есть вычислены при значениях $|\vec{p}| \approx |\vec{q}| \cong 0$, $E \cong m_1 + m_2$. Возникающие при этом инфракрасные особенности устраняются введением некоторого минимального виртуального импульса $k_{\min} \cong \varepsilon$. Конкретная величина ε несущественна, так как в сумме диаграмм инфракрасные расходимости компенсируются. При этом выполняется замена

$$T_+(0, 0, E) \rightarrow T_0^+(0, 0, m_1 + m_2). \quad (15)$$

В работах [7, 8] показано, что полное определение логарифмических поправок порядка $\alpha^6 \ln \alpha^{-1}$ в сверхтонкий сдвиг требует использования выражения для квазипотенциала (6) через амплитуду τ_0 .

Таким образом, для решения конкретных задач на связанные состояния применяются различные способы построения квазипотенциала. Их взаимосвязь выражается в последовательном использовании приближения для амплитуды и схематично может быть представлена в виде

$$\tau_0 \rightarrow T_+ \rightarrow T_+(0, 0, E) \rightarrow T_+^0(0, 0, m_1 + m_2). \quad (16)$$

Литература

1. Фритцш Х. // УФН 2009, Т.179, №4, с.383–392.
2. Колачевский Н.Н. // УФН 2008, Т.178, №11, с.1125–1235.
3. Каршенбойм С.Г., Колачевский Н.Н., Иванов В.Г. и др. // ЖЭТФ 2006, Т.129, №3, с.419–434.
4. Logunov A.A., Tavkhelidze A.N. // Nuovo cimento 1963, Vol.29, №2, p.380–390.
5. Фаустов Р.Н. // Физика элементарных частиц и атомного ядра 1972, Т.3, Вып.1, с.238–268.
6. Бойкова Н.А., Клещевская С.В., Тюхтяев Ю.Н. и др. // Ядерная физика 2003, Т.66, №5, с.925–933.
7. Бойкова Н.А., Клещевская С.В., Тюхтяев Ю.Н. и др. // Ядерная физика 2004, Т.67, №3, с.485–555.
8. Бойкова Н.А., Клещевская С.В., Тюхтяев Ю.Н. и др. // Ядерная физика 2009, Т.72, №2, с.300–306.

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ К АНАЛИЗУ ТОНКИХ СДВИГОВ В ЭКЗОТИЧЕСКИХ АТОМАХ

Н.А. Бойкова, О.А. Бойкова

Саратовский государственный университет

Предложен способ повышения точности теоретических расчетов в задачах рассеяния частиц.

Задачи прецизионного и теоретического исследования сдвигов энергетических уровней водородоподобных и экзотических атомов приобрели не только научное, но и метрологическое значение. Чтобы иметь возможность выполнять измерения различных величин с высокой степенью точности необходимо установить связь между разностью энергий и измеряемой величиной. Такой переход от микроскопических к механическим единицам осуществляется с помощью фундаментальных постоянных, связывающих различные физические величины. При этом чтобы избежать потерь точности значения фундаментальных постоянных должны быть также высоко точными.

Согласование значений фундаментальных констант предполагает совместную обработку и корреляцию разнородных данных, полученных на основе измерений и теоретических расчетов, выполненных с помощью разных методов[1]. Одним из актуальных направлений теоретических исследований является изучение тонкой структуры спектральных линий. Прогресс, достигнутый в последних экспериментах лазерной спектроскопии, ставит перед теорией задачу повышения точности расчетов энергетических сдвигов в атомах.

Рассмотрим замкнутую систему двух фермионов. В системе центра масс энергия связанного состояния двух частиц представляется в виде:

$$E = E_1 + E_2 = m_1 + m_2 + W, \quad W = -\frac{\mu\alpha^2}{2n^2}. \quad (1)$$

Используем основное уравнение квазипотенциального подхода [2] для определения собственных значений полной энергии E :

$$(E - \varepsilon_{1p} - \varepsilon_{2p})\varphi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int V(\vec{p}, \vec{q}, E)\varphi(\vec{q})d^3q, \quad (2)$$

где φ – собственная функция, соответствующая собственному значению полной энергии E . Квазипотенциал $V(\vec{p}, \vec{q}, E)$ системы двух фермионов связан с релятивистской амплитудой рассеяния $T(\vec{p}, \vec{q}, p_0, q_0, E)$. В квазипотенциальном подходе тонкая структура сдвига уровней ΔE рассчитывается путем усреднения квазипотенциала по волновым функциям уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом.

При описании связанных состояний с помощью амплитуды рассеяния вблизи массовой поверхности возникают проблемы со сходимостью ряда теории возмущений. Разработанный ранее способ устранения инфракрасных особенностей связан с введением параметра обрезания и позволяет решать поставленные задачи только с точностью α^5 . Использование этого способа возможно лишь при условии, что нефизический параметр компенсируется в сумме содержащих его выражений.

В низших порядках теории возмущений квазипотенциал представляется в виде:

$$V = T_+^{(2)} + T_+^{(4)} - T_+^{(2)}FT_+^{(2)} = V^{(2)} + V^{(4)}, \quad (3)$$

где $V^{(2)} = T_+^{(2)}$ соответствует однофотонному обмену. Потенциал для выражения $V^{(4)}$ отвечает двухфотонным обменам и итерациям

$$V^{(4)} = T_+^{(4)} - v_c F v_c - v_c F \Delta V^{(2)} - \Delta V^{(2)} F v_c + \Delta V^{(2)} F \Delta V^{(2)},$$

$$T_+(\vec{p}, \vec{q}, E) = u_1(\vec{p})u_2(-\vec{p})T(\vec{p}, \vec{q}, p_0, q_0, E)u_1(\vec{q})u_2(-\vec{q}). \quad (4)$$

Согласно теории возмущений поправка к уровням энергии с точностью до пятого порядка по α определяется выражением

$$\Delta E = \langle \varphi_c | \Delta V^{(4)} + \Delta V^{(2)} F \Delta V^{(2)} | \varphi_c \rangle = \langle \varphi_c | T_+^{(4)} - v_c F v_c - v_c F \Delta V^{(2)} - \Delta V^{(2)} F v_c | \varphi_c \rangle, \quad (5)$$

Ограничимся рассмотрением вклада от обмена двумя кулоновскими фотонами. При его вычислении, из-за наличия инфракрасных особенностей, область интегрирования нужно разбить на низко- и высокочастотную части. Соответствующая амплитуда рассеяния принимает вид:

$$T_+^{(4)} = i \frac{(\alpha Z)^2}{\pi^2} \int \frac{d^3k}{k^4} \int \frac{dk_0}{((k_0 + m_1)^2 - k^2 - m_1^2)}$$

$$\left[\frac{4m_1m_2 + 2(m_2 - m_1)k_0 - k_0^2}{((m_2 - k_0)^2 - k^2 - m_2^2)} + \frac{4m_1m_2 + 2(m_2 + m_1)k_0 + k_0^2}{((m_2 + k_0)^2 - k^2 - m_2^2)} \right], \quad (6)$$

При вычислении аналитического выражения для энергетического сдвига от обмена двумя фотонами получаем:

$$\Delta E^1 = f \left[-\frac{16\mu\alpha^2}{3\lambda^3} + \frac{4\alpha^2}{\lambda(m_1 + m_2)} - \frac{4\alpha^2}{3m_1m_2} \right] |\varphi_c(0)|^2. \quad (7)$$

Вклад вычитаемой итерации в выражении (5) приводит к результату:

$$\Delta E^2 = \langle \varphi_c(\vec{p}) | v_c F v_c + v_c F \Delta V^{(2)} + \Delta V^{(2)} F v_c | \varphi_c(\vec{q}) \rangle \cong f \left[-\frac{16\mu\alpha^2}{3\lambda^3} + \frac{4\alpha^2}{\lambda(m_1 + m_2)} \right] |\varphi_c(0)|^2. \quad (8)$$

Суммарная поправка порядка α^5 в тонкий сдвиг основного уровня энергии оказывается следующей [3]:

$$\Delta E = \Delta E^1 - \Delta E^2 \cong -\frac{4\alpha^2}{3m_1m_2} |\varphi(0)|^2. \quad (9)$$

Учет зависимости амплитуды рассеяния (5) от полной энергии и четырехмерных импульсов начального и конечного состояний позволяет выполнить вычисления более детально и получить следующую поправку:

$$\Delta E^2 = \left(-\frac{4\alpha^2}{3m_1m_2} - \frac{\alpha^2}{m_1^2} \right) |\varphi_c(0)|^2 = -\frac{4\alpha^5\mu^3}{3\pi m_1m_2} - \frac{\alpha^5\mu^3}{\pi m_1m_2} \frac{1}{\beta}, \quad \beta = \frac{m_1}{m_2}. \quad (10)$$

Отметим, что для мюония и водорода малый параметр $\beta < \alpha$. Поэтому содержащая его поправка превышает не только полученную поправку пятого порядка по константе тонкой структуры, но также вклады в тонкую структуру четвертого порядка. Кроме того в итерационном члене квазипотенциала однофотонного обмена не учитывалась кинематическая часть квазипотенциала V_{kin} , которая играет важную роль в определении тонкой структуры. При учете кинематической части квазипотенциала V_{kin} поправка к тонкому сдвигу определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} \Delta E &= \langle \varphi_c | \Delta V_{1\gamma} + V_{kin} + \Delta V_{2\gamma} + (\Delta V_{1\gamma} + V_{kin}) F (\Delta V_{1\gamma} + V_{kin}) | \varphi_c \rangle = \\ &= \Delta E^2 + \langle \varphi_c | \Delta V_{1\gamma} F V_{kin} + V_{kin} F \Delta V_{1\gamma} | \varphi_c \rangle. \end{aligned} \quad (11)$$

Анализ показывает, что слагаемое, пропорциональное β^{-1} , из выражения (10) компенсируется выражением, содержащим кинематическую часть квазипотенциала.

Исследование величины тонкого сдвига с точностью до пятого порядка по константе α было проведено на основе двух вариантов определения квазипотенциала. В первом случае возникает необходимость введения нефизического параметра λ , низко- и высокочастотные области исследовались отдельно друг от друга. Во втором способе используются естественные параметры – полная энергия и относительные импульсы – характеризующие систему двух частиц. Теория связанных состояний частиц в этом случае зависит только от целочисленных степеней α . В то же время полная энергия $E \neq m_1 + m_2$ и импульсы взаимодействующих частиц отличны от нуля. Тогда при описании связанных состояний, наряду с целочисленными по α поправками получаем логарифмические поправки [4]. Однако, часть логарифмических поправок может компенсироваться при суммировании, а часть входить в конечные результаты.

Разработанный ранее способ устранения инфракрасных особенностей введением параметра обрезания позволяет решать поставленные задачи только с точностью α^5 . Следовательно, для повышения точности теоретических результатов [5] необходим учет точной зависимости амплитуды рассеяния от энергии и импульсов взаимодействующих частиц.

Литература

1. Каршенбойм С.Г. // УФН 2008, Т.178, №10, с.1057–1064.
2. Бойкова Н.А., Клещевская С.В., Тюхтяев Ю.Н. и др. // Ядерная физика 2003, Т.66, №5, с.925–933.
3. Нюнько Н.Е., Тюхтяев Ю.Н., Фаустов Р.Н. // Теоретическая и математическая физика 1973, 16с.
4. Бойкова Н.А., Клещевская С.В., Тюхтяев Ю.Н. и др. // Ядерная физика. 2009, Т.72, №2, с.300–306.
5. Бойкова О.А., Тюхтяев Ю.Н. // Известия Саратовского университета. Серия Физика. 2011, Т.11, вып.1, с.31–37.

ОПТИКА АНИЗОТРОПНЫХ СРЕД

КАРТИНЫ РАССЕЯНИЯ ОРТОГОНАЛЬНО ПОЛЯРИЗОВАННЫХ КОМПОНЕНТ СВЕТА
ДЛЯ СТАТИСТИЧЕСКИ ВРАЩАТЕЛЬНО-ИНВАРИАНТНЫХ
ДВУЛУЧЕПРЕЛОМЛЯЮЩИХ ФАЗОВЫХ ЭКРАНОВ*Д. Д. Яковлев, Д. А. Яковлев*

Саратовский государственный университет

С помощью метода двухточечных матриц Мюллера исследуется форма угловых спектров поляризованных компонент света, рассеянного на случайно-неоднородных слоях двулучепреломляющих материалов. Показано, что для статистически вращательно-инвариантных слоев картина рассеяния в общем случае является инвариантной относительно азимутального поворота на 180° , но в определенных условиях она может быть инвариантной относительно азимутального поворота на 90° или обладать круговой симметрией. Сделанные выводы подтверждены результатами численного моделирования на примере мозаичных двулучепреломляющих слоев. Выявлены условия, при которых угловые спектры поляризованных компонент рассеянного света обладают круговой симметрией.

Особый класс задач теории рассеяния составляют задачи о рассеянии света на слоях двулучепреломляющих случайно-неоднородных сред с изменяющейся в пространстве ориентацией эффективной локальной оптической оси. Знание закономерностей рассеяния света на таких слоях важно, например, при изучении жидкокристаллических [1] и полимерных материалов [2–4]. Уже давно была обнаружена возможность характеризовать жидкокристаллические и полимерные материалы и изучать процессы структурообразования в таких материалах с помощью метода малоуглового рассеяния поляризованного света (МРПС) [2, 5]. В наиболее простом и наиболее часто используемом варианте этого метода информация об исследуемом слое извлекается из пары дифрактограмм V_v и H_v , получаемых при нормальном освещении слоя коллимированным пучком квазимонохроматического линейно поляризованного света после пропускания рассеянного слоем света через линейный анализатор при параллельной (V_v) и перпендикулярной (H_v) ориентации его оси пропускания относительно плоскости поляризации падающего света [2, 5]. Для установления связи между структурными и оптическими свойствами среды в рамках МРПС чаще всего используются подходы, опирающиеся на приближение Релея-Ганса-Дебая [2, 5]. Во многих случаях, когда это приближение неприменимо, адекватным является использование приближения фазового экрана [6–8]. При рассмотрении двулучепреломляющих сред в качестве теоретической основы для анализа при применении этого приближения может быть использована единая теория когерентности и поляризации случайных электромагнитных пучков [9]. Важным достоинством этого подхода является возможность естественным образом учесть кооперативные эффекты при рассеянии света, а также корреляционные свойства падающего излучения. Однако, несмотря на его большой потенциал, к настоящему времени этот метод был применен только к очень узкому классу рассеивающих двулучепреломляющих слоев, а именно, слоев без случайной азимутальной вариации локальной оптической оси [6, 7, 10]. Дальнейшая разработка теоретического и математического аппарата этого метода, нацеленная на расширение его возможностей, представляется нам актуальной задачей, на решение которой и направлена данная работа. В настоящей работе, используя метод двухточечных обобщенных матриц Мюллера [11], разработанный в рамках единой теории когерентности и поляризации, и приближение фазового экрана, мы исследуем, какие картины рассеяния ортогонально поляризованных компонент света могут наблюдаться для статистически вращательно-инвариантных слоев, слоев, свойства рассеяния которых в среднем не зависят от азимутальной ориентации слоя. Неоднородные слои, которые можно отнести к этому классу, часто встречаются на практике. Например, такой статистической симметрией часто обладают слои низкомолекулярных ЖК и ЖК-полимеров с так называемой шпирен-текстурой [12, 13].

Пусть однородно поляризованный коллимированный пучок падает в нормальном направлении на плоский бесконечно протяженный амплитудно-фазовый экран, находящийся в плоскости $z=0$ декартовой системы координат (x, y, z) . Для описания спектральных и корреляционных свойств падающего и прошедшего полей мы будем использовать обобщенные векторы Стокса [14]: $\mathbf{S}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \omega) \equiv \mathbf{L} \langle \mathbf{J}(\mathbf{r}_1, \omega) \otimes \mathbf{J}^*(\mathbf{r}_2, \omega) \rangle$, где $\mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega)$ – вектор Джонса, характеризующий типичный элемент статистического ансамбля реализаций спектральной

компоненты флуктуирующего электрического поля с угловой частотой ω в точке \mathbf{r} , $\langle \cdot \rangle$ обозначает усреднение по ансамблю реализаций поля,

$$\mathbf{L} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & -i & i & 0 \end{pmatrix}$$

и \otimes - символ кронекерского умножения матриц. В дальнейшем мы опускаем аргумент ω у всех функций и записываем обобщенные векторы Стокса в плоскости $z=0$ как функции от $\boldsymbol{\rho}_1 \equiv (x_1, y_1)$ и $\boldsymbol{\rho}_2 \equiv (x_2, y_2)$. Представим обобщенный вектор Стокса падающего пучка $\mathbf{S}_i(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2)$ в плоскости $z=0$ непосредственно перед экраном в виде

$$\mathbf{S}_i(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2) = g(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2) \mathbf{S}_{p-i}, \quad (1)$$

где $g(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2)$ – скалярная функция, удовлетворяющая условию: $\int g(\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\rho}) d^2 \boldsymbol{\rho} = 1$ и \mathbf{S}_{p-i} – интегральный вектор Стокса [15] падающего пучка (вектор Стокса спектральной плотности мощности пучка). Здесь и далее считаем, что все векторные и матричные операторы представлены в системе координат (x, y, z) . Обобщенный вектор Стокса поля в плоскости $z=0$ непосредственно за экраном может быть выражен следующим образом:

$$\mathbf{S}_o(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2) = \mathbf{M}(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2) \mathbf{S}_i(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2), \quad (2)$$

где

$$\mathbf{M}(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2) \equiv \left\langle \mathbf{L} \left(\mathbf{T}(\boldsymbol{\rho}_1) \otimes \mathbf{T}^*(\boldsymbol{\rho}_2) \right) \mathbf{L}^{-1} \right\rangle_A \quad (3)$$

– обобщенная матрица Мюллера [11], $\mathbf{T}(\boldsymbol{\rho})$ - матрица Джонса локального пропуска фазового экрана и $\langle \cdot \rangle_A$ - оператор усреднения по ансамблю реализаций фазового экрана. В дальнейшем мы будем считать, что фазовый экран является статистически однородным, т.е. $\mathbf{M}(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2) \equiv \mathbf{M}(\mathbf{R})$, где $\mathbf{R} \equiv \boldsymbol{\rho}_2 - \boldsymbol{\rho}_1$.

Сначала рассмотрим, как преобразуется матрица $\mathbf{M}(\mathbf{R})$ при азимутальном повороте фазового экрана вокруг оси z на некоторый угол θ . Выберем на фазовом экране до его поворота произвольные точки A_1 и A_2 ; пусть на эти точки указывают соответственно радиус-векторы $\boldsymbol{\rho}_1$ и $\boldsymbol{\rho}_2$, а вектор $\mathbf{R} \equiv \boldsymbol{\rho}_2 - \boldsymbol{\rho}_1$ имеет длину R и составляет угол β с осью x (рис. 1а). Как видно из рисунка 1, после поворота фазового экрана радиус-векторы $\boldsymbol{\rho}_1$ и $\boldsymbol{\rho}_2$ будут указывать на точки B_1 и B_2 , на которые до поворота указывали радиус-векторы $\boldsymbol{\rho}_{1B}$ и $\boldsymbol{\rho}_{2B}$. Вектор $\mathbf{R}_B = \boldsymbol{\rho}_{1B} - \boldsymbol{\rho}_{2B}$ имеет длину R и составляет угол $\beta - \theta$ с осью x . Элементы фазового экрана, находящиеся в точках B_1 и B_2 , также поворачиваются на угол θ . Отсюда следует соотношение:

$$\mathbf{M}_{AR}(R, \beta) = \hat{\mathbf{R}}(-\theta) \mathbf{M}_{BR}(R, \beta - \theta) \hat{\mathbf{R}}(\theta), \quad (4)$$

где \mathbf{M}_{AR} и \mathbf{M}_{BR} – значения матрицы \mathbf{M} до и после поворота экрана, а аргументы у \mathbf{M}_{AR} и \mathbf{M}_{BR} специфицируют соответствующие значения вектора \mathbf{R} ,

$$\hat{\mathbf{R}}(\theta) \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos 2\theta & \sin 2\theta & 0 \\ 0 & -\sin 2\theta & \cos 2\theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- матрица поворота.

Если фазовый экран является статистически вращательно-инвариантным, то при любом значении угла поворота θ должно выполняться соотношение

$$\mathbf{M}_{AR}(R, \beta) = \mathbf{M}_{BR}(R, \beta). \quad (5)$$

Из (4) и (5) следует, что функция $\mathbf{M}(R, \beta)$ должна в данном случае отвечать условию:

$$\mathbf{M}(R, \beta' - \theta) = \widehat{\mathbf{R}}(\theta) \mathbf{M}(R, \beta') \widehat{\mathbf{R}}(-\theta). \quad (6)$$

при любых значениях β' и θ . Поскольку зависимость элементов матрицы $\mathbf{M} = [m_{ij}]$ от β должна быть периодической с периодом 2π , эти элементы можно представить в виде ряда Фурье:

$$m_{ij}(R, \beta) = \sum_m c_m^{(ij)}(R) \cos m\beta + s_m^{(ij)}(R) \sin m\beta. \quad (7)$$

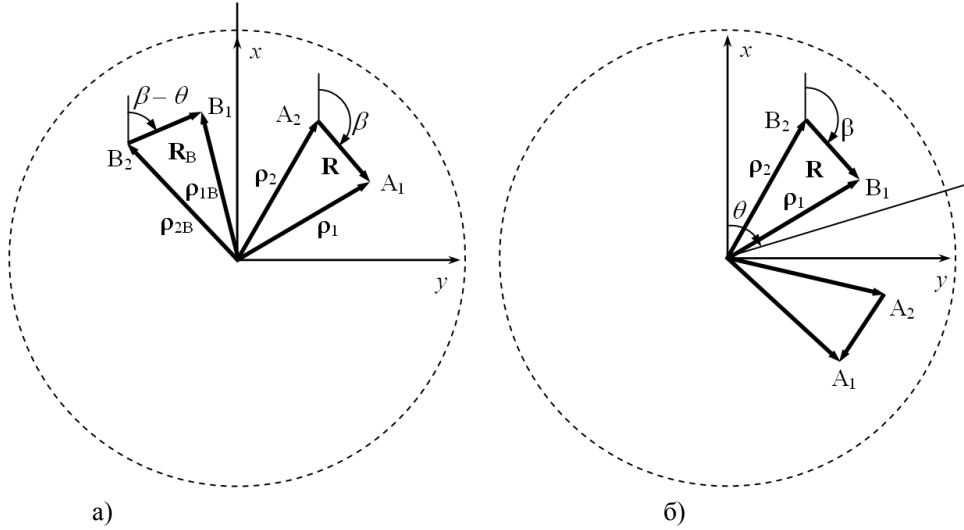


Рис. 1. Положение точек A_1, A_2, B_1, B_2 на образце до (а) и после (б) поворота фазового экрана.

Подставив (7) в (6), можно увидеть, что матрица $\mathbf{M}(R, \beta)$ удовлетворяет уравнению (6), только тогда, когда она представима в виде:

$$\mathbf{M}(R, \beta) = \mathbf{M}_R(R) + \mathbf{M}_{2\beta}(R, \beta) + \mathbf{M}_{4\beta}(R, \beta), \quad (8)$$

где

$$\mathbf{M}_R(R) = \begin{pmatrix} a_{11}(R) & 0 & 0 & a_{41}(R) \\ 0 & a_{22}(R) & a_{23}(R) & 0 \\ 0 & -a_{23}(R) & a_{22}(R) & 0 \\ a_{14}(R) & 0 & 0 & a_{44}(R) \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{M}_{2\beta}(R, \beta) = \begin{pmatrix} 0 & b_{12}(R, \beta) & b_{13}(R, \beta) & 0 \\ b_{21}(R, \beta) & 0 & 0 & b_{24}(R, \beta) \\ b_{31}(R, \beta) & 0 & 0 & b_{34}(R, \beta) \\ 0 & b_{42}(R, \beta) & b_{43}(R, \beta) & 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{M}_{4\beta}(R, \beta) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b_{22}(R, \beta) & b_{23}(R, \beta) & 0 \\ 0 & b_{23}(R, \beta) & -b_{22}(R, \beta) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$b_{12}(R, \beta) = s_D(R) \sin 2\beta + c_D(R) \cos 2\beta, \quad b_{13}(R, \beta) = c_D(R) \sin 2\beta - s_D(R) \cos 2\beta,$$

$$b_{21}(R, \beta) = s_P(R) \sin 2\beta + c_P(R) \cos 2\beta, \quad b_{31}(R, \beta) = c_P(R) \sin 2\beta - s_P(R) \cos 2\beta,$$

$$b_{24}(R, \beta) = s_V(R) \sin 2\beta + c_V(R) \cos 2\beta, \quad b_{34}(R, \beta) = c_V(R) \sin 2\beta - s_V(R) \cos 2\beta,$$

$$b_{42}(R, \beta) = s_H(R) \sin 2\beta + c_H(R) \cos 2\beta, \quad b_{43}(R, \beta) = c_H(R) \sin 2\beta - s_H(R) \cos 2\beta,$$

$$b_{22}(R, \beta) = c_B(R) \cos 4\beta + s_B(R) \sin 4\beta, \quad b_{23}(R, \beta) = c_B(R) \sin 4\beta - s_B(R) \cos 4\beta,$$

где $a_{11}(R)$, $a_{41}(R)$, $a_{22}(R)$, $a_{23}(R)$, $a_{14}(R)$, $a_{44}(R)$, $s_D(R)$, $c_D(R)$, $s_P(R)$, $c_P(R)$, $s_V(R)$, $c_V(R)$, $s_H(R)$, $c_H(R)$, $c_B(R)$ и $s_B(R)$ – функции только от R .

Опираясь на выражение (8), покажем, какие картины рассеяния в дальней зоне могут наблюдаться для статистически вращательно-инвариантных фазовых экранов.

Спектральные и поляризационные свойства прошедшего поля в дальней зоне ($z_d \gg R_b$, где R_b – радиус пучка, z_d – расстояние от экрана до плоскости детектирования; см. рис. 2) могут быть описаны с помощью одноточечного спектрального вектора Стокса $\mathbf{S}_0^{(\infty)}(\mathbf{r}_s)$, выражаемого через $\mathbf{S}_0(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2)$ следующим образом [16]:

$$\mathbf{S}_0^{(\infty)}(\mathbf{r}_s) = \frac{k^2}{(2\pi r_0)^2} \cos^2 \zeta \iint \mathbf{S}_0(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2) \exp[-iks_{\perp} \mathbf{R}] d^2 \boldsymbol{\rho}_1 d^2 \boldsymbol{\rho}_2, \quad (9)$$

где $\mathbf{r}_s \equiv r_0 \mathbf{s}$ – радиус-вектор точки в плоскости $z = z_d$, \mathbf{s} – единичный вектор в направлении \mathbf{r}_s , ζ – угол между \mathbf{s} и положительной осью z , $k \equiv 2\pi/\lambda$, λ – длина волны и \mathbf{s}_{\perp} – проекция вектора \mathbf{s} на плоскость $z = 0$, $\mathbf{R} \equiv \boldsymbol{\rho}_2 - \boldsymbol{\rho}_1$ (рис. 2). Интегрирование ведется по освещенной области фазового экрана. Подстановка (2) в (9) и замена переменных $\boldsymbol{\rho}_1$ и $\boldsymbol{\rho}_2$ на $\boldsymbol{\rho}_0 = (\boldsymbol{\rho}_1 + \boldsymbol{\rho}_2)/2$ и $\mathbf{R} = \boldsymbol{\rho}_2 - \boldsymbol{\rho}_1$ приводят к следующему выражению:

$$\mathbf{S}_0^{(\infty)}(\mathbf{r}_s) = \frac{k^2}{(2\pi r_0)^2} \cos^2 \zeta \left[\int \mathbf{M}(\mathbf{R}) G(\mathbf{R}) \exp(-iks_{\perp} \mathbf{R}) d^2 \mathbf{R} \right] \mathbf{S}_{P-i}, \quad (10)$$

где $G(\mathbf{R}) = \int g(\boldsymbol{\rho}_0, \mathbf{R}) d^2 \boldsymbol{\rho}_0$.

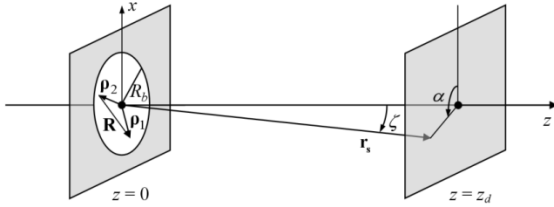


Рис. 2. Рассматриваемая геометрия эксперимента.

Рассмотрим только рассеянную компоненту прошедшего света. Как следует из (10), рассеянная компонента описывается одноточечным спектральным вектором Стокса

$$\mathbf{S}_{sc}(\mathbf{r}_s) = \frac{k^2}{(2\pi r_0)^2} \cos^2 \zeta \left[\int \mathbf{M}_{sc}(\mathbf{R}) G(\mathbf{R}) \exp(-iks_{\perp} \mathbf{R}) d^2 \mathbf{R} \right] \mathbf{S}_{P-i},$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{sc}(\mathbf{R}) &= \mathbf{M}(\mathbf{R}) - \bar{\mathbf{M}}, \\ \bar{\mathbf{M}} &\equiv \mathbf{L} \left(\langle \mathbf{T}(\boldsymbol{\rho}) \rangle_A \otimes \langle \mathbf{T}^*(\boldsymbol{\rho}) \rangle_A \right) \mathbf{L}^{-1}. \end{aligned} \quad (11)$$

Допустим, что $\mathbf{M}_{sc}(\mathbf{R})$ является гораздо более быстрой функцией от \mathbf{R} , чем $G(\mathbf{R})$, что соответствует предположению, что радиус корреляции падающего пучка намного больше радиуса корреляции неоднородностей фазового экрана. Тогда одноточечный вектор Стокса рассеянной компоненты в дальней зоне можно выразить следующим образом:

$$\mathbf{S}_{sc}(\mathbf{r}_s) \approx \frac{k^2}{(2\pi r_0)^2} \cos^2 \zeta \left[\int \mathbf{M}_{sc}(\mathbf{R}) \exp(-iks_{\perp} \mathbf{R}) d^2 \mathbf{R} \right] \mathbf{S}_{P-i}. \quad (12)$$

В дальнейшем мы будем рассматривать $\mathbf{S}_{sc}(\mathbf{r}_s)$ как функцию от полярного угла рассеяния ζ и азимутального угла рассеяния α (рис 2). Перепишем (12) следующим образом:

$$\mathbf{S}_{sc}(\zeta, \alpha) \approx \mathbf{M}_{far}(\zeta, \alpha) \mathbf{S}_{P-i},$$

где $\mathbf{M}_{far}(\zeta, \alpha) = \frac{k^2}{(2\pi r_0)^2} \cos^2 \zeta \left[\int \mathbf{M}_{sc}(R, \beta) \exp(-ik \sin \zeta R \cos(\beta - \alpha)) R d\zeta dR \right]$.

Если матрица $\mathbf{M}(\mathbf{R})$ имеет вид (8), то и матрица $\mathbf{M}_{sc}(\mathbf{R})$ также имеет вид (8). Воспользовавшись математическим свойством

$$\iint f(R) \begin{Bmatrix} \sin m\beta \\ \cos m\beta \end{Bmatrix} \exp(-ik \sin \zeta R \cos(\beta - \alpha)) R d\zeta dR = F(\zeta) \begin{Bmatrix} \sin m\alpha \\ \cos m\alpha \end{Bmatrix},$$

где $f(R)$ – произвольная функция от R и $F(\zeta)$ – функция только от ζ [17], находим, что матрица $\mathbf{M}_{far}(\zeta, \alpha)$ может быть представлена в виде:

$$\mathbf{M}_{far}(\zeta, \alpha) = \mathbf{M}_{\zeta}(\zeta) + \mathbf{M}_{2\alpha}(\zeta, \alpha) + \mathbf{M}_{4\alpha}(\zeta, \alpha), \quad (13)$$

где

$$\mathbf{M}_{\zeta}(\zeta) = \begin{pmatrix} \tilde{a}_{11}(\zeta) & 0 & 0 & \tilde{a}_{41}(\zeta) \\ 0 & \tilde{a}_{22}(\zeta) & \tilde{a}_{23}(\zeta) & 0 \\ 0 & -\tilde{a}_{23}(\zeta) & \tilde{a}_{22}(\zeta) & 0 \\ \tilde{a}_{14}(\zeta) & 0 & 0 & \tilde{a}_{44}(\zeta) \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{M}_{2\alpha}(\zeta, \alpha) = \begin{pmatrix} 0 & \tilde{b}_{DC}(\zeta, \alpha) & \tilde{b}_{DS}(\zeta, \alpha) & 0 \\ \tilde{b}_{PC}(\zeta, \alpha) & 0 & 0 & \tilde{b}_{VC}(\zeta, \alpha) \\ \tilde{b}_{PS}(\zeta, \alpha) & 0 & 0 & \tilde{b}_{VS}(\zeta, \alpha) \\ 0 & \tilde{b}_{HC}(\zeta, \alpha) & \tilde{b}_{HS}(\zeta, \alpha) & 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{M}_{4\alpha}(\zeta, \alpha) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{b}_{BC}(\zeta, \alpha) & \tilde{b}_{BS}(\zeta, \alpha) & 0 \\ 0 & \tilde{b}_{BS}(\zeta, \alpha) & -\tilde{b}_{BC}(\zeta, \alpha) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned} \tilde{b}_{DC}(\zeta, \alpha) &= b_D(\zeta) \cos(2\alpha - \gamma_D(\zeta)), & \tilde{b}_{DS}(\zeta, \alpha) &= b_D(\zeta) \sin(2\alpha - \gamma_D(\zeta)), \\ \tilde{b}_{PC}(\zeta, \alpha) &= b_P(\zeta) \cos(2\alpha - \gamma_P(\zeta)), & \tilde{b}_{PS}(\zeta, \alpha) &= b_P(\zeta) \sin(2\alpha - \gamma_P(\zeta)), \\ \tilde{b}_{VC}(\zeta, \alpha) &= b_V(\zeta) \cos(2\alpha - \gamma_V(\zeta)), & \tilde{b}_{VS}(\zeta, \alpha) &= b_V(\zeta) \sin(2\alpha - \gamma_V(\zeta)), \\ \tilde{b}_{HC}(\zeta, \alpha) &= b_H(\zeta) \cos(2\alpha - \gamma_H(\zeta)), & \tilde{b}_{HS}(\zeta, \alpha) &= b_H(\zeta) \sin(2\alpha - \gamma_H(\zeta)), \\ \tilde{b}_{BC}(\zeta, \alpha) &= b_B(\zeta) \cos(4\alpha - \gamma_B(\zeta)), & \tilde{b}_{BS}(\zeta, \alpha) &= b_B(\zeta) \sin(4\alpha - \gamma_B(\zeta)). \end{aligned}$$

Из (13) следует, что в общем случае картина рассеяния для статистически вращательно-инвариантных фазовых экранов в среднем представляет собой наложение трех картин рассеяния: инвариантной относительно азимутального поворота на 180° , инвариантной относительно азимутального поворота на 90° и обладающей круговой симметрией. Аналогичный результат был получен в работе [18] в рамках теории, опирающейся на приближение Релея-Ганса-Дебая. Отметим также, что, согласно (13), в случае падения циркулярно поляризованного света, если после фазового экрана не стоит поляризационно-селективных элементов или стоит циркулярный поляризатор, картина рассеяния будет всегда обладать круговой симметрией.

В качестве примера рассмотрим, какие H_V - и V_V -дифрактограммы могут наблюдаться при рассеянии света на тонком статистически вращательно-инвариантном мозаичном доменном слое, состоящем из одинаковых однородных по z двулучепреломляющих доменов, отличающихся друг от друга азимутальной ориентацией локальной оптической оси, для всех доменов параллельной границам слоя. В приближении прямых лучей [19] матрица $\mathbf{T}(\rho)$ для такого слоя имеет вид [20]:

$$\mathbf{T}(\rho) = \bar{\mathbf{T}} + \tilde{\mathbf{T}}(\rho), \quad (14)$$

$$\bar{\mathbf{T}} = K \cos \delta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{T}}(\rho) = iK \sin \delta \begin{pmatrix} \cos 2\varphi(\rho) & \sin 2\varphi(\rho) \\ \sin 2\varphi(\rho) & -\cos 2\varphi(\rho) \end{pmatrix},$$

где $\delta = \pi \Delta n d / \lambda$, Δn – разность главных показателей преломления материала слоя, d – толщина слоя, $\varphi(\rho)$ – угол азимутальной ориентации локальной оптической оси и K – скалярный комплексный коэффициент, учитывающий поляризационно-независимые потери и средний фазовый сдвиг. Будем считать, что выделенные направления ориентации доменов в слое отсутствуют.

Используя (3), (11) и (14), можно показать, что для такого слоя матрица $\mathbf{M}_{sc}(\mathbf{R})$ выражается следующим образом:

$$\mathbf{M}_{sc}(\mathbf{R}) = K^2 \sin^2 \delta \begin{pmatrix} c_{A\varphi-}(\mathbf{R}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_{A\varphi+}(\mathbf{R}) & s_{A\varphi+}(\mathbf{R}) & 0 \\ 0 & s_{A\varphi+}(\mathbf{R}) & -c_{A\varphi+}(\mathbf{R}) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -c_{A\varphi-}(\mathbf{R}) \end{pmatrix}, \quad (15)$$

где $c_{A\varphi-}(\mathbf{R}) \equiv \langle \cos(2(\varphi(\mathbf{p}_1) - \varphi(\mathbf{p}_2))) \rangle_A$, $c_{A\varphi+}(\mathbf{R}) \equiv \langle \cos(2(\varphi(\mathbf{p}_1) + \varphi(\mathbf{p}_2))) \rangle_A$,
 $s_{A\varphi+}(\mathbf{R}) \equiv \langle \sin(2(\varphi(\mathbf{p}_1) + \varphi(\mathbf{p}_2))) \rangle_A$.

Сопоставляя (15) с представлением (8), можно заметить, что при условии статистической вращательной инвариантности слоя функция $c_{A\varphi-}(\mathbf{R})$ не должна зависеть от β , а $c_{A\varphi+}(\mathbf{R})$ и $s_{A\varphi+}(\mathbf{R})$ должны быть периодическими функциями от β с периодом $\pi/2$. Следовательно, если $c_{A\varphi+}(\mathbf{R})$ и $s_{A\varphi+}(\mathbf{R})$ равны нулю, дифрактограммы H_v и V_v должны обладать круговой симметрией. В противном случае они не будут обладать круговой симметрией, но будут инвариантными относительно поворота на 90° .

На рисунках 3а и 3б сравниваются функции $s_{A\varphi+}(\mathbf{R})$, полученные для численно сгенерированных реализаций двух моделей слоев с различным характером изменения $\varphi(\mathbf{p})$. В первой модели (модель 1) слой состоит из однородных доменов, в пределах каждого из которых $\varphi(\mathbf{p})$ имеет постоянную величину (рисунок 3в), а во второй модели (модель 2) – из неоднородных доменов с радиальной ориентацией локальной оптической оси (рисунок 3г) относительно некоторой точки в пределах домена (цилиндрических сферолитов [21]). Функции $s_{A\varphi+}(\mathbf{R})$ рассчитывались усреднением по площади в предположении пространственной эргодичности. Для модели 2 видна ожидаемая периодичность $s_{A\varphi+}(\mathbf{R})$ как функции от β , в то время как для модели 1 функция $s_{A\varphi+}(\mathbf{R})$ равна нулю при всех β и R . На рисунках 3д-з для рассматриваемых моделей показаны дифрактограммы H_v и V_v , полученные путем численного интегрирования в приближении дифракции Фраунгофера. Если пренебречь мелкомасштабной модуляцией, которая при нашем теоретическом рассмотрении сглаживается за счет усреднения по ансамблю реализаций слоя, можно видеть, что, в соответствии с теорией, картины рассеяния для модели 1 обладают круговой симметрией, а для модели 2 – являются инвариантными только относительно поворота на 90° .

Таким образом, в данной работе установлено, что обобщенная матрица Мюллера статистически вращательно-инвариантных фазовых экранов должна иметь вид (8), и выявлены связанные с этим ограничения на вид картин рассеяния для таких экранов.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки России в рамках проекта конкурсной части госзадания №3.1586.2017/ПЧ

Литература

1. Вальков А. Ю., Романов В. П., Шалагинов А. Н. // УФН 1994, Т. 164, № 2, с. 149-193.
2. Fakirov S. Oriented Polymer Materials. Weinheim: Wiley VCH, 2002.
3. Hashimoto T., Nakai A., Shiwaku T. et al. // Macromolecules 1989, Vol. 22(1), p. 422-429.
4. Silvestri R., Chapoyt L. L. // Polymer, Vol. 33(14), p. 2891-2896.
5. Ханчич О. А. Анизотропные структуры в полимерах и их изучение методом малоуглового рассеяния поляризованного света. М. : Издательство МТИ, 2014.
6. Shirai, T. Wolf, E. // J. Opt. Soc. Am. A 2004, Vol. 21(10), p. 1907–1916.
7. Savenkov S. N., Grygoruk V. I., Muttiyah R. S. et al. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer 2009, Vol. 110(1), p. 30-42.
8. Nikolova L., Ramanujam P.S. Polarization Holography. Cambridge: Cambridge University Press, Cambridge, 2009.
9. Wolf E. // Phys. Lett. A 2003, Vol. 312(5), p. 263–267.
10. Ostrovsky A.S., Hernández García E. // Rev. Mex. Fis. 2005, Vol. 51(5), p. 442-446.
11. Korotkova O., Wolf E. // J. Mod. Opt. 2005, Vol. 52(18), p. 2659–2671.
12. Де Жен П. Физика жидких кристаллов. М: Мир. 1977.
13. Fridrikh, S. V. // Phys. Rev. E 1999, Vol. 60(2), p. 1847-1857.
14. Korotkova O., Wolf E. // Opt. Lett. 2005, Vol. 30(2), p.198-200.
15. Korotkova, O. // J. Opt. A: Pure Appl. Opt. 2008, Vol. 10(2), p.025003.
16. Korotkova O., Hoover B.G., Gamiz V.L. et al. // J. Opt. Soc. Am. A 2005, Vol. 22, p. 2547–2556.

17. Cornacchio J. V., Soni R. P. // J. Res. Natl. Bur. Stand. Sec. B 1965, Vol. 69, p.173-174.
 18. Stein R. S., Erhardt P. F., Clough S. B. et al. // J. Appl. Phys. 1966, Vol. 37(11), p. 3980-3990.
 19. Yakovlev D. A., Chigrinov V. G., Kwok H.-S. Modeling and optimization of LCD optical performance Chichester: Wiley, 2015.
 20. Шерман М. М., Яковлев Д. А. // Оптика и спектроскопия 2010, Т. 109, №2, с. 206-215.
 21. Clough S., Van Aartsen J. J., Stein R. S. // J. Appl. Phys. 1965, Vol. 36(10), p. 3072-3085.

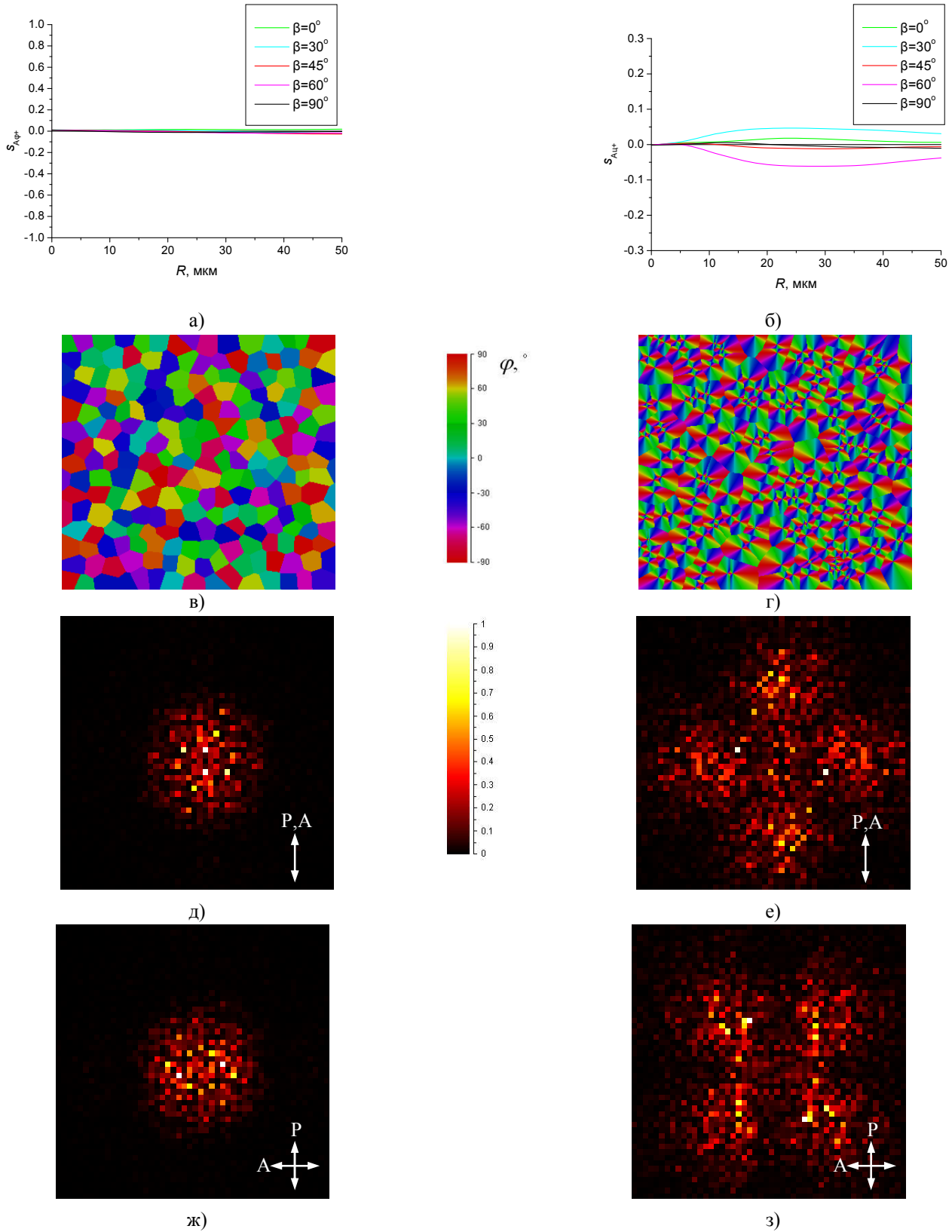


Рис. 3. (а,б) Функции $s_{A\varphi+}(\mathbf{R})$ для численно сгенерированных реализаций слоев моделей 1 (а) и 2 (б). (в,г) Пространственное распределение $\varphi(\mathbf{p})$ для рассматриваемой реализации слоя моделей 1 (в) и 2 (г). Ширина поля 317 мкм. (д-з) Рассчитанные дифрактограммы V_v (д,е) и H_v (ж,з) для рассматриваемых реализаций слоев моделей 1 (д,ж) и 2 (е,з). Стрелки показывают ориентацию оси пропускания поляризатора (P) и анализатора (A). При $\lambda = 633$ нм ширина поля составляет примерно 6° .

ЭЛЕКТРОМАГНИТНО ИНДУЦИРОВАННАЯ ПРОЗРАЧНОСТЬ ЭЛЛИПТИЧЕСКИ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ПОЛЕЙ*О. М. Паришков*

Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю. А.

Представлены результаты численного моделирования эволюции слабого эллиптически поляризованного входного пробного импульса при электромагнитно индуцированной прозрачности в поле эллиптически поляризованного управляющего излучения. Показано, что напряжённость электрического поля любого входного пробного импульса можно представить в виде суммы напряжённостей электрических полей двух субимпульсов, эллипсы поляризации которых имеют одинаковые постоянные эксцентриситеты и взаимно перпендикулярные направления больших осей, причём одна из этих осей параллельна большой оси эллипса поляризации управляющего излучения. Моделирование проведено для схемы вырожденных квантовых переходов между уровнями 3P_0 , ${}^3P_1^0$ и 3P_2 изотопа ${}^{208}\text{Pb}$ при учёте доплеровского уширения спектральных линий в предположении, что пробное поле имеет большую частоту, чем управляющее.

ВВЕДЕНИЕ

Оптическое управление электромагнитными полями и населённостями уровней энергии квантовых переходов через деструктивную интерференцию амплитуд вероятностей при резонансном возбуждении лазерным излучением представляет значительный интерес в связи с возможностями его практического применения. В зависимости от специфики постановки эксперимента такое управление лежит в основе ряда эффектов, наиболее значимыми из которых являются эффекты пленения населённостей [1, 2] и электромагнитно индуцированной прозрачности (ЭМИП) [3–5]. Ограничиваясь явлением 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, 12].

Нестационарный режим ЭМИП возникает, если длительность импульса пробного излучения меньше времён необратимой релаксации квантовой системы или сравнима с ними. Именно этот режим наиболее перспективен с точки зрения практического использования ЭМИП в системах квантовой коммуникации и информации. В работах [13, 14] проведено теоретическое исследование распространения импульсов поляризации пробного поля при ЭМИП в вырожденных двухуровневых квантовых системах. Было установлено, что перенос энергии излучения происходит со скоростью света в вакууме, тогда как волна поляризации излучения распространяется в среде меньшей скоростью. В работе [15, 16] теоретически изучался нестационарный режим ЭМИП в случаях линейной и круговой поляризации входного управляющего поля. Было показано, что возникающее под действием управляющего излучения двойное лучепреломление в первом случае приводит к разбиению в среде входного пробного импульса, поляризованного по кругу, на линейно поляризованные субимпульсы, а во втором случае линейно поляризованный входной пробный импульс распадается на поляризованные по кругу компоненты.

В данном сообщении приведены результаты численного моделирования процесса эволюции слабого короткого эллиптически поляризованного пробного импульса в поле эллиптически поляризованного управляющего излучения. Показано, что в такой ситуации на частоте пробного поля возникает эффект двойного лучепреломления, приводящий к распаду входного пробного импульса на два эллиптически поляризованных субимпульса с одинаковыми эксцентриситетами эллипсов поляризации, но разными направлениями вращения векторов напряжённости электрического поля. Субимпульсы перемещаются в среде без изменения состояния поляризации, и любой пробный импульс можно представить как сумму таких субимпульсов, распространяющихся независимо друг от друга. Другими словами, эти субимпульсы представляют собой нестационарные нормальные моды пробного излучения при ЭМИП в поле эллиптически поляризованного управляющего излучения.

Расчёты проводились для схемы квантовых переходов между вырожденными энергетическими уровнями 3P_0 , 3P_2 , ${}^3P_1^0$ изотопа ${}^{208}\text{Pb}$, в парах которого экспериментально наблюдалось ЭМИП поляризованных по кругу лазерных полей [16, 17].

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Λ-схема, лежащая в основе дальнейшего анализа, состоит из невырожденного нижнего (3P_0), пятикратно вырожденного среднего (3P_2) и трёхкратно вырожденного верхнего (${}^3P_1^0$) уровней изотопа ${}^{208}\text{Pb}$. Пусть ϕ_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 ω_1 и ω_2 ($\omega_1 > \omega_2$) – частоты этих переходов для покоящегося атома. Положим также $T_1 = 1/\Delta_1$, где Δ_1 – полуширина (по уровню e^{-1} высоты) плотности распределения частот ω'_l переходов ${}^3P_0 \rightarrow {}^3P_1^0$ ввиду эффекта Доплера.

Зададим электрическое поле двух лазерных импульсов, распространяющихся вдоль оси z , имеющих несущие частоты ω_1 и ω_2 (пробный и управляющий импульс соответственно) в виде

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

где $\mu_l = \hbar \sqrt{2l+1} / (|D_l| T_1)$, \mathbf{i}, \mathbf{j} – орт-векторы осей x и y , E_{xl}, E_{yl} – неотрицательные действительные амплитуды, а δ_{xl}, δ_{yl} – фазовые добавки x и y компонент пробного ($l=1$) и управляющего ($l=2$) полей, $k_l = \omega_l/c$. Величины $E_{xl}, E_{yl}, \delta_{xl}, \delta_{yl}$ являются функциями от z и t .

Определим переменные f_l и g_l – амплитуды правой и левой круговых компонент полей, соответственно [19]:

$$f_l = [E_{xl} \exp(i\delta_{xl}) - iE_{yl} \exp(i\delta_{yl})] / \sqrt{2}, \quad g_l = [E_{xl} \exp(i\delta_{xl}) + iE_{yl} \exp(i\delta_{yl})] / \sqrt{2}$$

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

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

где $\xi_l = \omega_l t - k_l z$, $l=1, 2$. Введём величины c_l 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. Используя уравнения Максвелла и уравнение Шредингера получим в первом приближении медленных огибающих следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial s} &= \frac{i}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} c_1 c_2^* \exp(-\varepsilon_1^2) d\varepsilon_1, & \frac{\partial f_2}{\partial s} &= -\frac{i}{\sqrt{\pi}} \xi \int_{-\infty}^{+\infty} (c_4^* c_9 + c_2^* c_7) \exp(-\varepsilon_1^2) d\varepsilon_1, \\ \frac{\partial g_1}{\partial s} &= -\frac{i}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} c_1 c_4^* \exp(-\varepsilon_1^2) d\varepsilon_1, & \frac{\partial g_2}{\partial s} &= \frac{i}{\sqrt{\pi}} \xi \int_{-\infty}^{+\infty} (c_2^* c_5 + c_4^* c_7) \exp(-\varepsilon_1^2) d\varepsilon_1, \\ \frac{\partial c_1}{\partial w} &= -i(f_1 c_2 - g_1 c_4), & \frac{\partial c_2}{\partial w} + i\varepsilon_1 c_2 &= -\frac{i}{4} (f_1^* c_1 + g_2^* c_5 - f_2^* c_7) - \gamma c_2, \\ \frac{\partial c_4}{\partial w} + i\varepsilon_1 c_4 &= \frac{i}{4} (g_1^* c_1 - g_2^* c_7 + f_2^* c_9) - \gamma c_4, & \frac{\partial c_5}{\partial w} + i(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) c_5 &= -ig_2 c_2, \\ \frac{\partial c_7}{\partial w} + i(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) c_7 &= \frac{i}{6} (f_2 c_2 - g_2 c_4), & \frac{\partial c_9}{\partial w} + i(\varepsilon_1 - \varepsilon_2) c_9 &= if_2 c_4, \end{aligned} \quad (3)$$

где

$$\varepsilon_1 = (\omega'_1 - \omega_1)/\Delta_1, \quad \varepsilon_2 = \beta\varepsilon_1, \quad \xi = 0.6\beta|D_2/D_1|^2, \quad \beta = \omega_2/\omega_1. \quad (4)$$

Здесь $\gamma = T_1/(2\tau)$, где τ – радиационное время жизни уровня $^3P_1^0$. Учёт доплеровского уширения линий квантовых переходов с помощью усреднения дипольных моментов атомов по параметру ε_1 , определённого первой формулой из (4), привёл к появлению интегралов в первых четырех уравнениях системы (3).

Для описания излучений используются параметры a_l, α_l, γ_l эллипса поляризации пробного ($l=1$) и управляющего ($l=2$) излучений. Здесь a_l – большая полуось эллипса, измеренная в единицах μ_l , α_l – угол её наклона к оси x в радианах, γ_l – параметр сжатия ($0 \leq \alpha_l < \pi$, $-1 \leq \gamma_l \leq +1$ [19]). Величина $|\gamma_l|$ определяет отношение малой оси эллипса к его большой оси. Условие $\gamma_l = 1$ ($\gamma_l = -1$) означает σ_- (σ_+) поляризацию. Если $|\gamma_l| = 1$ то угол α_l не определён, и в наших расчётах мы формально полагаем его равным -0.1 .

Далее используются безразмерные интенсивности $I_l, l=1,2$ – плотности потока энергии пробного ($l=1$) и управляющего ($l=2$) полей, измеряемые в единицах $c\mu_l^2/(8\pi)$. Размерные интенсивности \bar{I}_l пробного и управляющего полей в диапазоне температур 900–1000 К (везде ниже именно этот диапазон используется при проведении размерных оценок) можно определить в кВт/см² по формулам $\bar{I}_l = 1.3I_l$.

НОРМАЛЬНЫЕ МОДЫ: РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО АНАЛИЗА

При проведении численного анализа граничные условия, описывающие пробное излучение на входной поверхности $s=0$ резонансной среды, выбирались в виде

$$\alpha_1 = \alpha_{10}, \quad a_1 = a_{10}, \quad \gamma_1 = \gamma_{10}, \quad \delta_{x1} = \delta_{x10}, \quad (5)$$

($w \geq 0$), а входное управляющее излучение задавалось соотношениями

$$\alpha_2 = \alpha_{20}, \quad a_2 = a_{20}, \quad \gamma_2 = \gamma_{20}, \quad \delta_{x2} = \delta_{x20}, \quad (6)$$

где $\alpha_{l0}, \gamma_{l0}, \delta_{xl0}$ ($l=1,2$) и a_{20} некоторые постоянные величины. Напротив, величина a_{10} , представляющая большую полуось эллипса поляризации входного пробного поля, полагалась зависящей от времени w . В качестве начальных условий полагалось, что до прихода пробного импульса ($w < 0$) заселён только нижний энергетический уровень, так что при $w=0$ выполняется равенство $c_1 = 2$, а все остальные амплитуды вероятностей, заданные выражениями (2), равны нулю.

Положим в (5) и (6)

$$\alpha_{10} = \pi/6, \quad a_{10} = 0.2 \cdot \text{sech}[(w-20)/5], \quad \gamma_{10} = -0.5, \quad \delta_{x10} = 0; \quad (7)$$

$$\alpha_{20} = 0, \quad a_{20} = 6.6516, \quad \gamma_{20} = -0.3, \quad \delta_{x20} = 0. \quad (8)$$

Граничные условия (7) описывают входной импульс пробного излучения длительностью 1.5 нс и пиковой интенсивностью $\bar{I}_1 = 65$ Вт/см². Это излучение поляризовано эллиптически с параметром сжатия, равным -0.5 (левая эллиптическая поляризация), причём угол между главной осью его эллипса поляризации и осью x равен $\pi/6$. Постоянная интенсивность управляющего излучения согласно (8) составляет около $\bar{I}_2 = 20$ кВт/см². Интенсивность управляющего излучения в упомянутых выше экспериментальных работах [17, 18] имела примерно такую же величину. Поскольку \bar{I}_2 больше \bar{I}_1 примерно в 300 раз, то описываемая формулами (7), (8) ситуация относится к случаю слабого пробного излучения. Управляющее поле также имеет левую эллиптическую поляризацию с параметром сжатия, равным -0.3 и главной осью эллипса поляризации совпадающей с осью x . Последнее предполагается для простоты во всех последующих расчетах и не ограничивает общности рассуждений, т.к. эволюция взаимодействующих полей зависит только от угла между главными осями их эллипсов поляризации.

Результаты расчёта представлены на рис.1. Графики зависимости величины I_1 от w при различных фиксированных значениях дистанции s (толстые линии на рис.1) показывают, что на достаточно малых расстояниях внутри среды входной импульс пробного излучения начинает

разделяться на два отдельных субимпульса (импульсы 1 и 2 на рис. 1,б,в). При этом вид пунктирных и тонких кривых, описывающих эволюцию величин α_1 и γ_1 соответственно, указывает, что по мере прохождения пробным полем данной точки пространства угол α_1 плавно меняется от 0 до примерно $\pi/2$, тогда как γ_1 плавно уменьшается от значения примерно равного 0.74 до значения близкого к -0.74 . Таким образом, на малых расстояниях состояние поляризации пробного поля, определяемое значением величин α_1 и γ_1 , изменяется по мере распространения импульса в среде.

При достаточно больших значениях величины s энергия пробного излучения оказывается сконцентрированной в двух субимпульсах (импульсы 1, 2 на рис. 1,з) В области локализации каждого из этих импульсов поляризационные характеристики излучения остаются неизменными как в пространстве, так и во времени. Для импульса 1 расчёт даёт $\alpha_1 = 0, \gamma_1 = 0.7415$, а для импульса 2 имеем $\alpha_1 = \pi/2, \gamma_1 = -0.7415$. Данное обстоятельство позволяет предположить, что импульсы 1 и 2 представляют собой нормальные моды (волны) [20] пробного излучения. В анизотропной кристаллической среде нормальные моды поляризованы линейно, а в оптически активной среде они имеют круговую поляризацию. В нашем случае, когда оптическая изотропия газа снимается наложением эллиптически поляризованного управляющего излучения, нормальные моды в общем случае поляризованы эллиптически.

В дальнейшем нормальную моду, соответствующую импульсу 1 на рис.1,з, для которой $\alpha_1 = 0$, будем называть параллельной модой, а нормальную моду, для которой $\alpha_1 = \pi/2$, – перпендикулярной модой. Отметим, что параллельная мода распространяется быстрее перпендикулярной. Если обозначить через v скорость нормальной моды, то при рассматриваемых нами условиях для параллельной моды находим $c/v \approx 16$, тогда как для перпендикулярной моды $c/v \approx 40$.

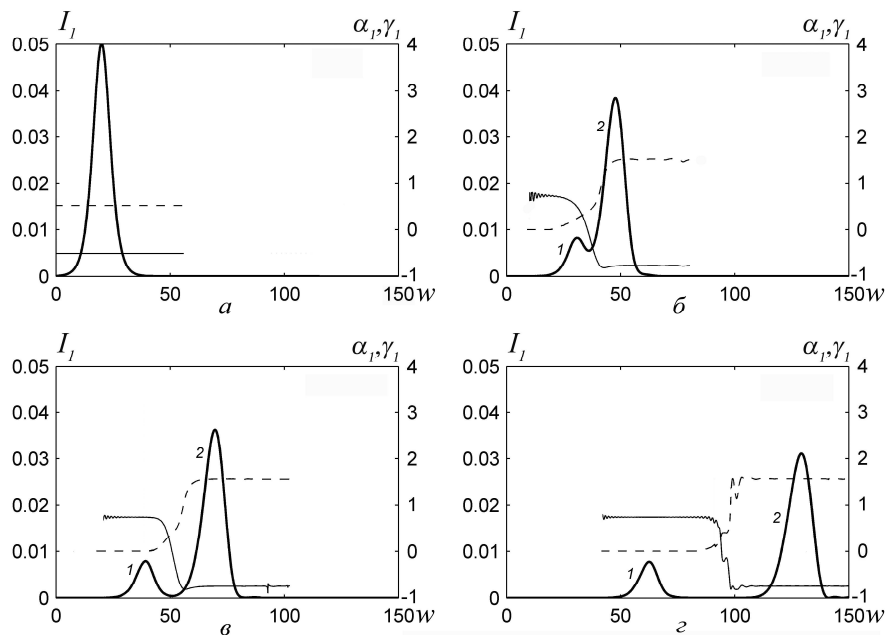


Рис.1. Эволюция характеристик пробного поля в среде при $s=0$ (а), $s=100$ (б), $s=180$ (в) и $s=400$ (з); I_1 – толстые линии, α_1 – пунктир, γ_1 – тонкие линии.

Используя приведённые выше результаты можно сделать следующее предположение. Параметры сжатия эллипсов поляризации параллельной и перпендикулярной нормальных мод могут быть представлены соответственно в виде $\gamma_1 = -\text{sgn}(\gamma_2)\bar{\gamma}_1$ и $\gamma_1 = \text{sgn}(\gamma_2)\bar{\gamma}_1$, где $\bar{\gamma} \geq 0$ – модуль

параметров сжатия, одинаковый для обеих мод, а $\text{sgn}(x)$ - знаковая функция, равная -1 при $x < 0$, 0 при $x=0$ и $+1$ при $x > 0$. Для рассмотренных выше ситуации $\bar{\gamma}_1 = 0.7415$.

Входное пробное поле (7) можно представить как сумму нормальных мод. Используя стандартные определения [19] получаем следующее описание параметров эллипса поляризации параллельной моды на входе в резонансную среду:

$$\alpha_{10}^{(1)} = 0, \quad a_{10}^{(1)} = 0.0720 \cdot \text{sech}[(w-20)/5], \quad \gamma_{10}^{(1)} = 0.7415, \quad \delta_{x10}^{(1)} = -0.4991. \quad (9)$$

Для перпендикулярной моды подобным образом получаем

$$\alpha_{10}^{(2)} = \pi/2, \quad a_{10}^{(2)} = 0.1646 \cdot \text{sech}[(w-20)/5], \quad \gamma_{10}^{(2)} = -0.7415, \quad \delta_{x10}^{(2)} = 0.2865. \quad (10)$$

Результаты двух расчётов с использованием данных (9), (10) совместно с условиями (8) для входного управляющего излучения представлены на рис.2 и демонстрируют эволюцию обеих нормальных мод в среде. Параллельность оси времени отрезков прямых 2 и 3 и независимость от расстояния s высота их расположения на рис.2, а-г свидетельствуют о неизменности поляризационных характеристик α_1 и γ_1 каждой нормальной моды при её распространении в среде. Это свойство входит в стандартное определение нормальных мод. Сумма интенсивностей нормальных мод на каждом расстоянии s , как показывает расчёт, совпадает (с точностью около 0,2%) с интенсивностью пробного поля первого расчёта. Данное обстоятельство имеет место в виду того, что нормальные моды пробного поля образуют ортогональную пару.

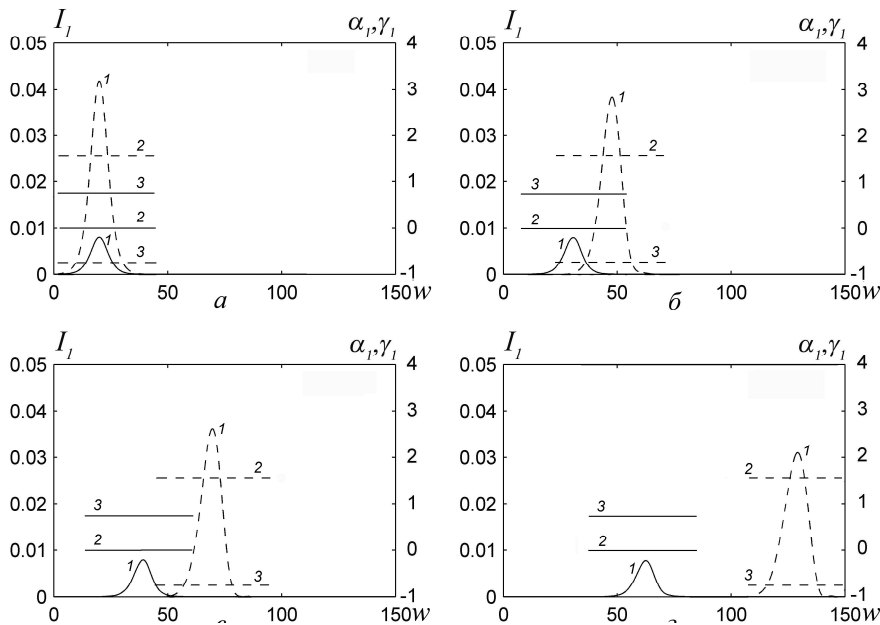


Рис.2. Характеристики параллельной (сплошные линии) и перпендикулярной (пунктир) нормальных мод на расстоянии $s=0$ (а), $s=100$ (б), $s=180$ (в) и $s=400$ (г): I_1 – кривые 1, α_1 – кривые 2, γ_1 – кривые 3.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты расчётов свидетельствуют о том, что при ЭМИП в поле эллиптически поляризованного управляющего излучения газообразная среда приобретает способность двойного лучепреломления с эллиптически поляризованными нормальными модами пробного поля. Отметим, что двойное лучепреломление с нормальными модами такого типа имеет место при распространении радиоволн в замагниченной космической плазме [21]. Большая ось эллипса поляризации одной из нормальных мод пробного поля параллельна большой оси эллипса поляризации управляющего излучения, тогда как большая ось эллипса поляризации другой

нормальной моды перпендикулярна к ней. Отношение малой оси к большой одинаково для эллипсов поляризации обеих мод.

Литература

1. Агапьев Б.Д., Горный М.Б., Матисов Б.Г. и др. // УФН 1993, Т.163, с.1.
2. Vitanov N.V., Rangelov A. A., Shore B.W. et al. // Rev. Mod. Phys. 2017, Vol.89, p. 015006.
3. Harris S.E. // Phys. Today 1997, Vol.50, p.36.
4. Lukin M. D. // Rev. Mod. Phys. 2003, Vol.75, p.457.
5. Fleischhauer M., Imamoğlu A., Marangos J. P. // Rev. Mod. Phys. 2005, Vol.77, p.633.
6. Duan L.-M., Lukin M. D., Cirac J. I. et al. // Nature 2001, Vol.414, p.413.
7. Sinatra, A. // Phys. Rev. Lett. 2006, Vol.97, p.253601.
8. Martinelli M., Valente P., Failache H. et al. // Phys. Rev. A 2004, Vol.69, p.043809.
9. Godone A., Micallizio S., Levi F. // Phys. Rev. A 2002, Vol.66, p.063807.
10. Lukin M. D., Imamoğlu A. // Nature 2001, Vol.413, p.273.
11. Kocharovskaya O., Mandel P. // Phys. Rev. A 1990, Vol.42, p.523.
12. Попов А.К. // Изв. РАН. Сер. физ. 1996, Т.60, с.99.
13. Зеленский И.В., Миронов В.А. // ЖЭТФ 2002, Т.121, с.1068.
14. Yudin V.I., Basalaev M.Yu., Brazhnikov D.V. et al. // Phys. Rev. A 2013, Vol.88, p.023862.
15. Parshkov, O.M. // Quant. Electron. 2011, Vol.41, с.1010.
- 16 Parshkov, O.M. // Quant. Electron. 2015, Vol.45, с.1010.
17. Kasapi A., Maneesh Jain, Yin G. Y. et al. // Phys. Rev. Lett. 1995, Vol.74, p.2447.
18. Maneesh Jain, Kasapi A., Yin G. Y. et al. // Phys. Rev. Lett. 1995, Vol.75, p.4385.
19. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. М.: Наука, 1970.
20. Салех Б., Тейх М. Оптика и фотоника. Принципы и применения. Т.1 Долгопрудный: Изд. Дом Интеллект, 2012.
21. Лонгейр М. Астрофизика высоких энергий. М.: Мир, 1983.

МЕТОДИКА ПРЕПОДАВАНИЯ ФИЗИКИ

ТРАЕКТОРНО-ВЕРОЯТНОСТНЫЙ ДУАЛИЗМ В ХАОТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКЕ:
ОСОБЕННОСТИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

В.М. Аникин

Саратовский государственный университет

Приводятся примеры вычислительных трудностей при компьютерном моделировании характеристик отображений, демонстрирующих хаотическое поведение.

ВВЕДЕНИЕ

Одномерные отображения вида

$$x_{n+1} = g(x_n), \quad x_n \in (a, b), \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

где $g(x)$ – итеративная функция, чувствительная к изменениям начальных условий, (a, b) – интервал изменения переменной, являются простейшими моделями динамического хаоса [1]. Они не утратили своего и научного, и методологического значения для нелинейной науки. Собственно, первые серьезные шаги на пути ее изучения и начинаются со сценария М. Фейгенбаума перехода к хаосу, обнаруженного впервые именно для одномерных отображений. Вторым важным пример связан с развивавшейся коллективом авторов во главе с И. Р. Пригожиным фундаментальной концепцией относительно определяющей роли хаоса в возникновении "стрелы времени" (необратимости физических процессов при наличии обратимого характера уравнений движения) с привлечением в качестве базового объекта теории простейшего диадического отображения (двоичного сдвига Бернулли).

Привлекательные черты «малоразмерной нелинейной динамики» не исчерпываются конкретными применениями соответствующих моделей для описания нерегулярных процессов. Специфика отображений малой размерности заключается в том, что в ряде случаев возможно аналитическое вычисление основных траекторных, вероятностных и спектральных характеристик отображений, включая отыскание точного решения задачи о скорости установления равновесного состояния в динамической системе, скорости расщепления корреляций траекторий отображения и корреляций возможных наблюдаемых, соотнесенных с этой траекторией. Аналитические решения для хаотических динамических систем, характеризующихся чувствительностью к начальным условиям и параметрам, отличаются высшей степенью достоверности, поскольку могут быть подвергнуты соответствующим проверкам вплоть до подстановки решений в исходные уравнения и организацией эквивалентных аналитических вычислений. Исследование более сложных систем численными методами в связи с конечностью множества машинных чисел и ограниченной разрядностью представления чисел в компьютере может сталкиваться с большими проблемами, вплоть до появления результатов, на самом деле являющихся машинными «фантомами». Ниже приводятся примеры, демонстрирующие особенности численного моделирования дискретных хаотических систем.

ТРАЕКТОРНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОТОБРАЖЕНИЯ ГАУССА

Тех, кто представляет, как устроено множество машинных чисел, и знаком с особенностями машинной арифметики, всегда интересует вопрос об адекватности получаемых численных результатов реальным свойствам исследуемых моделей, степени точности (погрешности) расчетов. Основная опасность – появление в машинной модели качеств, не свойственных реальному объекту. Множество машинных чисел дискретно, конечно и ограничено; оно состоит исключительно из рациональных чисел с жестко фиксированным числом цифр в мантиссе; соседние машинные числа отличаются друг от друга на шаг, зависящий от диапазона [2]. Такая структура множества машинных чисел обуславливает представление как иррациональных, так и многих рациональных чисел с ошибкой округления в связи с невозможностью их точной реализации в системах счисления, положенных в основу машинной арифметики. Кроме того, особенности структуры машинных чисел и машинного сложения на основе выравнивания порядков у слагаемых приводят к нарушению обычных арифметических правил, действующих на числовом континууме: результат может зависеть от порядка суммирования, причем сложить друг с другом некоторые машинные числа просто невозможно.

S.Ushiki и M.Yamaguti [3,4] показали, что неудачная дискретизация непрерывной нехаотической системы может привести к хаотической дискретной схеме. В случае хаотических отображений на компьютере истинную траекторию получить *невозможно* – ни периодическую, ни аperiodическую. То, что мы наблюдаем как результат счета, является суперпозицией эффектов машинной арифметики и чувствительности отображений к начальным условиям. Для отображения Гаусса

$$x_{n+1} = \left\{ \frac{1}{x_n} \right\}, \quad x_n \in (0, 1), \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

эта ситуация чрезвычайно прозрачна и легко демонстрируется: если *теоретически* все траектории, стартующие из *рациональных* точек, должны завершаться в нуле, причем за конечное число шагов, то при машинном счете в силу неточности представления рациональных чисел возникает некая длинная траектория. В [5] в качестве примера приводится траектория из стартовой точки $x_0 = 0,3$ (теоретически дающей ноль при второй итерации), рассчитанная на компьютере Apple SANE, 65000 первых точек которой не продемонстрировали какой-либо периодичности! На самом деле, конечно, стартовым при машинных расчетах было не само число $x_0 = 0,3$, а его двоичное представление, которое отличается от "оригинала", поскольку не представляется двоичным числом с конечным числом разрядов.

Используя представление чисел в виде непрерывных дробей, можно необыкновенно изящно проиллюстрировать чувствительную зависимость отображения Гаусса к изменению начальных условий [6]. Основываясь на аксиоме Архимеда, внутри интервала произвольно малой длины ε можно выбрать два числа: 1) рациональное число $p/n = //a_1, a_2, \dots, a_i //$ (двойные наклонные скобки обозначают непрерывную дробь с коэффициентами a_k), где $n > 1/\varepsilon$ – наименьшее целое, превосходящее $1/\varepsilon$, и 2) близкое к p/n иррациональное число $p/n = //a_1, a_2, \dots, a_i, N, 1, 1, 1, \dots //$ (N – достаточно большое число), принадлежащее к *благородным* числам (их разложение в непрерывные дроби заканчивается бесконечной последовательностью единиц). Траектория, стартующая из рациональной точки, за конечное число шагов порядка $\log n$ (это отвечает закономерностям алгоритма Евклида [7]) достигнет нулевой точки, а орбита, стартующая из точки благородного сечения, в процессе итераций (и сдвигов!) "возьмет в вилку" золотое сечение $\Phi = (\sqrt{5} - 1)/2 = //1, 1, 1, \dots // = 0,61803\dots$. И, таким образом, за конечное число шагов первоначально близкие точки окажутся разделенными конечным интервалом.

ЗАДАЧА НА СОБСТВЕННЫЕ ФУНКЦИИ И ЧИСЛА ОПЕРАТОРА ПЕРРОНА-ФРОБЕНИУСА

Наиболее наглядным свойством динамических систем, демонстрирующих хаотическое поведение, является чувствительная зависимость их траекторий от стартового значения. В этом смысле такие системы можно считать *неустойчивыми*. Но с позиции их вероятностного описания они *устойчивы* относительно инвариантного распределения. Для описания вероятностных свойств хаотических отображений вводится оператор Перрона-Фробениуса, задающий преобразование вероятностных плотностей при итерациях отображения, элементами которого выступают уже *случайные величины*.

Общий вид оператора Перрона-Фробениуса, отвечающего отображению с итеративной функцией $g(t)$

$$Pf(x) = \int f(t)\delta(x - g(t))dt.$$

Собственные функции $\psi_k(x)$ и собственные числа λ_k ($k = 1, 2, 3, \dots$) оператора Перрона-Фробениуса удовлетворяют уравнению:

$$P\psi_k = \lambda_k\psi_k, \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

Вычисление собственных функций и собственных чисел оператора Перрона-Фробениуса представляют нетривиальную задачу, что обусловлено тем, что оператор не является самоспряженным. В таблицах собственных значений, полученных при самых первых компьютерных расчетах [8, с. 589], наблюдается «сбой» в знаках собственных чисел:

$\lambda_1 = 0,9999999$ – первое число, отвечающее инвариантной плотности;

$\lambda_2 = 0,30366300$ – «фундаментальная константа, к счастью, никак не связанная с более известными постоянными» (Дональд Кнут);

$\lambda_3 = 0,1008845$; $\lambda_4 = -0,04084584$; $\lambda_5 = -0,0354962$; $\lambda_6 = 0,0128438$.

В этом ряду четвертое число – машинный «фантом», такого собственного значения оператор Перрона-Фробениуса отображения Гаусса не имеет! Комментируя «нарушение гармонии» в указанном ряду собственных значений, К. И. Бабенко, автор [8], отмечает: «Это удивительно, если учесть, сколь совершенна аппроксимация, примененная нами». Объяснение и одновременно предостережение крупнейшего специалиста в области численного анализа на будущее: «Для *самоспряженных* операторов такие «казусы» *невозможны*, и данный пример является предупреждением, что в *несамоспряженном* случае при дискретизации следует ожидать всяческих подвохов» [8, с. 590].

ВЕРИФИКАЦИЯ ЧИСЛЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

В численных методах (при решении нехаотических задач) особенности структуры машинных чисел учитывают посредством построения «хитроумных» алгоритмов для проведения расчетов, скажем, в «выгодных» (дающих наименьшую погрешность) числовых диапазонах (классический пример – алгоритм

решения системы линейных алгебраических уравнений методом Гаусса с выбором главного элемента) или, например, посредством организации «безошибочных вычислений» на основе модульной арифметики.

При численном решении задач на собственные функции и собственные значения оператора Перрона-Фробениуса для верификации результатов может быть использовано общее свойство собственных функций этого оператора. Первая собственная функция для рассматриваемого отображения была известна Гауссу:

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\ln 2} \frac{1}{1+x}, \quad x \in (0,1).$$

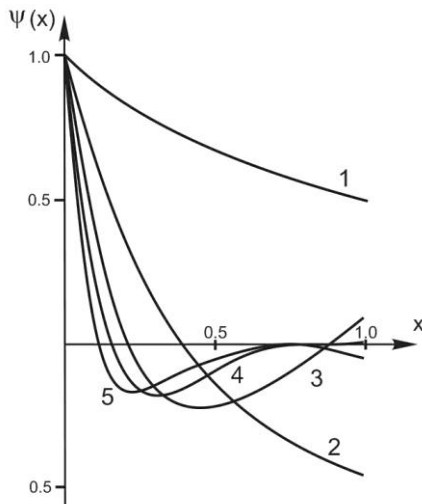
Она нормирована как инвариантная плотность: $\int \psi_1(x) dx = 1$. А вот, как показано в [1], интеграл по мере Лебега от всех других собственных функций $\psi_k(x)$ оператора Перрона-Фробениуса для любых (!) отображений по области определения отображения равен нулю:

$$\int \psi_k(x) dx = 0, \quad k = 2, 3, \dots$$

Для иллюстрации сказанного на рисунке приведен график первых пяти собственных функций оператора Перрона-Фробениуса для отображения Гаусса. Собственные функции (за исключением исключительно положительной инвариантной плотности $\psi_1(x)$) имеют области принятия как положительных, так и отрицательных значений, при этом величины площадей криволинейных трапеций, построенных на участках значений собственных функций с разными знаками, численно равны.

Для качественной оценки правильности расчета собственных чисел может служить их знакопеременность. Соответствующую информацию можно получить из сравнения характеристик исходного отображения с характеристиками отображения, в котором итерационная функция заменена более простым выражением. В случае отображения Гаусса можно говорить, например, о функции с конечным числом ветвей, а именно: выберем кусочно-линейное отображение с тремя ниспадающими ветвями (инверсный сдвиг Бернулли с коэффициентом 3 [1]):

$$x_{n+1} = 1 - \{3x_n\} = \begin{cases} -3x_n + 1, & x_n \in (0, 1/3), \\ -3x_n + 2, & x_n \in (1/3, 2/3), \\ -3x_n + 3, & x_n \in (2/3, 1). \end{cases}$$



Собственные функции отображения Гаусса [1]: 1– инвариантная плотность, 2–5 – собственные функции последующих порядков (ординаты показаны с масштабным коэффициентом ln2)

В таблице проводится сравнение значений собственных чисел оператора Перрона-Фробениуса для отображения Гаусса, полученных численно [8], с точными значениями $\lambda_k = 1/(-3)^k$ [1] собственных чисел оператора для кусочно-линейного отображения $x_{n+1} = 1 - \{3x_n\}$.

Несмотря на незначительное отличие этих величин, речь не идет о буквальной эмуляции отображения Гаусса простым кусочно-линейным отображением. Здесь интересен качественный аспект: хаотические отображения с полными ветвями, имеющими «отрицательный» наклон, обладают в дискретном спектре оператора Перрона-Фробениуса знакопеременными собственными числами! Другими словами, наличие двух соседних собственных чисел с одинаковыми знаками, говорит о неточности расчетов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Несамосопряженность – определяющее свойство оператора Перрона-Фробениуса, которое обуславливает неортогональность системы его собственных функций. Соответственно как аналитическое, так и численное нахождение собственных чисел и собственных функций этого оператора в любом случае

представляет собой нетривиальную вычислительную задачу. Точно эта задача решается лишь для кусочно-линейных отображений с полными (переводящими подынтервал своего определения на полный интервал задания отображения) [1,9].

Таблица
Таблица значений собственных чисел оператора Перрона–Фробениуса для отображения Гаусса и кусочно-линейного отображения $x_{n+1} = 1 - \{3x_n\}$

	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_6	λ_7
Отображение Гаусса	-0,303663	0,10088	-0,03550	0,01284	-0,00472	0,00175
Кусочно-линейное отображение $x_{n+1} = 1 - \{3x_n\}$	-0,(3)	0,(1)	-0,(037)	0,(012345679)	-0,0041115...	0,0013717...

Литература

1. Аникин В. М., Голубенцев А. Ф. Аналитические модели детерминированного хаоса. М. : ФИЗМАТЛИТ, 2007, 328 с.
2. Годунов С.К., Антонов А.Г., Кирилюк О.П., Костин В.И. Гарантированная точность решения систем линейных уравнений в евклидовых пространствах. Новосибирск: Наука, 1988, Гл. 4.
3. Ushiki S. // Physica D 1982, Vol.4, p.407–424.
4. Yamaguti M., Ushiki S. // Physica D 1981, Vol. 3, p. 618–626.
5. Corless R.M. // Amer. Math. Monthly 1992, Vol. 99, p. 203–215.
6. Corless R.M., Frank G.W., Monroe J.G. // Physica D 1990, Vol. 46, p. 241–253.
7. Кнут Д. Э. Искусство программирования: в 3-х т. Т. 2: Получисленные алгоритмы. 3-е изд. / Пер. с англ. М.: Вильямс, 2000, с. 407–411.
8. Бабенко К.И. Основы численного анализа. М.: Наука, 1986, 744 с.
9. Аникин В. М., Аркадакский С. С., Ремизов А. С. Несамосопряженные линейные операторы в хаотической динамике / под ред. В. М. Аникина. Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 2015, 96 с.

РОЛЬ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ПОСТОЯННЫХ В ФОРМИРОВАНИИ ФИЗИЧЕСКИХ ТЕОРИЙ

Н.А. Бойкова, О.А. Бойкова

Саратовский государственный университет

В работе обсуждено значение фундаментальных физических постоянных в формировании общих теорий

О научных проблемах метрологии, связанных с установлением значений физических постоянных с достаточной степенью точности, с необходимостью согласования экспериментальных значений физических величин, полученных на основе измерений, выполненных в разных областях физики, в учебной литературе сведений не содержится. Не уделяется внимание и анализу их роли в формировании современных научных представлений об окружающем нас мире. Вместе с тем проблема уточнения и согласования значений фундаментальных физических постоянных представляет собой одну из актуальных и нерешенных проблем науки [1]. Согласование значений фундаментальных констант предполагает совместную обработку и корреляцию разнородных данных, полученных на основе измерений и расчетов, выполненных с помощью разных методов. Совокупная обработка собранных мировых данных является важной задачей метрологии и проводится Международной рабочей группой Комитета данных для науки и техники (КОДАТА) по фундаментальным константам раз в четыре года.

Фундаментальные постоянные буквально пронизывают все разделы современной физики и входят в качестве важнейших параметров в различные физические теории. Их появление в науке сопровождается развитием соответствующих физических теорий. Так, с задачами теории гравитации неразрывно связана постоянная теории тяготения G , которая исторически оказалась первой физической константой и была введена Ньютоном в 1687 г. Исследования катодных лучей в электромагнитных полях, выполненные Дж. Томсоном в 1897 году, разрушили представление об атоме, как неделимой частице материи, и обосновали существование первой элементарной частицы (электрона). В результате в физику были введены фундаментальные постоянные: элементарный электрический заряд и масса покоя электрона. Постоянная Планка h , введенная в физику в 1900 году как неотъемлемая часть теории излучения и распределения энергии в спектре черного тела,

положила начало физике микромира. Постоянная Планка неотделима от изучения современных проблем атомной, ядерной и квантовой физики. Трудно представить описание теории электромагнетизма и теории относительности без опоры на такую физическую постоянную, как скорость света. Итак, фундаментальные постоянные являются важнейшими составляющими физических теорий и отражают основополагающие свойства материи.

Массив физических постоянных достаточно объемен и продолжает пополняться новыми величинами. Эти величины можно разделить на классы, особую роль из которых играет класс так называемых **фундаментальных** физических постоянных. Возникает вопрос, какие из приведенные в справочниках величины можно считать **фундаментальными** физическими постоянными? Наличие в таблицах ряда физических констант связано с потребностями, возникающими при решении технических задач. Однако фундаментальные физические постоянные не должны отождествляться с коэффициентами пропорциональности между физическими величинами. Понятие «фундаментальные физические постоянные» должно иметь иной смысл.

Определения термина «фундаментальные физические постоянные», встречающиеся в научной литературе, различаются по своему физическому содержанию. При всем наличии разных подходов формируется группа физических постоянных, которые выделяют многие авторы [2–4]:

- гравитационная постоянная G – количественная характеристика тяготения,
 - скорость света c – максимально возможная скорость распространения электромагнитных волн,
 - элементарный заряд e – минимальное значение электрического заряда в свободном состоянии,
 - постоянная Планка h , определяющая квант действия,
 - масса покоя электрона m_e – характеристика свойства инерции самой легкой элементарной частицы.
- Все они отражают одно из важнейших свойств материи и поэтому могут быть включены в **класс фундаментальных физических постоянных**. Однако, изучаются они изолированно друг от друга в различных разделах физики. В результате их взаимосвязь не выявляется в учебной литературе, что затрудняет целостное физическое восприятие.

Как показывает история физики, появление перечисленных выше физических постоянных связано с открытием и исследованием новых физических явлений. Как следствие, можно считать, наличие размерности у данных величин. Размерность физических постоянных выражает их связь с другими величинами, принятыми при формировании системы единиц за основные. Однако, такой выбор зависит от общепринятой договоренности и определяется соображениями практического характера. О размерности физических величин Макс Планк писал следующее: «...размерность какой-либо физической величины не есть свойство, связанное с существом ее, но представляет собой некую условность, связанную с выбором системы единиц измерений».

Согласно представлениям Альберта Эйнштейна [5] в современной научной картине мира не должны присутствовать постоянные, выраженные в метрах, килограммах, секундах, их следует заменить безразмерными величинами. Если взглянуть на физические постоянные с позиции Эйнштейна, то прежде всего из таблицы фундаментальных постоянных следует выделить безразмерные величины. Такими являются отношения масс, отношения магнитных моментов, постоянная тонкой структуры. Как указывал И. Л. Розенталь [6], именно безразмерные величины являются **фундаментальными**, определяющими структуру Вселенной.

Как известно, существует четыре типа **фундаментальных** взаимодействий: гравитационное, электромагнитное, сильное и слабое. С каждым из них связана физическая постоянная, которая является количественной характеристикой соответствующего типа взаимодействий. Перечислим указанные физические постоянные:

- константа сильного взаимодействия ($\alpha_s \approx 1$);
- константа слабого взаимодействия ($\alpha_w \approx 10^{-5}$);
- константа гравитационного взаимодействия ($\alpha_q \approx 10^{-39}$);
- константа электромагнитного взаимодействия ($\alpha_e \approx 1/137$).

Их числовые значения характеризуют относительную силу взаимодействий и определяют насколько быстро в различных процессах протекают превращения одних частиц в другие.

Таким образом, размерные постоянные играют определяющую роль при формировании соответствующей физической теории. Однако, при построении единого теоретического описания

научной картины мира «размерные физические постоянные сходят со сцены», уступая свое место **фундаментальным безразмерным постоянным**.

Интересна эволюция значений постоянной тонкой структуры α , которая является основной постоянной в квантовой электродинамике. Она была введена Арнольдом Зоммерфельдом в 1916 году. В 1936 г. Вернер Гейзенберг предложил для ее определения следующее соотношение $\alpha = 2^{-4}3^{-3}\pi$, что соответствует $\alpha^{-1} = 137,51$. В 1971 г. Уайлер опубликовал следующее выражение для α :

$$\alpha = \frac{9}{8\pi^4} \left(\frac{\pi^5}{2^{45}!} \right)^{\frac{1}{4}}, \quad (1)$$

что дает $\alpha^{-1} = 137,03608$. С современной точки зрения постоянная тонкой структуры — это безразмерная величина, образованная комбинацией фундаментальных констант, которая определяется в системе СИ следующим образом:

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \frac{e^2}{2\epsilon_0\hbar c}, \quad (2)$$

Эволюция экспериментальных значений постоянной тонкой структуры прослеживается в таблице 1.

Таблица 1.

Экспериментальные значения постоянной тонкой структуры

Год определения	Значение α^{-1}
1967	137.0392(15)
1980	137.035963(15) (0.11 ppm)
1986	137.035 989 5(61) (0.045 ppm)
2006	137.035 999 68(9)

В 2007-2016 гг. наметился значительный прогресс в уточнении значений фундаментальных физических постоянных. Это связано как с развитием экспериментальных методов определения расщеплений энергетических уровней водородоподобных и экзотических атомов, так и с повышением точности прецизионных теоретических расчетов атомных спектров на основе квантовополевых теорий [7].

Как известно, существует четыре типа **фундаментальных** взаимодействий: гравитационное, электромагнитное, сильное и слабое. С каждым из них связана физическая постоянная, которая является количественной характеристикой соответствующего типа взаимодействий. Перечислим указанные физические постоянные:

- константа сильного взаимодействия ($\alpha_s \approx 1$);
- константа слабого взаимодействия ($\alpha_w \approx 10^{-5}$);
- константа гравитационного взаимодействия ($\alpha_g \approx 10^{-39}$);
- константа электромагнитного взаимодействия ($\alpha_e \approx 1/137$).

Их числовые значения характеризуют относительную силу взаимодействий и определяют насколько быстро в различных процессах протекают превращения одних частиц в другие.

Таким образом, размерные постоянные играют определяющую роль при формировании соответствующей физической теории. Однако, при построении единого теоретического описания научной картины мира «размерные физические постоянные сходят со сцены», уступая свое место **фундаментальным безразмерным постоянным**.

Литература

1. Каршенбойм С.Г. // УФН 2013, Т.18, №9, с. 935–962 .
2. Спиридонов О.П. Фундаментальные физические постоянные : учеб. пособие для вузов. М.: Высш. школа, 1991. 236 с.

3. Кук А. Квантовая метрология. Эталоны, основанные на атомных и квантовых явлениях. // Сб. статей: Квантовая метрология и фундаментальные константы. М.: Мир, 1981, С. 17–169.
4. Тейлор Б., Паркер В., Лангерберг Д. Фундаментальные константы и квантовая электродинамика. М.: Атомиздат, 1972, 420 с.
5. Эйнштейн А. Собрание научных трудов: Т.4 // Статьи, рецензии, письма. Эволюция физики. М.: Наука, 1967, 600 с.
6. Розенталь И. Л. // УФН 1980, Т.131, №6, с. 239–256 .
7. Бойкова Н.А., Клещевская С.В., Тютчев Ю.Н. и др. // Ядерная физика 2009, Т.72, №2, с.300-306.

ГЕОМЕТРИЧЕСКАЯ КАЛИБРОВКА БЛОКА МАГНИТОМЕТРОВ

Д.М. Спиридонов, А.А. Игнатъев

Саратовский государственный университет

При построении и эксплуатации векторных трех осевых магнитометров с ортогональным расположением осей чувствительности, серьезное ограничение, накладываемое на точность измерения магнитной индукции, вносится погрешностями направления осей чувствительности векторных измерителей относительно базовых направлений. Целью данной работы является показать метод определения данных погрешностей с высокой точностью и без привлечения прецизионной аппаратуры и сложных вычислений.

Согласно схеме Эйлера-Крылова (рис.1) отклонение каждой оси чувствительности измерителя от базовых осей может быть представлено комбинацией двух углов α и β , соответствующих отклонениям во взаимно перпендикулярных направлениях. Традиционно для определения этих углов применяют метод непосредственного измерения, точность такого метода ограничена точностью определения углового положения применяемым технологическим оборудованием (поворотные стенды, поворотные кронштейны) [1]. Также, в последнее время стали применяться программные средства, вычисляющие углы отклонений по набранному массиву показаний магнитометра. Данные способы, основанные на применении численных методов, не всегда обеспечивают приемлемую точность полученных результатов.

Метод, описываемый в данной статье, не накладывает принципиальных ограничений на точность технологического оборудования, поскольку вся информация, необходимая для определения углов отклонений берется непосредственно из измерений самого магнитометра, а погрешности создаваемые поворотным стендом компенсируются алгоритмом представленного метода. Математическая модель данного метода основана на простых геометрических тождествах.

Рассмотрим работу метода на примере одной измерительной оси. Пусть магнитометр закреплен на поворотном стенде таким образом, что одна из его приборных осей (Z_0) вертикальна, а две ортогональные ей оси (X_0 и Y_0) лежат в плоскости горизонта (рис. 1). Произведем поворот магнитометра на 360° вокруг вертикальной оси по часовой стрелке. Выходные сигналы горизонтальных осей чувствительности (B_x и B_y) будут иметь вид синусоид, смещенных относительно друг друга на угол 90° , причем максимумы сигналов будут соответствовать направлению осей на магнитный меридиан, а минимумы – противоположному направлению. Перевернем магнитометр на 180° вокруг оси X_0 и осуществим поворот магнитометра на 360° вокруг оси Z_0 против часовой стрелки. Рассмотрим рисунок 2, на котором изображены графики изменения сигналов B_x при первом и втором измерении. Как видно из графиков нулевые точки синусоид совпадают, а максимальные и минимальные значения отличаются из-за разной амплитуды сигналов.

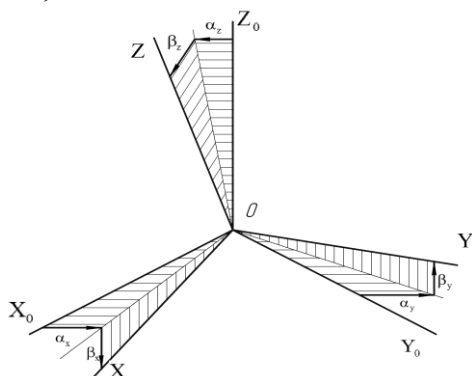


Рис. 1. Схема Эйлера-Крылова

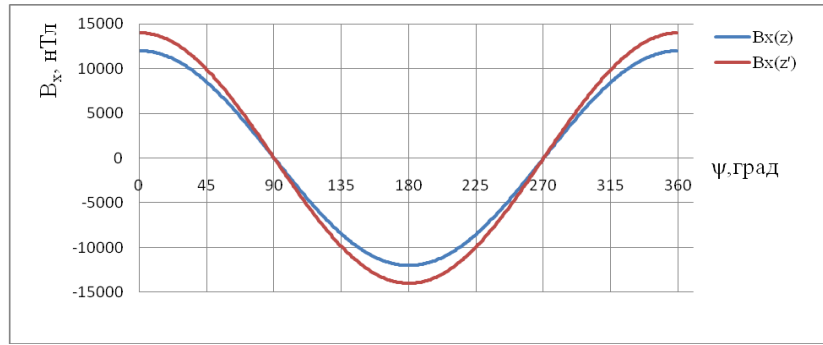


Рис.2. Выходные сигналы оси X магнитометра

Наблюдаемый эффект является прямым следствием следующего факта: ось чувствительности X имеет отклонение от приборной оси X_0 в плоскости XZ. Вследствие этого в зависимости от ориентации вертикальной оси магнитометра (вверх или вниз), меняется проекция вектора магнитной индукции на ось чувствительности магнитометра X и соответственно, меняется измеренное значение B_x (рис.3).

Согласно рисунку 3, определить угол отклонения оси чувствительности X магнитометра от приборной оси X_0 в плоскости XZ можно, используя выражения для определения угла по гипотенузе (модуль вектора магнитной индукции B) и прилежащему катету (измеренное значение B_x):

$$\sigma_1 = \arccos\left(\frac{B_{x(z)}}{B}\right), \tag{1}$$

$$\sigma_2 = \arccos\left(\frac{B_{x(z')}}{B}\right). \tag{2}$$

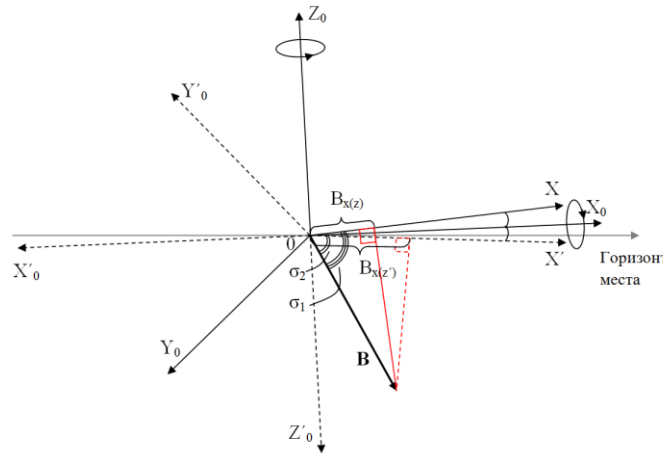


Рис. 3. Схема определения угла отклонения β_x

где σ_1, σ_2 – углы между полным вектором магнитной индукции Земли и осью чувствительности X магнитометра при положительном и отрицательном направлении приборной оси Z_0 соответственно; $B_{x(z)}$ – проекция вектора магнитной индукции Земли на ось чувствительности X при положительном направлении вертикальной оси - Z_0 ; $B_{x(z')}$ – проекция вектора магнитной индукции Земли на ось чувствительности X при отрицательном направлении вертикальной оси - Z'_0 ; B – модуль вектора магнитной индукции Земли, предварительно измеренный или рассчитанный.

Сам угол отклонения вычисляется следующим образом:

$$\beta_x = \frac{\sigma_1 - \sigma_2}{2}, \tag{3}$$

где β_x – угол отклонения оси чувствительности X магнитометра от приборной оси X_0 в плоскости XZ.

Расширить имеющуюся информацию, и тем самым повысить точность определения углов отклонения, можно введением в уравнение дополнительного члена, несущего информацию о

разности углов между вектором \mathbf{B} и отрицательным направлением оси чувствительности $-X$ в двух взаимно-противоположных направлениях оси Z_0 (вертикально вверх и вертикально вниз):

$$\beta_x = \frac{(\sigma_1 - \sigma_2) - (\sigma_3 - \sigma_4)}{4}, \quad (4)$$

где σ_3, σ_4 – углы между полным вектором магнитной индукции Земли и осью чувствительности $-X$ магнитометра при положительном и отрицательном направлении приборной оси Z_0 соответственно.

Для определения шести углов отклонения чувствительных осей магнитометра от приборных осей получаем шесть независимых уравнений:

$$\beta_x = \frac{\left(\arccos\left(\frac{B_{x(z)}}{B}\right) - \arccos\left(\frac{B_{x(z^*)}}{B}\right) \right) - \left(\arccos\left(\frac{B_{-x(z)}}{B}\right) - \arccos\left(\frac{B_{-x(z^*)}}{B}\right) \right)}{4}, \quad (5)$$

$$\beta_y = \frac{\left(\arccos\left(\frac{B_{y(z)}}{B}\right) - \arccos\left(\frac{B_{y(z^*)}}{B}\right) \right) - \left(\arccos\left(\frac{B_{-y(z)}}{B}\right) - \arccos\left(\frac{B_{-y(z^*)}}{B}\right) \right)}{4}, \quad (6)$$

$$\beta_z = \frac{\left(\arccos\left(\frac{B_{z(x)}}{B}\right) - \arccos\left(\frac{B_{z(x^*)}}{B}\right) \right) - \left(\arccos\left(\frac{B_{-z(x)}}{B}\right) - \arccos\left(\frac{B_{-z(x^*)}}{B}\right) \right)}{4}, \quad (7)$$

$$\alpha_x = \frac{\left(\arccos\left(\frac{B_{x(y)}}{B}\right) - \arccos\left(\frac{B_{x(y^*)}}{B}\right) \right) - \left(\arccos\left(\frac{B_{-x(y)}}{B}\right) - \arccos\left(\frac{B_{-x(y^*)}}{B}\right) \right)}{4}, \quad (8)$$

$$\alpha_y = \frac{\left(\arccos\left(\frac{B_{y(x)}}{B}\right) - \arccos\left(\frac{B_{y(x^*)}}{B}\right) \right) - \left(\arccos\left(\frac{B_{-y(x)}}{B}\right) - \arccos\left(\frac{B_{-y(x^*)}}{B}\right) \right)}{4}, \quad (9)$$

$$\alpha_z = \frac{\left(\arccos\left(\frac{B_{z(y)}}{B}\right) - \arccos\left(\frac{B_{z(y^*)}}{B}\right) \right) - \left(\arccos\left(\frac{B_{-z(y)}}{B}\right) - \arccos\left(\frac{B_{-z(y^*)}}{B}\right) \right)}{4}. \quad (10)$$

Описанный метод обладает высокой точностью определения углов отклонения, в частности, при значении модуля вектора магнитной индукции Земли ~ 55000 нТл, горизонтальная составляющая вектора на широте Саратова (76° с.ш.) составляет ~ 13000 нТл. При этом отклонение оси чувствительности от приборной оси на 1° , вызовет отклонение выходного сигнала на 1000 нТл. При разрешающей способности магнитометра 10 нТл, точность определения углов отклонения равна $0,01^\circ$.

Литература

- Игнатьев А.А., Проскураков Г.М., Спиридонов Д.М. Однофакторные калибровки блока магнитометров (алгоритмы, методики, технологии) // Гетеромагнитная микроэлектроника: сб. науч. тр. Саратов : Изд-во Сарат. ун-та, 2014. Вып. 15 : Гетеромагнитная микро- и нанoeлектроника. Методические аспекты физического образования. С. 115 –131.

ОФИЦИАЛЬНЫЙ ОППОНЕНТ В СИСТЕМЕ ЦЕЛЕУСТРЕМЛЁННОЙ НАУЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ

В.М. Аникин¹, Б. Н. Пойзнер²

¹Саратовский государственный университет

²Национальный исследовательский Томский государственный университет

Показывается, что принципы экспертизы, проводимой официальным оппонентом при анализе научной состоятельности рецензируемой диссертации, отвечают универсальным компонентам целеустремлённой системы деятельности по объективной оценке научного продукта.

ВВЕДЕНИЕ

При защите диссертации оппонент соискателя учёной степени знаменательно именуется «официальным». Поэтому от него ждут действий по правилам, установленным ВАК и всем участникам известным *a priori*. В задачи оппонента входит оценка как слабых (термин «оппонент» происходит от лат. *opponens, opponētis* – возражающий), так и сильных (и здесь эксперт выполняет функцию *пропонента* (этимон – лат. глагол *propono*, буквально означающий: ставить перед глазами других, выставлять, выкладывать, вывешивать) сторон диссертации.

Один из базовых императивов защиты, который, к сожалению, трудно поддаётся алгоритмизации, – это объективность оценки диссертации, честный отказ оппонента от своих личных пристрастий и предпочтений. Конечно, это ставит пределы его творческой самостоятельности, но отнюдь не исключает её вовсе. Каковы же базовые принципы объективной экспертизы диссертации?

ПРИНЦИПЫ ОБЪЕКТИВНОЙ ЭКСПЕРТИЗЫ ДИССЕРТАЦИИ

На наш взгляд, первый принцип объективной экспертизы диссертации – осуществление идеалов научности (их роль в консолидации научного сообщества отражена, например, в [1]), причём двоякое: полнота этого осуществления инспектируется в оппонированном исследовании, но и сам «ревизор» действует, руководствуясь идеалами научности.

Второй принцип экспертизы, по нашему мнению, – анализ и характеристика того совершенствования предмета исследования, т.е. его уточнения, углубления, расширения *etc.*, которого достиг соискатель (в рамках поставленной цели диссертации).

Чтобы пояснить сказанное, вспомним, что понятия объекта и предмета исследования тесно связаны, но отнюдь не тождественны. Объект исследования есть фрагмент объективной реальности, например, физической либо технической. В традиционном понимании она существует вне нас (наблюдателей) и независимо от нашего сознания. Как полагает философ-методолог В.М. Розин, «объект» и «предмет» в какой-то мере соотносятся как «существующее бытие, факт *etc.*» и его «смысл, зависящий от цели деятельности и (или) познания». При этом предмет понимается как знание об объекте и (или) как метод его познания, в том числе – экспериментальный [2, с. 42, 48].

Следовательно, предмет исследования «помещается» в мышлении исследователя. Предмет пребывает там в виде описания на специфическом «языке». То есть в виде модели в широком значении слова, построенной для достижения поставленной цели. Описание это обычно образует текст с формулами, символами, изображениями, схемами, диаграммами и т.п. Оно хранится в памяти компьютера, в составе моделирующей программы, проявляется в строении и режимах работы экспериментальной установки, в содержании соответствующих методик эксперимента и т.п. Большинство исследователей, включая экспериментаторов и изобретателей, имеют дело исключительно с предметом исследования, а не с объектом.

Оппонент знакомится с предметом исследования, выбранным соискателем, при чтении вводной (обзорной) главы диссертации. Допустим, что она написана адекватно ситуации, сложившейся в данном направлении исследований к моменту начала работы диссертанта. Это значит, что составленный им обзор корректно и достаточно полно излагает:

- известное мировое знание об объекте исследования (факты, закономерности, корреляции, причинно-следственные связи и т.п.),
- способы получения нового знания (теории, всевозможного рода модели, эвристические принципы, методики, гипотезы и т.д.),
- язык(и) описания объекта, т.е. система специальных терминов и общенаучных понятий, необходимая для познавательной работы в данной области.

Таким образом, на «входе» диссертации имеется «старый», («сложившийся» – в терминологии В.М. Розина [3, с. 95]) предмет исследования, сконструированный предшественниками автора., а на «выходе» её – обновлённый предмет исследования. Он в ряде аспектов (или в одном аспекте) улучшен, модернизирован, усовершенствован творческими усилиями соискателя.

Диссертанту следует максимально рельефно подчеркнуть разницу между стартовым («старым») и финальным предметом исследования. Для этого у него есть минимум три возможности:

- выдвинуть положения, выносимые на защиту (ПВЗ), обосновав их достоверность, новизну, научную и (или) прикладную ценность;
- сформулировать выводы, раскрывающие суть других результатов («неудобных» для выражения в формате ПВЗ, скажем, относящихся к экспериментальной установке, испытательному стенду, программному модулю, учебному тексту *etc.*);
- дать рекомендации по сфере и форме использования материалов работы и (или) их дальнейшему внедрению.

В том, что касается ПВЗ как специфического научного жанра, авторы, опираясь на свою многолетнюю практику работы в диссертационных советах, исходят из следующих соображений. ПВЗ составляет квинтэссенцию диссертации и служит показателем того, насколько продуманно, тщательно, корректно и уважительно к будущему читателю формулирует соискатель свои главные творческие достижения. Структура ПВЗ ранее подробно рассматривалась в [4–6].

Соискатель и сам в известной степени выступает в роли пропонента. Действительно, он обязан построить системную аргументацию, чтобы доказать: достоверность своих ПВЗ, их новизну, научную ценность и (или) практическую значимость. Миссия оппонента – подвергнуть «атаке» те методологические «линии обороны», которые соискатель возвёл, защищая истинность своих ПВЗ и других результатов. Некоторые рекомендации соискателю по технологии возведения «линий обороны» ПВЗ даны в [4–6]; там же выполнен анализ примеров (не)удачных формулировок защищаемых положений и их характеристик.

ЦЕЛЕУСТРЕМЛЁННАЯ МЕТОДОЛОГИЧЕСКАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ ОППОНЕНТА

Повышение степени объективности оценки диссертации при её экспертизе крайне желательно и возможно, если оппонент добровольно возьмёт на себя труд методолога и проанализирует ПВЗ в контексте возникновения нового знания. Для этого предлагаются установить степень удовлетворения диссертации следующим критериальным принципам.

1. Признак теоретической (методологической) деятельности диссертанта – творческий переход от «сложившегося» («старого») предмета исследования к новому, имеющему методологические и эпистемологические преимущества в конкретных аспектах.

2. Степень отличия нового предмета исследования от «сложившегося» есть критерий методологической (теоретической, фундаментальной) ценности научного ПВЗ. Если новый предмет исследования привёл к формированию нового объекта исследования [3, с. 95]), то степень его отличия от известного объекта есть критерий практической (технической, прикладной) ценности научного ПВЗ.

3. Признак технической (экспериментальной, проектной) деятельности диссертанта – творческий переход от известного объекта исследования к новому, имеющему практические преимущества в конкретных аспектах.

4. Степень отличия нового объекта исследования от исходного есть критерий практической (технической, прикладной) ценности технического ПВЗ. Если новый объект исследования привёл к формированию нового предмета исследования, то степень его отличия от «старого» предмета есть критерий методологической (теоретической, фундаментальной) ценности технического ПВЗ.

5. Упомянутые отличия результатов диссертанта от известных, т.е. новации, «закодированные» в ПВЗ, имеют четыре уровня (сверху вниз):

- целеполагания, при этом цель достижима с некоторой вероятностью;
- операциональных средств, построенных на основе полученной исследователем информации (обычно – в итоге напряжённых творческих усилий);
- ресурсов, выбор которых влияет на вероятность достижения цели;
- работы с (не)предвиденными побочными продуктами деятельности (реферативной, теоретико-познавательной, экспериментальной, проектной *etc.*).

Градации отличий соответствуют универсальным компонентам целеустремлённой системы деятельности [7, с. 22–23], традиции оценки класса изобретений в технике и шкале субъектов творчества [5, 8, 9].

Подчеркнём, что родовой чертой ПВЗ является ограниченность его «времени жизни» в профессиональном сообществе. Рано или поздно содержание ПВЗ подвергают уточнению, дополнению, редактированию, сокращению области применимости (порой же вовсе списывают в

архив как добросовестное заблуждение) и так – *ad infinitum*. Обновление предмета исследования, связанное с выдвиганием ПВЗ, есть принципиально *незавершаемый* процесс, поскольку он взаимно обусловлен социокультурной эволюцией.

В свете этого соображения полезно вернуться к п. 5. Согласно иерархии уровней творчества, обобщившей сюжеты из истории науки, успешное целеполагание даёт наиболее долговечную новацию. Например, таковы цели деятельности, выдвинутые впервые корифеями европейского естествознания, вроде Галилея, Ньютона, Декарта. Второе место среди результатов-«долгожителей» занимают новые операциональные средства, связанные с совершенно новыми целями. Вспомним, скажем, принципы, лежащие в основе тех приборов, что измеряют физические величины. А самыми «короткоживущими» достижениями (и соответственно – ПВЗ) обычно оказываются те, что касаются работы с побочными продуктами деятельности. На наш взгляд, эти обстоятельства желательно сознавать и диссертанту, и тем более – оппоненту, ранжирующему творческие деяния соискателя.

Согласно смыслу перечисленных принципов, оппонент исходит из того, что на первом (начальном) этапе деятельности диссертант получает от своих предшественников известный объект исследования. Исследователь воспринимает («видит») этот объект через призму «старого», т.е. «сложившегося» (в терминологии В.М. Розина), предмета исследования. Второй этап деятельности соискателя начинается, когда возникают некие потребности в изменении, т.е. в усовершенствовании, развитии, предмета исследования. Эти потребности могут быть вызваны как процессами внутри научного сообщества, так и извне, в форме «социального заказа». Обычно требуется расширить знания об объекте исследования и способы получения этих знаний. В инженерных науках требуется построить новый объект и (или) технологию его создания. Эти потребности стимулируют диссертанта выдвинуть новые цели, задачи, совершенствовать старые языки описания либо разработать новые языки, а также методы и экспериментальную технику *etc.*

При благоприятном развитии событий соискатель выражает сущность содержания нового предмета исследования в виде ПВЗ. В свою очередь, построение нового предмета исследования обогащает диссертанта «новым зрением» при наблюдении объекта исследования. Поэтому резонно говорить и о новом объекте исследования. История науки знает немало случаев, когда объект исследования был открыт лишь благодаря построению нового предмета исследования. В этих сюжетах реальный объект или феномен был предсказан *a priori*. Рискнём вывести из сказанного выше некую простую «формулу», толкующую каждое ПВЗ как «квант» научного знания:

Новый предмет исследования = «старый» предмет исследования + сумма ПВЗ.

Эта символическая «формула» раскрывает место, какое в продуктивном познавательном процессе занимает научное либо техническое ПВЗ.

Пусть новый предмет исследования успешно прошёл все серии процедур верификации, включая критическое оппонирование, и получил признание в профессиональном сообществе. Тогда этот предмет должен рассматриваться далее как «сложившийся» (в смысле В.М. Розина). Очередная критическая ревизия его неизбежна рано или поздно. Затем цикл перехода от старого предмета исследования к новому предмету повторяется – с некоторыми вариациями – снова и снова. Поэтому символическая «формула» раскрывает простейшую связь ключевых элементов, которые составляют *репликатор познавательной деятельности* [10].

ПОЗИЦИЯ И ФОРМА ТВОРЧЕСКОГО САМОВЫРАЖЕНИЯ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

Нам представляется, что позиция оппонента поневоле двойственная. С одной стороны, будучи грамотным методологом и зная принцип Эшби, он понимает, что необходимо всячески повышать степень разнообразия в его науке: разнообразия подходов, концепций, теорий, моделей, толкований, инструментов и т.п. С другой стороны, на него сообщество коллег возлагает очень ответственную миссию: хранить чистоту традиции, т.е. арсенал получения научного знания, не допускать профанации интеллектуальной деятельности, искажения ключевых критериев её продуктивности. С одной стороны, оппонент, зная, как трудно «продвигать» среди коллег свои оригинальные результаты, не может не чувствовать солидарности с диссертантом (в положении которого был и он сам в прошлом). С другой стороны, он уполномочен научным сообществом обеспечивать самоочищение его науки: идейное, методологическое, кадровое, публикационное. Следовательно, ему вменяется в обязанность не допускать в фонд научного знания ошибочные, сомнительные, не обеспеченные должной аргументацией результаты, а также ставить барьер шарлатанам, плагиаторам

и прочим тёмным личностям. И в этой связи здесь, пожалуй, уместно (в рассматриваемом контексте) вспомнить оценку, данную писателем В. В. Набоковым праву на критику: «следующее по важности после права на творчество... самый драгоценный дар, который только может предложить свобода мысли и слова» (см.: Бр. Бойд. Владимир Набоков: Русские годы. М. : Симпозиум, 2010).

Выше мы уделили внимание оппоненту как источнику объективности, радеющему за максимально строгую обоснованность оценок. Не забудем, что экспертизе подвергается творческое произведение, каким является (обычно) диссертация. И поскольку за ней стоит личность автора (а не робот, не автомат, даже не аноним), то, конечно, в самом оппоненте его личностное начало ни в коем случае не должно подавляться. Как же возможно представить диалог-дискуссию двух личностей – автора и оппонента, – на какой почве? Вероятно, всё на той же, на которой взошла диссертация, т.е. на почве научного (технического и т.п.) творчества.

Отдав «кесарю кесарево», т.е. тщательно выполнив требования ВАК (дабы не навредить соискателю и диссертационному совету), а также найдобросовестнейшим образом проведя экспертизу работы с опорой на принципы её объективной оценки, оппонент имеет право, на наш взгляд, творчески выразить свою личность исследователя. Иначе говоря, для профессиональной пользы диссертанта и сообщества, следящего за ходом защиты, оппонент вправе совершенно сознательно и открыто перейти в сферу своих частных предпочтений и пристрастий творческого субъекта.

Вероятно, одним из факультативных вариантов такого поведения, такой интеллектуальной игры способен стать демонстративный переход оппонента в позицию гипотетического альтернативного решателя какой-либо из задач или даже нескольких, которые поставил и решил по своему диссертант в квалификационной работе. Условное название роли оппонента в этой методологической пьесе – «если бы диссертантом был я». В таком случае оппоненту предстоит на конкретном материале сравнить два стиля мышления, два способа интерпретации и вербализации результатов: автора диссертации и свой, – выявить возникающие отсюда сходства-различия, широту-узость, глубину-поверхностность, другие преимущества-недостатки и т.п. Разумеется, вся объективная (традиционная) аналитика рабочего эскиза воображаемой диссертации оппонента должна быть выполнена в полном объёме!

Если оппонент в этой роли «реконструктора» способен действовать *lege artis*, то его эскиз воображаемой диссертации вдвойне плодотворен. Во-первых, он способен – в принципе – выявить, подчеркнуть оригинальность, нешаблонность труда изобретательного диссертанта. Во-вторых, оттенит либо индивидуальность соискателя, неповторимость его творческого почерка, либо принадлежность к иной научной школе, что тоже полезно для честного научного спора. В третьих, расширит пространство дискуссии, причём тем значительнее, чем существеннее отличается субъективный исследовательский *modus operandi* у диссертанта и оппонента.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Формализм, неотделимый от подготовки и защиты диссертации, можно (и нужно) преодолеть, компенсировать когерентностью действий соискателя и оппонента. Но это – отнюдь не сговор двух и более лиц. Это означает согласованность идеалов научности и принципов экспертизы результатов, включая текущую самооценку диссертанта. Что в этой ситуации требуется от него? Методологическая предприимчивость, здравая рефлексия над собственными новациями, обогатившими предмет исследования, тщательная артикуляция ПВЗ, других результатов и их характеристик (здесь соискателю даны полномочия оппонента).

А что ожидается от его ролевого «противника»? Умение подвергнуть критическому анализу все ПВЗ и их характеристики, верифицируя те конкретные аспекты, которые подразумевают пп. 1–4, и безошибочно «измерить» достижения диссертанта по шкале в п. 5. Чем ответственнее отнесутся к своим методологическим обязанностям диссертант, формулируя ПВЗ, и оппонент, испытывая «на излом» их корректность, тем больше стиль защиты будет похож на «борьбу» за смысл, а не на имитацию диалога.

Литература

1. Измайлов И. В., Пойзнер Б. Н. О науке, событиях в истории изучения света, колебаний, волн, об их исследователях, а также глоссы и этимоны : учеб. пособие / под ред. А. В. Войцеховского. Томск : ИД ТГУ, 2014, 380 с.
2. Розин В. М. // Вопросы философии 2015, № 6, с. 41–52.

3. Розин В. М. // Вопросы философии 2012, № 11, с. 85–96.
4. Аникин В. М., Усанов Д. А. Диссертация в зеркале автореферата: метод. пособие для аспирантов и соискателей ученой степени естественно-научных специальностей. Изд. 3, перераб. и доп. М.: ИНФРА-М, 2013, 128 с
5. Соснин Э. А., Пойзнер Б. Н. Осмысленная научная деятельность. М.: РИОР : ИНФРА-М, 2015, 148 с.
6. Аникин В. М., Пойзнер Б. Н. Диссертация : грани творчества и ... Сер. «След вдохновений и трудов упорных...» Вып. 8 / Под ред. и с предисл. Д. И. Трубецкого. Саратов: РИО журнала «Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика»; ООО ИЦ «Наука», 2017, 142 с.
7. Корогодина В. И. Информация и феномен жизни. Пушино: Пушкинский научный центр РАН, 1991, 204 с.
8. Соснин Э. А. Методы решения научных, технических и социальных задач : учеб. пособие / Под ред. А.Н. Солдатова. Томск : Издательский Дом ТГУ, 2016, 376 с.
9. Феномен научной школы: история, типология получения и передачи знаний, психология коммуникаций / В. М. Аникин, Б. Н. Пойзнер, Э. А. Соснин, А. В. Шувалов; под общей ред. В.М. Аникина. Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 2015, 232 с.
10. Пойзнер Б. Н. // Изв. вузов. Прикладная нелинейная динамика 1996, Т. 4, № 4–5, с. 149–158.

КРУГЛЫЙ СТОЛ: ЧЕЛОВЕК И СВЕТ В ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНОЙ И ХУДОЖЕСТВЕННОЙ КАРТИНЕ МИРА

Саратовский государственный университет

Модератор Медведев Борис Абрамович

Представлена работа круглого стола: «Человек и свет в естественнонаучной и художественной картине мира» на секции История, методология и философия оптического образования XXI Международной школы для молодых ученых и студентов по оптике, лазерной физике и биофотонике, прошедшей в Саратовском государственном университете 26 – 30 сентября 2017 года.

Участники Круглого стола: профессор кафедры философии СГТУ, д.ф.н. Дуплинская Юлия Михайловна; заведующий кафедрой геометрии СГУ, профессор, д.ф.-м.н. Розен Виктор Владимирович; студентка СГТУ Кочеткова Анастасия Евгеньевна; профессор кафедры «Математика и моделирование» СГТУ д.ф.-м.н. Паршков Олег Михайлович; профессор кафедры физики полупроводников СГУ, д.ф.-м.н. Роках Александр Григорьевич; профессор Самарского национального исследовательского университета имени академика С.П. Королёва д.ф.-м.н. Горохов Александр Викторович; доцент кафедры дискретной математики и информационных технологий СГУ к.ф.-м.н. Бродская Юлия Анатольевна; доцент кафедры философии СГТУ, к.ф.н. Довгаленко Наталья Владимировна; заведующий отделом научной информации НБ СГУ. магистр Стольниц Михаил Маратович; доцент кафедры геометрии СГУ, к.ф.-м.н. Шимельфениг Олег Владимирович., к.ф.н. Солодовниченко Лия Яковлевна; профессор кафедры органической химии СГУ, д.х.н. Сорокин Виталий Викторович; профессор кафедры морфологии и экологии животных СГУ д.б.н. Аникин Василий Викторович; ученик гимназии № 3 Никельшпарг Матвей Ильич.

10 ЛЕТ РАБОТЫ КРУГЛОГО СТОЛА «ЧЕЛОВЕК И СВЕТ В ЕСТЕСТВЕННОНАУЧНОЙ И ХУДОЖЕСТВЕННОЙ КАРТИНЕ МИРА

Б.А. Медведев

Актуальность проблематики работы Круглого стола в XXI веке:

- в противостоянии духовному кризису, как источнику глобальных проблем и деградации цивилизации,
- в формировании этической парадигмы просвещения,
- в задаче сближения двух культур,
- в формировании единой картины мира,
- в преодолении «варварства» узкой специализации и повышения креативности молодых ученых...

Уважаемые коллеги за 10 лет работы Круглого стола было сделано более 100 докладов. Эпиграфом к дискуссионной тематике Круглого стола можно взять слова Нильса Бора: «Существует ли поэтическая, или духовная, или культурная истина, отличная от истины научной?..»

В настоящее время в работе Круглого стола принимают участие профессорско-преподавательский состав семи факультетов СГУ (в том числе - физического, нано - и биомедицинских технологий, механико-математического, химического, биологического, философского, компьютерных наук и информационных технологий).

Избранная тематика докладов с некоторыми комментариями автора представлена ниже:

1. В.В.Тучин: Международный научно-образовательный центр оптических технологий (МНОЦ «Фотоника»).
2. А.В. Горохов: История становления современной квантовой оптики. Достижения и перспективы.
3. А.Г. Роках: Одиночный фотон и вселенная. Размышления о человеке и свете в научной картине мира.
4. О.М. Паршков: Свет и фундаментальная физика XX века.
5. В.П. Рябухо, С.А. Савонин: Голографическая вселенная.
6. В.В. Розен: Проблема целостности

мира. Знание: Божественный свет или рационалистическая дедукция? 7. Л.А. Мельников: Об объективности и субъективности зрения: зрительные иллюзии. 8. С.П. Позднева., Р.В. Маслов: Леонардо да Винчи: Зрение как высший инструмент познания. 9. Ю.М. Дуплинская: Феномены сознания и квантовые феномены. Перефокусировка зрения, или оптический эксперимент с реальностью? 10. О.В. Шимельфениг, Л.Я. Солодовниченко: Синтез света, цвета музыки и поэзии в творчестве авангарда XX века. 11. Д.В. Михель: Тело и свет у Рембрандта: Культурный контекст «трактата о свете». 12. Б.А. Медведев: Свет и архитектура сознания. Квантово-оптические аналогии при моделировании психологической структуры креативной личности. 13. Н.В. Довгаленко: Проблема будущего сквозь онтологическую призму света. 14. В.В. Аникин: Происхождение современного человека в свете современных молекулярно-генетических данных. 15. В.В. Сорокин: Революция цвета: химические предпосылки.

ТО, ЧТО НЕ МНОЖИТ СУЩНОСТИ...

Комментарий к выступлениям А.В. Горохова и Л.М. Бабкова

Фундаментальная роль приложения понятия симметрии в естественнонаучном познании является, на наш взгляд, отражением содержания принципа Оккама: «Сущности не следует умножать без необходимости». Действительно, если в искусстве, например, метафора как художественное выражение единства бытия не множит сущности, то в науке, особенно в трансдисциплинарных исследованиях, – аналогия как рациональная составляющая мышления наводит мосты от одной области знания к другой. И, конечно же, не множит сущности – созвучие, гармония и симметрия. Симметрия заложена в само основание мироздания в представлениях античных философов о космосе...

*НЕ ЕСТЬ ЛИ СТРЕМЛЕНИЕ К ПРОСТОТЕ СЛЕДСТВИЕМ
ОГРАНИЧЕННОСТИ НАШЕГО РАЗУМА?*

Комментарий к выступлению Ю.М. Дуплинской

Ю.М. Дуплинская: «Разве невозможно представить реальность, в которой любые «эталоны» являются подверженными непрерывным изменениям, заметить которые нам мешает наша презумпция самотождественности бытия?» /Из доклада «Истина или простота».

- «Мыслью, следовательно, существую». Но, добавим мы, только в том случае, если «мыслью» отлично от других. Что наши поиски инвариантов? Не есть ли это миф, что время дарует нам, заигрывая с вечностью?.. В поисках истины разум нередко разочаровывается в себе, всё больше убеждаясь – «поверить алгеброй гармонию» нельзя. Моделирование есть всегда упрощение сложного. Так будем же ироничны к себе и зададимся вопросом: не есть ли наше стремление к простоте следствием ограниченного инструментария нашего разума? Не парадоксально ли, что результат мышления нередко нас успокаивает? Но природа ищет выхода из лабиринта своих собственных законов, и в этом – её непрерывное творчество. Природа гениальна в следовании законам, которые сама же и обходит. «Свобода – главный дар природы» (Леонардо да Винчи). Конструкция её законов не может быть жёсткой. Детерминация любого явления является искусственной. Законы, которые мы устанавливаем, и эталоны, которыми мы пользуемся, «плывут», изменяясь в пространстве-времени.

*ЭПОХА РЕНЕССАНСА КАК ПЕРЕЖИВАНИЕ
ХРУПКОСТИ ЧЕЛОВЕЧЕСКОГО БЫТИЯ*

Комментарий к выступлению С.П. Поздней и Р.В. Маслова

«Живопись в состоянии сообщить свои конечные результаты всем поколениям вселенной, так как её конечный результат есть предмет зрительной способности...» (Леонардо да Винчи). Разделяя эту мысль Леонардо, мы полагаем, что только духовно-нравственные идеалы Человека, его «зрительная способность» к восприятию света разума и сердца в состоянии противостоять наступлению периода Средневековья высокотехнологической цивилизации...

*РАЗМЫШЛЕНИЯ О КОСМИЧЕСКИХ ЯВЛЕНИЯХ
НЕ МОГУТ БЫТЬ ЛИШЕНЫ КРАСОТЫ...*

Комментарий к выступлениям В.В. Розена и А.Г. Рокаха.

Когда комментируешь сообщения В.В. Розена и А.Г. Рокаха, невольно вспоминается: «Мысль, стремящаяся стать событием во вселенной, должна находиться с ней в отношении подобия». Не означает ли согласие с этой мыслью, принадлежащей Ж. Бодрийяру, принятие тезиса о единстве, симбиозе научного и художественного восприятия космоса согласно его античному определению?

Говоря словами А.Ф. Лосева (его размышления над философией Платона): «Что гармонично, то и художественно».

ВМЕСТО ЗАКЛЮЧЕНИЯ: О КРЕАТИВНОМ АСПЕКТЕ ГУМАНИТАРИЗАЦИИ ФИЗИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ

Тонкость восприятия мира роднит ученого с художником. Именно поэтому, картина мира не может быть естественнонаучной или художественной. Она может быть только их единством – миром эмоционального интеллекта, для которого размышление есть лишь метаморфоза переживания. Если слово *творить* по В. Далю означает давать бытие, то креативность, как способность творить, в контексте выступлений участников Круглого стола, означает способность давать бытие мысли. Креативность в онтологическом аспекте предполагает у исследователя:

- способность к мышлению отдаленными аналогиями по Лейбницу и оперированию ассоциациями по сходству У. Джеймса.
- нелинейность, аказуальность, парадоксальность и латеральность мышления;
- чувство удивления и способность к импровизации;
- инстинктивное сомнение по поводу очевидных истин;
- умение «учиться, одновременно разучиваясь» по Хайдеггеру;
- метафоричность мышления и понимание того, что «прекрасное выше всякой логической категории» по А.Ф. Лосеву;
- представление Пола Фейерабенда о том, что «не существует идеи, сколь бы устаревшей и абсурдной она не была, которая не способна улучшить наше познание».

КОНЕЧНА ИЛИ БЕСКОНЕЧНА РАСШИРЯЮЩАЯСЯ ВСЕЛЕННАЯ?

В. В. Розен

Проблема бесконечности Вселенной является весьма многоаспектной. Можно говорить о количественной бесконечности (например, по числу звезд), временной бесконечности, пространственной бесконечности. Все эти типы бесконечности связаны друг с другом. В данном докладе речь идет о пространственной бесконечности Вселенной.

Современная постановка вопроса о пространственной бесконечности Вселенной связана, во-первых, с построением геометрических моделей реального физического пространства, и, во-вторых, с нахождением некоторых глобальных характеристик пространства, важнейшей из которых является средняя плотность материи. В настоящее время базовой геометрической моделью физического пространства является принятое в ОТО 4-мерное риманово пространство, метрика которого задается с помощью метрического тензора. При этом компоненты метрического тензора являются функциями координат точки, которые определяются распределением и движением материи.

При принятии космологических постулатов Эйнштейна – постулата однородности и постулата изотропности Вселенной – возникает упрощенная геометрическая модель, в которой кривизна пространства характеризуется уже не тензором, а является скалярной величиной, причем в фиксированный момент времени кривизна пространства k является постоянной. В рамках такого подхода возможны два сценария.

1. Кривизна пространства положительна: $k > 0$. В этом случае во Вселенной реализуется так называемая *эллиптическая геометрия*, а сама Вселенная оказывается конечной, замкнутой и безграничной. Конечность Вселенной означает конечность ее объема и, как следствие, конечность числа звезд и элементарных частиц. Замкнутость Вселенной означает замкнутость ее геодезических, по которым, в частности, распространяется свет. В такой Вселенной ее расширение прекращается и заменяется сжатием.

2. Кривизна пространства отрицательна: $k < 0$. В этом случае во Вселенной реализуется так называемая *гиперболическая геометрия*, а сама Вселенная оказывается бесконечной, содержащей бесконечное число звезд и элементарных частиц. В такой Вселенной ее расширение никогда не прекращается.

Таким образом, реализация каждого из этих сценариев определяется знаком кривизны пространства, который, в свою очередь, определяется соотношением между средней и критической плотностью материи: если средняя плотность материи больше критической плотности, то

реализуется модель конечной Вселенной, а если средняя плотность материи меньше критической плотности, то реализуется модель бесконечной Вселенной.

ВСЕЛЕННАЯ – САМОЕ ГРАНДИОЗНОЕ ПРОИЗВЕДЕНИЕ

А.Е.Кочеткова

Изучая законы природы, многие из нас замечали, что они кажутся нам элегантными. Наше чувство прекрасного откликается на обнаруженные в природе закономерности. В науке мы видим присущую искусству красоту, в искусстве – строгие закономерности науки. Почему так происходит?

Обратимся за ответом к биологии. Индийский невролог Рамачандран выделил несколько закономерностей эстетики, каждая из которых обязана своим существованием развитию человеческого мозга. Это

1. закон симметрии: мир полон почти симметричных объектов, и умение хорошо распознавать их закрепилось в ходе эволюции;
2. закон отвращения к совпадениям: наш мозг любит небольшие отклонения от идеала, так как в природе идеально правильные объекты встречаются редко;
3. закон порядка: в то же время нам присуща любовь к зрительному повтору, к ритмам в музыке и танце – это позволяет более эффективно обрабатывать входные сигналы.

С помощью этих правил мы успешно составляем целостную картину мира на основе неполной и зашумленной информации. Мы учимся правильному восприятию, формируя ожидания и сравнивая их с действительностью. Правильное предсказание приносит нам ощущение удовольствия. Теперь несложно понять, почему мы находим интересные явления красивыми – ведь благодаря им мы узнаем что-то новое и испытываем удовлетворение. Кроме того, становится понятно, что больше всего мы любим явления, которые нас удивляют, но не слишком сильно. Распознавание привычного не требует от нас усилий, но и не ведет к вознаграждению. Однако наблюдение за тем, чего мы не в силах понять, тоже не приносит удовольствия – ведь вознаграждение мы получаем именно за решение загадки.

Каждое произведение искусства обладает собственным стилем. Любимые изобразительные приемы Вселенной – симметрия и экономия средств. Именно их мы в ходе эволюции научились воспринимать как красоту. Вокруг себя мы постоянно наблюдаем симметрию в привычном ее понимании. Этим свойством обладают наши тела, мы наблюдаем ее в снежинках, в паутине, в кристаллах и отмечаем ее красоту.

Но Вселенной присуща и другая, скрытая от глаз симметрия. Она становится видна, если описывать Вселенную языком математики. Объект обладает симметрией, если существуют преобразования, которые производят изменения или перемещают различные части объектов, оставляя объект в целом инвариантным. Именно здесь нам и открывается истинная красота нашей Вселенной: ей присуща симметрия фундаментальных законов. Симметриям физических законов соответствуют законы сохранения. Так, симметрия по отношению к переносу в пространстве означает сохранение импульса, по отношению к перемещению во времени – к закону сохранения энергии.

В наших произведениях искусства симметрия немного нарушена. Вселенная также обладает этим качеством. Один из примеров – барионная асимметрия. Будь соотношение вещества и антивещества равным, реакция аннигиляции сделала бы Вселенную крайне скучным местом.

Итак, согласно всем канонам красоты, наша Вселенная прекрасна. Ей присущ тот баланс между симметрией и асимметрией, что мы замечаем в работах лучших художников. Изучая законы устройства Вселенной, мы любуемся величайшим произведением искусства.

РУССКИЙ КОСМИЗМ В ТВОРЧЕСТВЕ «АМАРАВЕЛЛЫ»

Л.Я. Солодовниченко, О.В. Шимельфениг

В 1927 году по предложению Н. Рериха объединение русских художников Черноволенко, Сардана, Фатеева, Шиголева стало называться необычным и красивым именем «Амаравелла» (1923—1928). Это слово можно перевести с санскрита как «берег бессмертия», «ростки бессмертия» или «обитель бессмертных». В том же 1927 году в Нью-Йорке в художественном центре «Согона Mundi» прошла их выставка.

Особое место в их творчестве занимала музыка, которая была тем формообразующим началом, откуда возникала Новая Красота, новая эстетика самого художества. В ней звучали космические ритмы, творившие новую картину привычного мира. Озарения, всплывавшие из глубины существа самих художников, опережали научные открытия и грядущие философские находения. Их творчество было только началом преобразования самого искусства, которое стремилось вырваться из трехмерного пространства в многомерность Космоса. Они все шире и шире использовали в своем творчестве две мирообразующие константы – звук и свет. Звук изображался на полотне ритмом форм и линий. Свет всегда связан с цветом. Звук, свет и цвет представляли на картинах художников «Амаравеллы» нечто синтетически целое, обладающее теургической силой преобразования материальных форм.

Выдающиеся русские ученые-философы, такие как В.И. Вернадский, К.Э. Циолковский, А.Л. Чижевский, в своих исследованиях подтверждали то, о чем свидетельствовали в своих произведениях художники «Амаравеллы». В начале 20-х годов в пространстве России шел интенсивный процесс формирования космического сознания, в котором участвовали представители всех областей познания – искусства, науки, философии.

Мировидение А.П. Сардана созвучно пифагорейскому восприятию мира как грандиозного инструмента. Его картина "Рождение материи" (1920) изображает космическую сингулярность, из которой извергается раскаленная материя в первые мгновения Творения. Что это, как не расширяющаяся Вселенная? Поражает тот факт, что картина была написана еще до возникновения теории расширяющейся Вселенной. Художники "Амаравеллы" не только с глубоким интересом следили за утверждением новой парадигмы знания, но часто и предвидели ее. На картине В.Т. Черноволенко «Песнь звезд» (1970) мы видим подобие нескольких колонн или столбов. Двадцать пять лет спустя после создания картины на одном из снимков (сенсации XX века, названном «Звёздные ясли» или «Колонны творения»), полученных с телескопа Хаббл, учёные увидели газопылевые столбы, в которых происходит процесс звездообразования. При сравнении снимка и картины В.Т. Черноволенко астрономы отметили удивительное сходство (хотя следует учитывать огромное число снимков).

Наука еще только подходила к моделированию новой вселенной, к исследованию еще неизвестных ей физических процессов, а на полотнах «Амаравеллы» уже пылали краски, переливались новые космические формы, серебрились причудливые линии таинственной энергетики и преображенный человек, свободный и утонченный, творил Новый мир, в котором всё мироздание представало в своём гармоничном богатстве и разнообразии как некое цельное произведение искусства, созданное великим художником.

КОТ ШРЕДИНГЕРА, ОБЪЕКТИВНАЯ РЕАЛЬНОСТЬ И ФИЛОСОФИЯ ФИЗИКИ

Паршков О.М.

Копенгагенская интерпретация квантовой механики, опирающаяся на отсутствие скрытых параметров в чистых состояниях изолированных квантовых систем, утверждает, что отдельный электрон, находящийся в таком состоянии, не обладает физическими характеристиками типа координат или импульса. Эти характеристики возникают в момент коллапса волновой функции при взаимодействии электрона с другим объектом, например с измерительным прибором. То же самое относится и ко всем элементарным частицам. Другими словами, вся реальность существования любой элементарной частицы в чистом состоянии заключается только в том, что она есть, но при этом лишена всех динамических характеристик. Частица не представляет собой не волну и не частицу, так что и называть этот объект частицей можно лишь согласно исторической традиции.

Рассмотрим с этой точки зрения известный парадокс кота Шредингера [1]. Предположим, что материальную систему, состоящую из Кота, устройства его жизнеобеспечения, устройства его возможного умерщвления и ящика, где всё это находится, можно изолировать от любых внешних воздействий на время эксперимента, как очевидно предполагал Шредингер. Вся эта система представляет собой совокупность невообразимого, но конечного числа микрочастиц, и в принципе может находиться в чистом состоянии. Тогда, следуя сказанному выше, следует заключить, что мы имеем объект, лишенный всяких динамических характеристик. В частности, не существует координат и импульсов элементарных частиц, из которых состоит подопытное животное. Это

животное вовсе не существует с точки зрения внешнего наблюдателя. Кот возникнет, когда этот наблюдатель нарушит изоляцию системы, открыв ящик. Возникнет либо мертвым, либо живым. В первом случае также возникнет разбитая колба с синильной кислотой. Во втором случае эта колба окажется целой. С точки зрения Копенгагенской интерпретации квантовой теории вообще не имеет смысла говорить, когда умер Кот. Его просто не было как такового. Это странно с точки зрения наших обычных представлений, но это еще не парадокс, поскольку конечный результат – кот жив или мёртв, одинаков и в классической и в квантовой физике.

Предположим, что в состав материальной системы, которая описана выше, входит кинокамера. Что мы увидим, проявив плёнку? Мы увидим всю жизнь Кота в чистом состоянии материальной системы. И это не противоречит квантовой теории. Дело в том, что Кот не является изолированной материальной системой. Он взаимодействует, например, с воздухом, необходимым для его выживания, с подстилкой, на которой лежит и т. д. Можно сказать, что Кот непрерывно подвергается измерениям. Причём внешние воздействия на Кота нельзя считать малыми и учитывать в каком-либо порядке теории возмущений. Квантовая механика пока не в состоянии описать объект, находящийся в непрерывном процессе измерения. Но квантовая теория допускает существование такого объекта.

Так что же – был ли Кот или нет? Вот в чём парадокс. Опыт с Котом Шредингера мы рассмотрели в двух системах отсчёта. Одна из них – это система отсчёта, не взаимодействующая с материальной системой, в которой находится Кот. Другая система отсчёта – система, связанная с изолированной материальной системой, в которую входит Кот. И выводы о судьбе Кота, опирающиеся на Копенгагенскую интерпретацию квантовой механики, оказались существенно различными. Это означает, что объективная реальность является относительным понятием – она разная в разных системах отсчёта.

Отметим, что понятие идеально изолированной материальной системы в квантовой теории предполагает, что такая система в принципе не может быть обнаружена внешним наблюдателем. Эту систему, например, нельзя увидеть в отражённом свете, поскольку это означает воздействие на нее фотонами. Она не может быть обнаружена и по собственному излучению, поскольку фотоны этого излучения входят в состав изолированной материальной системы и их регистрация означает воздействие эту систему. Другими словами идеально изолированная материальная система эквивалентна параллельной Вселенной.

Отметим также, что относительность понятия объективной реальности прослеживается в космологическом эффекте ухода Наблюдателя за горизонт событий при приближении к Чёрной дыре. Для самого Наблюдателя этот процесс занимает конечное время, а для внешнего Наблюдателя он длится бесконечно долго, т. е. фактически не происходит.

Литература

1. Schrodinger E. // Proc. Cambridge Phil. Soc. 1935, Vol. 31, p.555.

СТРУКТУРИРОВАННЫЙ СВЕТ, ЕГО СВОЙСТВА И НЕКОТОРЫЕ ПРИЛОЖЕНИЯ

А.В. Горохов

Под структурированным светом понимают поле со специально подобранным поведением в пространстве и во времени - свет со структурированными интенсивностью, поляризацией и фазой [1]. При преподавании курсов оптики и электродинамики обычно исходят из того, что свет состоит из суперпозиции плоских монохроматических волн (на квантовом языке - потока фотонов), распространяющихся по прямым линиям и переносящих энергию и импульс. Идея о том, что электромагнитная волна может обладать угловым моментом и передавать его макроскопическим телам была впервые высказана в конце XIX века русским физиком А.И. Садовским. В середине 30 годов прошлого века эта идея была экспериментально подтверждена (R.A. Beth; A.H.S. Holborn) и было доказано существование углового момента у циркулярно поляризованной волны. Первоначально угловой момент электромагнитной волны связывался только с её поляризацией. Однако при отыскании соответствующих интегралов движения из вариационного принципа для поля Максвелла можно получить выражение для полного углового момента поля в вакууме. Разделение углового момента поля на орбитальную и спиновую части, как для классического поля, так и после его квантования, до сих пор является предметом активных обсуждений и дискуссий. Они перестали

быть чисто академическими после открытия закрученного света (twisted light) и его многочисленных реализованных и потенциальных применений. Поэтому, в последнее время структурированный свет стал синонимом электромагнитного поля с орбитальным угловым моментом (ОУМ) [2]. Световой пучок с орбитальным моментом обладает фронтами спиральной фазы, так что вектор Умова-Пойнтинга $c/4\pi \vec{E} \times \vec{H}$ внутри пучка вращается относительно оси распространения. В отличие от спинового углового момента, связанного с циркулярной поляризацией волны, который может принимать только два значения по направлению распространения, дискретные проекции ОУМ неограничены. Поэтому, световые пучки с ОУМ рассматриваются как потенциальные кандидаты для более плотного кодирования квантовой информации. Ожидается, что совместное использование спиновых и орбитальных угловых моментов перепутанных (entangled) фотонов позволит реализовать совершенно новую высокоскоростную оптическую связь, защищенную квантовыми принципами, что открывает уникальные применения в квантовой криптографии.

Фундаментальное открытие ОУМ света открыло новое направление в классической и квантовой оптике. Однако и детально изученная (как казалось!) поляризация света таит в себе новые неожиданные свойства. Так, недавней работе [3] было экспериментально реализовано теоретическое предсказание, что направления поляризации в так называемом “трехмерном” свете, могут образовывать структуры с нетривиальной топологией, напоминающие ленту Мёбиуса [4]. В эксперименте [3] был использован сфокусированный системой линз лазерный луч, получивший специфическое распределение поляризации и интенсивности в световом пучке. Электромагнитное поле в нем осциллирует по-разному для разных частей пучка, и не обязательно под прямым углом к направлению распространения света, как в случае плоской волны. Компоненты напряженности электрического поля могут меняться во всех трёх измерениях, в результате получился свет, поляризация которого менялась по сечению пучка. В его центре он имел круговую поляризацию, а ближе к краям становился линейно поляризованным с различным направлением векторов поляризации, обегаящими неориентированную полосу Мёбиуса шириной около 250 микрометров, и возвращающимися в исходное направление после двукратного обхода.

Литература

1. Andrews D. L. Structured Light and Its Applications. NY: Academic Press, 2008.
2. Andrews D.L., Babiker M. (eds.) The Angular Momentum of Light. Cambridge: Cambridge University Press, 2013.
3. Bauer Th., et al. //Science 2015, Vol. 347, p. 964-969.
4. Freund I. // arXiv: 0812.3263v1, (2008).

НАУЧНОЕ ПОЗНАНИЕ КАК РЕТРОСПЕКТИВНАЯ РЕКОНСТРУКЦИЯ РЕАЛЬНОСТИ

Ю.М.Дуплинская

Вызовом для мысли является невероятная сложность мироздания, которая констатируется на всех его этажах - от космологии до биологии. Вопрос, мог ли столь сложный мир быть результатом «слепого» формотворчества природы, - является предметом дискуссии между сторонниками креационизма и сторонниками эволюционизма. Доводы сторонников «замысла Божьего» апеллируют к тому, что столь сложная сбалансированность мироздания не могла возникнуть без предварительного разумного плана. В самом деле, можно ли допустить, что сложнейшая подгонка всех физических констант, известная как проблема «антропного принципа» в современной космологии, - была результатом счастливой случайности? Но ссылка на «замысел Божий» как объяснение шокирующей сложности мироздания, - содержит в себе очевидную нелепость, и вот почему. Можно верить в Бога ... Но трудно поверить в Бога - математика, создающего мир на основе уравнений высшей алгебры. Если допущение случайной подгонки физических констант кажется абсурдом, - то почти столь же абсурдным представляется предположение, что подгонкой этих констант занимался Бог! Констатируем парадокс. Столь сложная сбалансированность не могла возникнуть «естественным» путем, но не могла быть и результатом замысла Божьего: ведь ни природа, ни Бог не прибегают к высшей математике. Расчеты, вычисления, сбалансированность фундаментальных констант, - все это, по известному выражению Ф.Ницше, - «человеческое, слишком человеческое».

А.Бергсоном в свое время была высказана очень глубокая мысль, которая поможет нам объяснить чрезвычайную сложность мироздания, не помяная имени Божьего всеу. Сложность

научной картины мира, по Бергсону, обусловлена не собственной природой исследуемой реальности, а некоей *абerrацией восприятия*. Эту абerrацию, которой по самой своей природе заражен наш интеллект, можно назвать *ретроспективным видением реальности*. Научное познание, по сути своей, есть *ретроспективная реконструкция реальности*, где умственный взор всегда устремлен в направлении, *противоположном* действительному становлению. Это сравнивается Бергсоном с устройством зрения существа, вынужденного, «двигаясь вперед, смотреть назад» [1, с.236]. Решимся утверждать, что чрезвычайная сложность теорий в фундаментальной науке обусловлена не столько глубиной этих теорий, сколько *ретроспективным видением* реальности.

Как известно, стратегией «Великого объединения» в современной физике является поиск дополнительных групп симметрий, которые позволили бы найти инвариантные преобразования между четырьмя фундаментальными видами взаимодействия, а затем между фермионами (частицы вещества) и бозонами (частицы - переносчики взаимодействия). В контексте вышеприведенных рассуждений, стоит задуматься: а может ли вообще симметрия познаваться как-то иначе, нежели путем *ретроспективной реконструкции*? Как заметил С.Беркович, «идеальная симметрия не является операционально определенным понятием. Очевидно, симметричный процесс может начаться только в том случае, если эта симметрия окажется нарушенной каким-то, пусть незначительным, несовершенством» [2, с.80]. Из этого следует, что, по самой сути своей, поиски «суперсимметрии», не могут быть ничем иным, как *ретроспективной реконструкцией* реальности. Умственный взор здесь сфокусирован *вспять* по отношению к развитию событий: от конечного пункта, где идеальная симметрия распалась - к достраиванию начального пункта, где она, предположительно, имела место. Поиски симметрий и суперсимметрий – это эволюция Вселенной, видимая в *ретроспективе*. Такая абerrация восприятия подобна тому, что кто-то «был поражен тем, насколько точно вписывается в свою долину река Миссисипи», как «на всем своем долгом пути река очень удобно подходит ко всем пристаням и проходит под всеми мостами» [3, с.260]. Ретроспективным видением и объясняется очевидный парадокс, что в теориях «Великого объединения» для описания минимально дифференцированного и, соответственно, максимально «*простого*» состояние физической реальности требуется максимально *сложный* теоретический аппарат.

Литература

1. Бергсон А. Творческая эволюция. М.: Канон Пресс, 1998.
2. Беркович С.Я. Клеточные автоматы как модель реальности. М.: Изд-во МГУ, 1993.
3. Девис П. Суперсила. М.: Мир, 1989.

ЧТО РАЗУМ ИЩЕТ В ЛАБИРИНТЕ? ИЛИ «ЧТО ТАКОЕ ЖИЗНЬ С ТОЧКИ ЗРЕНИЯ ФИЗИКИ»

Б.А. Медведев

В 2010 году была опубликована обзорная статья Г.Р. Иваницкого [1], посвященная 65-летию выхода в свет книги Э. Шредингера: Что такое жизнь с точки зрения физики? [2]. В статью приводятся 10 признаков, общих для живой и неживой природы, в том числе: «1. Живые организмы характеризуются упорядоченной иерархической структурой. 2. Живые организмы являются открытыми системами. 3. Способность реагировать на внешнее воздействие (рецепция). 4. Способность запоминать информацию о предыдущих состояниях и адаптироваться к изменению внешних условий. 5. Живые организмы изменяются и усложняются. 6. Все живое размножается. 7. Живое способно к саморегуляции и регенерации повреждений. 8. Живые объекты осуществляют обмен веществ с окружающей средой с целью размножения и экспансии. 9. Живые объекты обладают направленной подвижностью. 10. Живым объектам свойственна неравновесность состояния».

Далее автором резюмируется: «Жизнь с точки зрения физики можно определить как результат процесса игры взаимодействий материи, в которой одна её часть приобрела свойство запоминать вероятности появления удач и неудач в предыдущих раундах этой игры, повышая тем самым свой шанс на существование в последующих раундах. Эту часть материи сегодня называют живой материей». Но, обращаясь к человеческой жизни, мы видим ограниченность такого определения. В мире описанном строго рационально нет места жизни...В XXI веке, в познание жизни человека

кроме физиков вовлекаются представители всех областей научного и гуманитарного знания, математики, химии, биологи психологи и философы. Но не будем забывать, что вечные вопросы в диалоге разума и чувства о смысле жизни, о любви, о смерти и бессмертии относятся к области метафизики. И здесь интересно отметить, что вопрос: Что такое метафизика? М. Хайдеггер заменяет вопросом: Что такое человек? И здесь отдадим должное Э. Шредингеру, который в эпилоге своей книги задается вопросом: «Что же такое это Я»? К метафизике следует, вероятно, отнести и окончательную фразу Шредингера: «И даже если искусный гипнотизер сумеет совсем вычеркнуть из вашего сознания все ваши ранние воспоминания, то и тогда вы не будете считать, что он убил вас. Ни в каком случае здесь нет потери личного существования, которую надо оплакивать. И никогда не будет!»... Познать самого себя. Не эта ли проблема была сформулирована Фалесом? И не в том ли сложность подхода к этой проблеме, что словами Гераклита «природа любит скрываться». Размышляя над вопросом, что такое жизнь, мы с неизбежностью задаемся и другим: Что такое сознание? Остановимся на квантовой концепции природы сознания Роджера, Пенроуза [3,4], состоящей в гипотезе квантовых когерентных процессов, происходящих в структурных элементах цитоскелета нейронов головного мозга. Критика его оппонентов, в частности, А. Шимони [3, С.141] и Н. Картрайт [3, С.157] сводится к возражению против физикализма Пенроуза и к вопросам почему в своих теориях Р. Пенроуз не использует предположение Уайтхеда о ментальности, онтологически присущей всей вселенной и «Почему именно физика?» Высказывая свою точку зрения [5], мы полагаем,

что концепции детерминизма и индетерминизма, квантовый характер микромира и спектр квазиклассических реальностей в многомировой интерпретации Эверетта отражаются в структуре сознания. Не происходит ли это отражение уже по той причине, что сознание, согласно Юнгу представляет дискретный феномен и «подобное познаётся подобным»? В этом контексте обсуждается проблема сообразности гипотетической модели сознания моделям микро и макромира и дискутируется вопрос о подобии дискретно-континуальной структуры сознания квантовому спектру электрона в атоме. Но сложность вопросов не снимается. «Никто так не близок к заблуждению, как философствующий». /М. Хайдеггер/ Так, не подвергаемся ли мы тирании со стороны наших собственных идей? Не приводит ли познание к великой магии факта?.. Чем ближе к сущности, тем дальше она от дефиниций. Что же такое это жизнь? – Черновика нашей жизни не существует. Синонима жизни не подыскать. Мы прижимаем жизнь к себе, но вынести ее из вечности не в силах. Жизнь есть переживание, не совместимое с самим собой. Но закончим оптимистично: «Мыслью, следовательно, существую», существование тождественно протяженности нашего сознания. Жизнь есть протяженность нашего сознания с верой, надеждой и любовью. «Мы воздухоплаватели ума» /Ф. Ницше/.

Литература

1. Иваницкий Г. Р. // УФН 2010, Т. 180, № 4, с.337–369.
2. Шредингер Э. Что такое жизнь с точки зрения физики? М.: РИМИС, 2009, 176 с.
3. Пенроуз Р., Шимони А., Картрайт Н., Хокинг С. Большое, малое и человеческий разум /Пер.с англ. М.: Мир, 2004, 191с.
4. Юлина Н.С. //Вопросы философии 2012, № 6, с. 116–130.
5. Медведев Б.А. Парадигма образов микро- и макромира в структуре сознания. Национальная философия в глобальном мире: тезисы Первого Белорусского философского конгресса / Национальная академия наук Беларуси, Институт философии; редкол.: В. Г. Гусаков (пред.) [и др.]. – Минск : Беларуская навука, 2017., С.122 – 123.

«СЛУЧАЙНЫЕ» ИЗОБРЕТЕНИЯ И ОТКРЫТИЯ

А.Г. Роках

«...Учёных часто спрашивают, какое открытие они собираются совершить. И даже просят уточнить, как именно и когда оно будет сделано!» - говорила во время награждения лауреатов Нобелевской премии по химии 2012 года член Нобелевского комитета профессор Сара Сногеруп Линсе. И добавляла: «Удивительно, как реальность иногда похожа на сказку! Великие открытия часто являются серендипными» [1].

В современном американском словаре английского языка термин «serendipity» имеет несколько значений: способность случайно совершать удачные открытия, пример такого рода открытий и сам факт их появления. В русском языке наиболее близки к понятию «серендипность» слова «озарение» и «про'видение». Впрочем, думается, и «прови'дение» может в известном смысле

подойти, если вспомнить К. Юнга [2]: «Мир богов и духов воистину "не что иное, как" коллективное бессознательное внутри меня».

Дэвид МакМиллан (США) предложил использовать провидение как инструмент сознательного открытия новых химических реакций. Отечественный методолог изобретательства Г.С. Альтшуллер пошел еще дальше и предложил заменить догадки в изобретательстве обычной инженерной работой. А его последователи предложили вообще избавиться от психологического подхода в изобретательстве.

Почему «серендипность» завоевывает популярность в науке? Известный французский химик и историк науки Пьер Ласло объясняет это желанием, пусть робко, но противопоставить случайность в научном поиске целенаправленности исследования. И, добавим от себя, увеличить таким способом свободу и романтику исследования, проникновения в неизвестное.

Переходя к методологии технического творчества, отметим, что главный парадокс заключается в том, что метод технического творчества хотят видеть таким же, каким ожидают получить его результат, а именно строго логическим, формализованным. Подобный парадокс в ТРИЗ (теория решения изобретательских задач Г.С. Альтшуллера) - расплата за пренебрежение психологическими аспектами творчества. И здесь ведь тоже парадокс. ТРИЗ начиналась со статьи её родоначальника в психологическом журнале [3]. Но затем психология впала в немилость в погоне за точностью и объективностью.

Итак, серендипность, непредсказуемость открытий вступает в противоречие с известным методом технического творчества ТРИЗ, который предлагает алгоритмизировать получение нового решения, исключить элемент случайности, не оставляя места для серендипности. Однако, как показано выше, она имеет не меньшее право на существование, чем логико-алгоритмический подход.

И, наконец, об экономической стороне дела. Серендипные открытия часто не требуют больших материальных затрат. Да и как эти затраты оценивать, если такие открытия нередко происходят побочно, «случайно», по ходу работы над чем-то другим?

Действительно, самое дорогостоящее открытие в истории человечества не было серендипным. Это открытие бозона Хиггса на адронном суперколлайдере, стоимость которого сопоставима с годовым бюджетом небольшого государства. Возможность экспериментально обнаружить бозон Хиггса была одной из основных целей строительства этого гигантского сооружения, т.е. к этому открытию шли целенаправленно экспериментально обнаружить бозон Хиггса была одной из основных целей строительства этого гигантского сооружения, т.е. к этому открытию шли целенаправленно.

Литература

1. Рулёв А. // Наука и жизнь, 2017, № 3.
2. Юнг К. Комментарий к Тибетской книге мертвых //Тибетская книга мёртвых. СПб.: Амфора, 1999.
3. Роках А.Г. Логика и эвристика научно-технических решений: Учебное пособие, Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 1991, 96 с.

«ТРАНСГРЕССИЯ» СКВОЗЬ ПРИЗМУ НЕКЛАССИЧЕСКОЙ НАУКИ

Н.В. Довгаленко

Наука, даже в привычном нам классическом смысле, возникает как экспансия. Агрессивное «наступление» на границы человеческой самости и сведение ее к рациональности; разграничение областей мира на реальное, концептуальное и номинальное и планомерное «завоевание» их; открытие новых объектов и постепенное переведение их из статуса невозможного в возможное. Все это – основное дело научного познания и опыта. «Знание – сила» – звучит как своеобразный лозунг трансгрессии, в которой ведущим фактором является момент воли, потому сам проект науки первоначально реализует данную претензию. «...Трансгрессии происходят в четырех мирах и направлены на «вещи», «на людей», «на символы» и «на себя». Но проявляются они в двух формах: как экспансивная деятельность и как творчество» [1, с. 66]. Трансгрессия раскрывается в философии как преодоление привычного, устоявшегося, достижение опыта-предела (М. Фуко), в котором пребывает «невозможное», «немыслимое».

Как только классическая наука вроде устанавливает свои ясные, строгие пределы, оговаривая принципы, основания, методологию случается новый виток трансгрессии, связанный с преодолением классической научной парадигмы. Определение наблюдателя как воли, вторгающейся в пределы реального и создающего прецедент невозврата в предшествующее состояние. Детализация роли

наблюдателя, всевозрастающее его присутствие порождает «включение» своеобразных механизмов сопротивления реальности. Устраняется «контроль» за реальностью. Происходит постепенное преодоление идеи трансцендентальности субъекта в процессе научного познания.

Эти события разворачиваются, в том числе, благодаря осмыслению опытов со светом, проводимых Р. Фейнманом. Их интерпретация порождает квантовую электродинамику. Фейнман стремится создать некую стабильную для расчетов и предсказаний систему, т.е. идет классическим путем. Тем не менее, столкновение с многочисленными парадоксами в опытах подвигает его к переосмыслению привычной методологии. «Мы должны примириться с очень причудливыми явлениями: усилением и подавлением вероятностей, отражением света от всех частей зеркала, распространением света не по прямой и со скоростью, меньшей или большей обычной скорости света, движением электронов вспять во времени, внезапным распадом фотонов на электрон-позитронные пары, и т.д.» [2, с. 106].

Все эти выводы только кажутся парадоксальными, на самом деле они созданы прямым преодолением границ классического понимания. Наиболее ярким примером этого является знаменитый опыт с прохождением света через два отверстия и порождением (или непорождением) интерференционной картины. «Природа так все устроила, что мы никогда не сможем понять, как она это делает: если мы ставим приборы, чтобы выяснить, по какому пути пойдет свет, - пожалуйста, мы можем это выяснить, но удивительные интерференционные эффекты исчезают. А если у вас нет приборов, показывающих, по какому пути идет свет интерференционные эффекты восстанавливаются» [2, с. 73]. По словам самого Фейнмана этот парадокс демонстрирует как важно правильно отнестись к тому, что называется законченным (полным) событием. Именно представление о событии и его дробление на составные «действия» порождает особый, какой-то невозможный мир. «Вероятность наблюдаемого реального события» становится основным понятием, создаваемым субъектом. Причем в нем важнейшим моментом будет фиксирование его конечности (либо интерференционная картина, определяемая одним детектором, либо реакция промежуточного детектора, установленная в одном из отверстий прохождения света плюс детектора интерференционной картины). Субъект постоянно преодолевает границу возможности события и, таким образом, вторгается в область невозможного.

Уход от научной практики трансцендирования, когда субъект находился как бы «сверх» объекта, взирал на его метаморфозы из точки абсолютного, сменяется уже в неклассический период опытом трансгрессии. Субъект не является независимым наблюдателем, он осознает себя скорее «как волю», преодолевающую границы привычного, познанного или осуществляющего проникновение в существо самой реальности, подвигая ее.

Литература

1. Подгурецки Ю. //Вестник ТПУ. Серия: Гуманитарные науки (Философия). Томск 2007, Выпуск 11 (74), с. 64-69.
2. Фейнман Р. КЭД: Странная теория света и вещества. М.: Наука, 1988, 138с.

ОБ ИСЧЕЗНОВЕНИИ ДИАЛЕКТИКИ ИЗ ФИЛОСОФСКОГО ПРОСТРАНСТВА РОССИИ

А.Г. Роках

Диалектика, которая в эпоху социализма была главным философским орудием в СССР, с его распадом «исчезла» из поля зрения философов, причем, не совсем понятно, почему. На этот вопрос не могли ответить философы не только Саратовского, но и Московского университетов, к которым я обращался. Поэтому я не могу пройти мимо появившейся недавно книги, посвященной этому вопросу [1].

Диалектика не чье-то изобретение, а, согласно А. Ивину, стиль мышления соответствующей эпохи, когда господствовали коллективистические общества. Правда, ее зачатки восходят к Гераклиту. Однако дальнейшее развитие диалектика получила в Средние века в связи с потребностями христианской церкви. Человеку надо было дать надежду, что хотя бы после смерти он может попасть в лучший мир – «рай», что, живя в несовершенном мире, он своей преданностью Всевышнему одновременно готовит себе переход в лучший мир. В компактном виде диалектика появилась у Гегеля, которого А. Ивин вслед за Шопенгауэром и Поппером [2], считает, тем не менее, посредственным философом. Такая точка зрения отчасти может быть оправдана из-за отталкивающего современного читателя изложения Гегелем научного, и особенно естественнонаучного, материала. Тем не менее, диалектику систематизировал именно он.

Главное, что напрягает, когда сталкиваешься с превознесением диалектики, это приучение к противоречивому мышлению, идущему в разрез с законом непротиворечивости формальной логики. В наше время можно оценить, так ли уж это страшно. Дело в том, что популярный в нашей стране метод технического творчества ТРИЗ (теория решения изобретательских задач) имеет дело с противоречиями. Правда, в плане их устранения. Однако, для устранения надо, чтобы они существовали, а для этого еще необходимо их найти и сформулировать с помощью специального заострения проблемы. Эти противоречия объектов автор ТРИЗ Г.С. Альтшуллер называет диалектическими. В то время, когда он работал, это было довольно естественно. Наш анализ, выполненный ранее, показал, однако, что эти противоречия на самом деле формально-логические [3]. И разрешаются они по законам формальной логики. Отсюда мы выводим недостающее, на наш взгляд, звено в рассуждениях А. Ивина о том, почему диалектика – не наука, а стиль мышления соответствующей эпохи.

Это происходит потому, что, в отличие от формальной логики, *диалектика не инструментальна*. Она не имеет методики разрешения противоречий и, возможно, не хочет иметь. Формальная логика их имеет. Она разводит противоречия по времени, по отношениям, модальностям, где существенную, содержательную, помощь ей оказывают естественные науки и главным образом их лидер – физика. Отсюда и формулировка «физического» противоречия в ТРИЗ, которое позволяет найти решение нестандартных изобретательских задач. Так что я бы не стал мазать диалектику одной лишь черной краской и ждать, когда для ее возрождения наступят подходящие времена. Ей надо пользоваться уже сегодня, но не как панацеей. Что же касается формальной логики, то она стала наукой именно вследствие своей инструментальности, которая помогла ей «встать на ноги» и выделиться из лона философии, чего не произошло с диалектикой именно по этой причине.


«Усеченная» формальная логика (в виде закона исключенного третьего как варианта закона непротиворечивости) вошла в Булеву алгебру и двоичную систему счисления компьютера. Так что формальная логика работает и в новых областях, оставаясь незаменимой в старых, однако не вместо, а, желательно, вместе с диалектикой.

Литература

1. Ивин А.А. Диалектика: зарождение, триумф и крах. М. - Берлин: Директ Медиа, 2015.
2. Поплер Карл // Вопросы философии 1995, №1, с.118-138.
3. Роках А.Г. Диалектика и ТРИЗ // «Прикладная диалектика» и педагогика: теоретические и практические аспекты интеграции. Межвуз. сб. науч. трудов. Саратов: Изд-во «Научная книга», 2006, с. 13-21.

МЕТОДЫ И МОДЕЛИ РАСПОЗНАВАНИЯ ОБРАЗОВ В ИЗОБРАЗИТЕЛЬНОМ ИСКУССТВЕ

Ю.А. Бродская

В работе проанализированы методы распознавания зрительных образов (с обоснованным выбором), а также предложена их реализация в приложении к вопросам атрибуции произведений изобразительного искусства. Подходы, использованные в работе, относятся к разработкам в области математических моделей и методов теории распознавания образов и анализа изображений. Отдельным моментом исследования, как частная задача, является работа с небулевыми матрицами. Вообще, под распознаванием образа (объекта) понимают определение класса объектов  классификации, заданной на генеральной совокупности \mathcal{M} некоторой предметной области, которому принадлежит распознаваемый объект.

Определение принадлежности распознаваемого объекта к классу объектов основывается на оценке близости его свойств (признаков) к свойствам объектов класса. Описание класса представляет собой неупорядоченный набор описаний эталонных объектов, принадлежность которых к классу известна. Описание *эталонного* объекта – строка таблицы эталонных объектов, элементы которой являются значениями признаков, описывающих объекты; множество признаков (упорядоченное), описывающее объекты – единое для всех классов. Обычно рассматривают классификации с непересекающимися классами (разбиения): $K_{j_1} \cap K_{j_2} = \emptyset$. Особенности постановки заключаются в следующем. Разбиение генеральной совокупности \mathcal{M} определено не полностью: существуют объекты $s \in \mathcal{M}$, принадлежность которых классам не известна. Такие объекты называются неизвестными. На выборке эталонных объектов $M \subset \mathcal{M}$ определяется упорядоченный набор

признаков $x_1, x_{i_2}, \dots, x_{i_n} \in X$; задаваемый экспертами предметной области. Из этого набора, если он велик, исключают признаки с малой информативностью, определяемые формальными способами. Особенность приложения РО в данной предметной области состоит в том, что идентификация живописной работы включает в себя не только исследование химического состава пигментов, составляющих краски, но и некоторые технологические приемы, присущие определенному мастеру, школе или направлению. Детальное исследование химического состава включает в себя изучение спектров отражения пигментов (например, примесей красного на живописных работах). Особый интерес представляет идея определения подлинности живописных полотен и по отпечаткам пальцев художника. Этот подход аналогичен тому, что успешно применяется в криминалистике и легко реализуем посредством таких методов распознавания, как тестовый, геометрических или стохастический (Байесовский классификатор). Хорошие результаты тестирования дают методы k-средних и ближайших окрестностей с помощью MATLAB. Метод k-средних предпочтительнее применять к изображениям, обладающим большим количеством цветовых оттенков и нюансов; метод ближайших соседей применим для изображений с четким разделением цветных областей, а разброс оттенков при этом должен быть, напротив, минимальным. Следовательно, метод применим для идентификации произведений изобразительного искусства с более четким цветовым контрастом.

РЕВОЛЮЦИЯ ЦВЕТА: ХИМИЧЕСКИЕ ПРЕДПОСЫЛКИ

В. В. Сорокин

Научная, техническая и гуманитарная революция 19-21 веков обусловлена, среди прочего, интенсивным развитием представлений о цвете. Мощными предпосылками такого развития явились исследования физической природы цвета и последующий взрывной темп развития химической науки. Цвет практически всегда имеет вещественную природу. Воспроизвести цвет – означает в конце концов синтезировать поглощающее или излучающее вещество.

С древнейших времён цвет играл важную роль в жизни человека. Бывало, что краситель ценился на вес золота (тирский пурпур). Цвет формировал мировосприятие и язык. Например, во многих древних языках отсутствовало слово «синий», а в Древнем Египте было такое слово, и вероятно потому, что именно там добывалась качественная синяя краска (индиго). Позвольте также задать вопрос, достойный исторического исследования. Стал бы кумач символом революции в России, если бы не существовало хорошей технологии производства кумачовой ткани на ситцевых фабриках династии Барановых? Почему вообще красный цвет был так популярен среди русского народа, не потому ли, что в России умели получать из марены красильной яркие оттенки этого цвета?

С развитием технологического общества усилилась потребность в достаточном количестве хороших красителей для коммуникации, распространения информации и других целей. Считается, что Наполеон был одним из первых, кто поставил на государственном уровне проблему замены природного индиго синтетическим аналогом, объявив премию в миллион франков. Никакой романтики - французская армия нуждалась в огромном количестве синих мундиров. Однако данная задача была невыполнима в начале 19-го века в принципе. Лишь в 1883 г. индиго был синтезирован немецким химиком А. Байером после кропотливой работы, за что удостоился Нобелевской премии.

Каковы основные вехи на пути к синтетическим красителям? Расщепив индол, химики выделили анилин и антралиловую кислоту – важнейшие полупродукты в синтезе красителей. Развитие металлургической промышленности зародило коксохимическую отрасль, давшую ценные продукты пиролиза каменного угля - ароматические соединения (бензол, толуол, фенолы, нафталин и др.). Открытие химического связывания азота воздуха в аммиак (Габер), окисления аммиака до азотной кислоты и открытие реакции восстановления нитробензола до анилина (Зинин) позволило окончательно достроить цепочку от дешёвого сырья до синтетических красителей: ароматические компоненты каменноугольной смолы или нефти → нитроарены → анилины → красители.

Возникновение теории строения органических соединений и Периодической системы, а в последующем и квантовой химии, позволило направленно синтезировать вещества с необходимыми свойствами. Сенсibilизаторы и цветные проявляющие вещества сделали массово доступной цветную фотографию. Химия высокочистых и редкоземельных элементов дала толчок развитию люминофоров. Плазменные ячейки и жидкие кристаллы предопределили революцию в области

телевидения, цифровой съёмки и компьютерной техники. Теперь особенную актуальность приобрёл вопрос «пересылки» цвета и правильного воспроизведения на всех устройствах. Есть задача и на будущее – создание материалов с цветовым охватом до границ восприятия человеческого глаза. Лучшее из наиболее популярных сейчас цветовых пространств DCI-P3 не охватывает и половины видимых человеком цветов.

ФАКТОР ЦВЕТА В СОВРЕМЕННЫХ ТЕЛЕКОММУНИКАЦИЯХ

О.В. Шимельфениг, Л.Я. Солодовниченко

Сегодня в информационное поле включена мощная система интерактивного взаимодействия двух структур - телевизионного вещания и зрительского восприятия. Эта система замкнута в своем единстве. Приемы интерактивного воздействия на зрителя видоизменили многие наши представления о видах коммуникации и придали телевизионному экрану иную степень «достоверности».

Исходя из этого, сегодня многие теоретики аудиовизуального искусства обратились к изучению проблем, связанных с видоизмененной экранной «реальностью». Телевизионное зрелище постепенно перерастает в «гипертекст» современной культуры, где само понятие «реальность» делится на составляющие: репродукция действительности, «вторая реальность», «виртуальная реальность». Синтез экранного образа перерастает из синтеза звука и изображения в синтез новой структурной модели отражения действительности, где при помощи мультимедийных технологий объединяется в единое целое факт и образ, документ и «игра».

И здесь особую роль приобретает цветовое решение, которое может еще больше приблизить экранное изображение к жизни или создать иллюзорный мир, перенести зрителя в мир фантазии и символов, заменив отражение «действительности» образной зрелищностью, становящейся неотъемлемой частью всей телевизионной продукции в целом. Именно поэтому одной из важных предпосылок нашего исследования послужило усиление роли цвета при создании зрелищных программ различных жанров. Эта тенденция поставила перед создателями телевизионной продукции ряд вопросов: какое воздействие оказывает на зрителя непрерывный информационный поток, по каким законам сегодня создаются телевизионные образы, как трансформируется технология создания программ с приходом цифрового телевидения, каковы дальнейшие пути развития цвета на ТВ? Все выше перечисленные вопросы требуют тщательного исследования, свидетельствуя об актуальности темы.

Основными цветами, которые воспринимает человек, Т. Юнг назвал первоначально - красный, желтый, синий. Однако впоследствии он изменил свою точку зрения и выделил в качестве главных цветов - красный, зеленый и фиолетовый. Его опыты стали основой для последующего изучения цветового зрения. Известному ученому-офтальмологу Г. Гельмгольцу удалось на практике доказать правильность идеи Т. Юнга. Почти через 150 лет непосредственное подтверждение их выводов получил Р. Гранит (США) при помощи электрофизиологических методов.

Эти и другие исследования легли в основу технологии передачи цвета в кино и на телевидении, так как суммарные цвета дают весь цветовой спектр, различимый глазом в зависимости от колебаний световых потоков. Однако наравне с чисто физиологическим восприятием цвета или цветного объекта существуют и другие особенности его восприятия. В частности, психофизиологическое восприятие может носить как всеобщий, так и индивидуальный характер. Особый вклад в изучение психологии восприятия цвета внёс М. Люшер. С развитием различных направлений в живописи, архитектуре, в театре, а затем и в экранных искусствах, возрос интерес не только к психологическим и физиологическим особенностям восприятия цвета или техническим приемам передачи цвета в этих видах искусства, но и к семантике цветового решения образов.

ПРОЯВЛЕНИЕ ФОТОСИНТЕТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ У РАСТЕНИЯ ПАРАЗИТА – ПОВИЛИКИ (*CUSCUTA CAMPESTRIS*) В СЛУЧАЕ ЕЕ ПОРАЖЕНИЯ ГАЛЛООБРАЗОВАТЕЛЕМ ДОЛГОНОСИКОМ (*SMICRONYX SMRECYNSKII*)

В.В. Аникин, М.И. Никельшпарг

Целью данной работы являлось исследование воздействия долгоносика *Smicronyx smreczynskii* на кормовое растение повилику полевую *Cuscuta campestris*: на состояние фотосинтетического

аппарата тканей растения, цветение, плодоношение и распространение. В ходе работы впервые была получена кривая индукции флуоресценции галла долгоносика на повилике полевой, определены характеристики фотосинтетического аппарата тканей галла и сопоставлены с характеристиками стеблей того же растения. Показано влияние долгоносика на цветение и плодоношение повилики. Полученные данные позволяют говорить о возможном пересмотре концепции взаимоотношений долгоносика *Smicronyx smreczynskii* и повилики *Cuscuta campestris*, от концепции прямого паразитирования галлообразователя на растении к концепции обоюдовыгодного взаимодействия видов.

Для установления фотосинтетической активности измерялись *параметры флуоресценции хлорофилла фотосистемы II* в галлах и на приборе «МЕГА-25», разработанном на кафедре биофизики биофака МГУ им. М. В. Ломоносова. Флуориметр имеет мощный светоизлучающий диод (455 нм, $7500 \text{ мкмоль} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$), формирователь импульсов тока светодиода, фотодиод с граничным светофильтром ($\lambda > 670 \text{ нм}$), усилитель сигнала и аналого-цифровой преобразователь (АЦП). Угол падения пучка возбуждающего света – 60° , угол измерения флуоресценции – 30° относительно поверхности галла (стебля).

Для исследования фотосинтетической активности регистрировали индукционные кривые флуоресценции хлорофилла для стебля и галла. Кривые были нормированы по уровню F_m . Такая нормировка была необходима, поскольку амплитуда сигнала флуоресценции хлорофилла сильно варьирует от образца к образцу из-за разной площади поверхности побегов. По кривой индукции флуоресценции были измерены показатели F_0 , F_m и рассчитано соотношение F_v/F_m – максимальный квантовый выход ФСII, характеризующих эффективность использования энергии света, для стеблей и галлов повилики. Из полученных результатов хорошо видно, что и стебли, и галлы повилики *C. campestris* обладают фотосинтетической активностью. Значение F_v/F_m в стеблях составляет $0,54 \pm 0,02$, что хорошо коррелирует с данными других авторов. Значение F_v/F_m в галлах измерено впервые и составляет $0,71 \pm 0,01$, что достоверно превышает значение в стеблях. Более высокое значение F_v/F_m в галлах согласуется с более низким начальным уровнем флуоресценции. Характерные времена переноса электрона внутри ФСII, которые были определены по участкам J-I и I-P индукционных кривых, достоверно не отличались в галлах и стеблях.

Проведенные исследования показали, что ткани галла долгоносика *Smicronyx smreczynskii* на повилике *Cuscuta campestris* обладают более высоким уровнем фотосинтетической активности, тогда как заражение личинки долгоносика паразитом *Bracon murgabensis*, приводящее к прекращению жизнедеятельности личинки, приводит к пожелтению галла, что может свидетельствовать о разрушении хлорофилла и снижении фотосинтетической активности. В свою очередь, это означает, что необходимым условием для формирования и поддержания структуры галла является жизнедеятельность самой личинки долгоносика.

Таким образом, анализ полученных результатов позволяют авторам говорить о новом взгляде на взаимоотношения долгоносика *Smicronyx smreczynskii* и повилики *Cuscuta campestris*. Концепция прямого паразитирования галлообразователя на растении меняется на концепцию обоюдовыгодного взаимодействия видов.

АНГЛИЙСКИЙ ЯЗЫК КАК СРЕДСТВО НАУЧНОГО ОБЩЕНИЯ

ON COMPILING THE ENGLISH-RUSSIAN DICTIONARY ON BIOPHOTONICS

Svetlana V. Eremina

Saratov State University

The dictionary contains about 3000 terminological units of Biophotonics including both basic terminological corpus and interdisciplinary one. A no-how of the authors has been to provide a terminological dictionary with a phonetic transcription, which is beyond traditional approach of lexicography. The present edition has been developed for students of specialization "biochemical physics", "medical physics", "physics", postgraduate students for candidate examination preparing; masters' degree English language course for efficient acquisition the literature in English and students of qualification "translator in the sphere of professional communication". As a reference book this dictionary would be helpful for researchers dealing with Biophotonics and specialists of related areas of science, teachers of English, translators and editorial staff.

INTRODUCTION

According to the author of the editorial of the issue of Biomedical Photonics Handbook, Biophotonics is a field of research formed at the junction of several sciences, such as chemistry, physics and biology [1]. Its development was marked by three scientific and industrial revolutions of the twentieth century, namely, quantum theory, industrial revolution and achievements in genetic engineering. The last two decades have been marked by the intensive development of Biophotonics, the emergence of new methods and tools of research, the expansion of the boundaries of the field of research, the introduction of the achievements of other scientific fields. All this is reflected in the vocabulary of Biophotonics.

Each branch of science develops its terminology according to the methodology, subject and method of investigation. Since Biophotonics emerged at the intersection of a number of scientific directions, it is but logical to assume that the terminology of several natural scientific disciplines influenced the formation of a system of terms in this field of research, including chemistry, physics, biology, biochemistry, biophysical chemistry, optical physics, photobiology and others [2,3].

MATERIALS AND DATA

Despite the fact that this dictionary [4] is called the "English-Russian reference book of terms of Biophotonics", not all lexical units described in the dictionary can be strictly related to terms. The lexical corpus of Biophotonics is characterized by heterogeneity: the compound terms (noun + noun) often contain the known terms from other natural scientific disciplines, the meaning of which in this area could be both retained and revised in accordance with the conceptual apparatus of Biophotonics. In most cases, the meaning of such terminological phrases tends to be used in a fixed form in speech and could not be deduced from the individual lexical components of the compound terms.

The authors propose the variant of the translation of compound terminological units, which has become widespread in the literature on Biophotonics in Russian. For example, when translating a compound term *frequency domain technique*, one should not translate it via the individual components of the phrase and compile the meaning of individual words in the target language, but rather find a ready-made compound term in the target language which denotes the corresponding concept, namely, *фазово-модуляционный метод* [5-10].

Since a number of terms characterized by the frequency of occurrence in the English terminology of Biophotonics do not have lexical equivalents in the Russian language at a recent stage, the authors have taken the courtesy of proposing either a current translation or a description of the phenomenon, process or object, taken from the Biophotonics literature in English.

It is also possible to predict further enrichment of the vocabulary of the Biophotonics terminology system by borrowing terminological units from the related scientific disciplines, due to expansion of the links of this field with the increasing number of scientific directions and development of new research methods, techniques and equipment. Therefore, this lexicographical source is of interest both for students studying on specialties "Biochemical Physics", "Medical Physics" and doing a master course in the direction of "Physics" (specialization - "Medical Physics"), and for professionals working in the field of Biophotonics and the related disciplines.

The problem of developing a dictionary, including the pronunciation of terms of biophotonics, has been caused by the need to analyze and describe the language of a new field of study in terms of describing the phonetic picture, taking into account the genesis of the terms. The practical need for such a manual is

due to the fact that until now the terminological dictionaries did not contain, as a rule, information about pronunciation, as this traditionally was not part of the task of the special language dictionary.

SELECTING MATERIAL FOR LEXICOGRAPHIC DESCRIPTION

Criteria for selection of lexical material, pursued by the authors, was frequency of occurrence of lexical units in the scientific literature on Biophotonics in English; author's innovations in speech, previously not included in the reference literature. The material for the compilation of the dictionary was a selection of terminological units from the modern Anglo-American literature on Biophotonics - periodicals, monographs, collections of scientific papers - and modern dictionaries of scientific terminology. For the reasons of comprehensiveness, the authors found it necessary to include in the vocabulary those words of general scientific vocabulary, the pronunciation and translation of which causes difficulties. As a rule, these are long, polysyllabic words borrowed from other languages.

FINDING OUT ABOUT PRONUNCIATION

The present dictionary provides detailed information about the pronunciation, including stress, of the lexical units. To each word and compound terms phonetic transcription is given.

The purpose of the book is to explain what the pronunciation symbols mean and where to find them in dictionary entries, how differences in British and American pronunciation are shown, and how the dictionary gives information about stress pattern in word and word-combinations.

The instructions for the pronunciation of words (terms) are given in square brackets immediately after the word (term). Pronunciations are shown using the standard system known as the International Phonetic Alphabet.

In some cases the authors did not have an opportunity to use the authority pronunciation dictionaries of terms, which, for example, is the Daniel Jones' phonetic dictionary, since they do not traditionally include terminological lexicon of any of the scientific directions. The authors had to turn to several Internet lexicographic sources, which did not always give the same phonetic characteristic of the word, or used significantly different phonetic codes (e.g. [11]).

If the authors found several variants of the pronunciation of one word, both British and American variants are given. Not all fluctuations of the pronunciation system of the language are described in the dictionary; only the most characteristic cases of equitable variants are presented, for example: *biotissue* [**baɪə**'tɪʃuː, -sjuː, Ам.-ʃuː] [12, 13, 14].

A special difficulty was represented by the words whose phonetic transcription is not given in the English dictionaries. In this case the authors had to use American dictionaries, one of them was the Webster's New Universal Unabridged Dictionary, which, as a rule, gives not the English but the American pronouncing norm and uses its own system of phonetic codes. In order to follow the uniformity of the pronunciation norm, the authors "anglicized" the data of the Webster's dictionary. When it was not possible to find a transcription of a word in either English or American dictionaries, the authors had to follow the general rules of describing phonetics of the English words and a uniform recording of phonetic transcription in the dictionary.

In the phonetic transcription column, some sounds, for example (ə), (ʊ), are given in parentheses to indicate the optionality of their pronunciation, for example *speckle* [**spek**(ə)l].

The signs of the stress of the phonetic transcription are located before the stressed syllables. The dictionary presents two degrees of stress: the main stress, (ˈ...), is placed before the stressed syllable above; a minor stress, (ˌ...), is placed in front of the stressed syllable below, to the left of the main stress, for example, [**f**ʌndə'ment(ə)l].

Due to complexity of the entries of the compound terms, the same marks of stress and signs are used to represent the pronunciation of each word of the phrase individually, for example, *microform anisotropy* [**maɪkrə**'fɔ:m ˌænaɪ'sɒtrəpi].

QUICK GUIDE TO USING A DICTIONARY

The dictionary follows an alphabetical order. English terms are in bold. Compound terms, which are a combination of two or more separate words that function as a single unit having its specific meaning, should be searched for by a main headword, the first (left) in the phrase. For example, the term *photon propagation* should be searched in the entry *photon*. In a number of cases, when the term in English has two

equal variants of writing and pronunciation, for example, *absorbance*, *absorbancy*, both words occupy one entry and are located in one line of the dictionary entry, the second one with a mark *Am*.

The phonetic transcription is given in square brackets: the first variant of the pronunciation is British, the second is American with the mark *Am*. The upper and lower stress is placed in front of the stressed syllable.

Translation of a terminological unit into Russian may have two or more variants arranged in the following order: the first is used in Biophotonics, the second - in the related fields of research. Explanatory comments are given in parentheses, for example, *microtubule* [*maɪkrə'tju:bjʊ:l*] (the parts of the cell responsible for the movement of chromosomes). In the translation field, the lexical extension of the translation of the term used in Biophotonics is given in square brackets.

The dictionary includes a number of autonym terms (compound terms containing the author's surname), such as the *Mueller matrix* [*'mju:lə 'meɪtrɪks*]. The writing of such terminological units was chosen taking into account the frequency of occurrence in the literature on Biophotonics and the related fields. The variant of their pronunciation is taken from the Webster's dictionary New Universal Unabridged Dictionary and rewritten taking into account the difference in signs of American and British phonetic transcription; the translation option is given in accordance with the frequency of occurrence of this variant of translation in terminological dictionaries.

The present edition includes introduction, table of phonetic codes (based on the system of International Phonetic Alphabet), corpus of vocabulary units, list of references and contents. The table of pronunciation symbols corresponds the material in the authentic authority sources, such as Cambridge English Pronouncing Dictionary [15], Longman Exams Dictionary [14], Oxford Advanced Learners' Dictionary [12].

References

1. Biomedical Photonics Handbook / edited by Tuan Vo-Dinh p. cm. Includes bibliographical references and index. USA, 2003.
2. Оптическая биомедицинская диагностика. В 2 т./Пер. с англ. под ред. В. В. Тучина. – М.:ФИЗМАТЛИТ, 2007. – 506с.
3. Handbook of Optical Biomedical Diagnostics / Valery V. Tuchin, editor. p. cm. – (SPIE Press monograph; v. PM 107) USA, 2002.
4. Еремина С.В., Правдин А.Б. Англо-русский словарь-справочник терминов биофотоники: Учеб. пособие. – Саратов: «Новый ветер», 2008. –80с.
5. A. J. Lohwater's Russian-English Dictionary of the mathematical sciences / R. P. Woas. – 2nd ed., rev. and expanded / with the assistance of Alana I Thorp. Providence, RI, USA, 1990.
6. Краткий англо-русский словарь-справочник химических терминов с произношением /Под ред. к. п. н. доцента М. М. Кутеповой. – М.: Издательство «Экзамен», 2006. – 318, [2] с.
7. Англо-русский физический словарь. Около 60000 терминов. Под редакцией проф., д-ра физ.-мат. наук Д. М. Толстого. М., «Сов. Энциклопедия», 1968.
8. Англо-русский медицинский словарь. Ок. 70000 терминов /Ажжигитов Г. Н., Бенюмович М. С., Чикорин А. К. – М.: Рус. яз., 1992. – 608 с.
9. Большой англо-русский политехнический словарь: В 2 т. Около 200000 терминов /С. М. Баринов, А. Б. Борковский, В. А. Владимиров и др. – М., Рус. яз., 1991.
10. Англо-русский словарь по программированию и информатике (с толкованиями) – М.: Рус. яз., 1990 – 335 с.
11. Dictionary by Merriam-Webster. URL: <https://www.merriam-webster.com/> (Retrieved: 28 October, 2017).
12. Oxford Advanced Learner's Dictionary. New Edition. Oxford University Press, UK, 1995.
13. Webster's New Universal Unabridged Dictionary. Published by Barnes and Noble, Inc., by arrangement with Random House Value Publishing Inc., New Jersey USA, 1994.
14. Longman Exams Dictionary. Pearson ESL, 2006.
15. Cambridge English Pronouncing Dictionary. – 17th ed./edited by Peter Roach, Games Hartman and Jane Setter p. cm. Cambridge University Press UK, 2006.

FREQUENT METAPHORIC MODELS

Dina A. Alexeeva

Saratov State University

The article is dedicated to the metaphoric models that can be observed in general and in physics in particular. The possible classifications of those are also mentioned. One of the stated points is that a certain metaphor can influence the tendency of further investigations in the studied area. In conclusion the brief remark is made on the cultural comparison of the metaphoric models in Russian and English languages.

INTRODUCTION

In the 17th and 18th centuries metaphoric language was permanently criticized as being inappropriate for the objectives and goals of scientific research due to its possible vague and inaccurate interpretation. Nowadays, nevertheless, many authorized physicists support the idea of using the available language tools for the purpose of constructing and expressing scientific concepts. It is economic, compact language use that saves the cognitive content. That is why studying metaphors in natural science gets more attention from both scientists and linguistic scholars.

The history of metaphor starts with Plato, Aristotle, Cicero, Saint Thomas Aquinas and is conveyed by Kant, Nietzsche, Black and other philosophers. In physics precisely the “metaphoric revolution” – if we can call it so – followed the Einstein’s theory of relativity. The idea that one phenomenon can be described from various points of view, some of them beyond the habitual perception of the world, occurred with the introduction of four-dimensional space-time continuum.

METHODOLOGY AND DATA

Metaphor can itself be described as a three-dimensional concept – it is constructed of a cognitive idea, lexical semantics and “surface language” [1]. The donor subject provides the latter two and the conception formation to the recipient subject which is usually a new phenomenon unlike the domain.

That gives us different ways for the metaphoric models to be systemized. One of the reliable lists of possible metaphoric models classifications is given in the work of H. Pulaczewska [1]. For example, systematization through donor: spatial metaphor, animations metaphor, anthropomorphisms. Systematization through recipient will give us optics metaphor, quantum physics metaphor, etc.

Depending on the purpose of a metaphor usage we can distinguish “theory-constitutive” and “educational” metaphors (according to Boyd), we also have binary classifications of diaphor and epiphor, stipulative and evolutionary metaphors, physics (or any other science) metaphor and general metaphor, extended and isolated metaphors, linguistic and conceptual metaphors.

The functional classification would include formation of concepts, education, metatheory.

Let us have a look at the example of a grammatical metaphor: in S. Gray’s description of an experiment we see “**electricity would be carried down** by the line to the ball”, “**the electric virtue passed from the tube up the pole**”, “I concluded that **the electric virtue came** to the loop that was suspended on a beam” (as in [1]). I.e. instead of using existing terms “electric fluid” and “electric substance” he sees it as a “virtue” that can be **carried down, come and pass**.

In the described case the researcher himself implies a new metaphoric concept. But sometimes there is already a common vision of a certain issue. One of the constitutive metaphors of physics is light travelling. It is a conceptual metaphor of everyday language. Both English and Russian see light in terms of movement: it can **enter** the room, **fall on** the object, **come through** the open window, etc.

That is why Newton, who was very sure of avoiding metaphoric language in scientific works still writes in his work “Opticks”: “refracted and turned out of their way in **passing through** a transparent object to another”, “from any other medium upon whose surface they **fall**” [2] – it was the only option a language itself will allow him to use. That is what makes it possible to apply a question “how fast?” to the light. Since it travels. And although we realize that light itself is not what we deal with (we rather deal with the lighted objects), but the way we conceptualize it raises new questions and sets new directions for studying.

The process goes further as science terminology becomes a source of metaphors too [3]. It can happen when a term gets a meaning as a new term in the other scientific field or becomes a general metaphor either by staying as it is or by going through affixation. Though, this is more typical for humanities as natural science tries to unify its terminological system to avoid misconception and mistaking one phenomenon for the other.

Why are metaphors and metaphoric models so supported in their right to exist in the scientific discourse? As S. Toulmin said, a metaphoric model “suggests further questions, taking us beyond the phenomena from which we began, and tempts us to formulate hypotheses which turn out to be experimentally fertile” [4].

The common metaphor “theories are buildings” (as in Lakoff and Johnson’s theory [5]) shows that each theory should have a **construct** and a **foundation**. And since a term like **stucco work** is not part of the conventional idea of a building, it is not frankly used to talk about theories. Although it might appear in the language as an individual – or as we also called it – novel metaphor [6].

Just as metaphoric models structure science, they also construct our daily life. Within the spatial metaphor a person's emotions are viewed as a **container**: we can **be in** love, we can **fall in** love. Those basic metaphoric models are unavoidable in both daily and professional life of a culture bearer.

CONCLUSION

Metaphoric models vary from language to language. There are some universal metaphoric models, such as an already mentioned "theories are buildings", there are some that match in two or several languages, and there are unique conceptualizations. If we speak of English and Russian language, we should be glad that in most cases the models either exist in both languages or are still recognizable and understandable for both parties.

Alongside with that some of the metaphors can become an obstacle during the course of students' individual work with English scientific papers thus "the awareness not only of the appropriate usage of metaphors in the own works, but also of such huge metaphorical nets of meanings is helpful in understanding the possible allusions throughout the scientific publications" [7].

Hence the possible solution could be to pay attention to the comparative linguistics studies of Russian and English languages in the chosen scientific field, such as [8] and [9], or the massive studies of a metaphoric system in general [10].

References

1. Pulaczewska Hanna "Aspects of Metaphor in Physics: Examples and Case Studies". Tubingen: Niemeyer. 301 p. (1999).
2. Sir Isaac Newton "Opticks: or a Treatise of the Reflexions, Refractions, Inflexions and Colours of Light. Also Two Treatises of the Species and Magnitude of Curvilinear Figures". London. 376 p. (1704).
3. Alexeeva Dina A. Terminology as a source of metaphors // Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM-2016: материалы Международного симпозиума и Международной молодежной научной школы Saratov Fall Meeting 2016 / под ред. Г.В. Симоненко, В.В. Тучина. – Саратов: Изд-во "Новый ветер", 2016. – 207 с. – С. 201-203. (2016).
4. Toulmin Stephen E. "The Philosophy of Science". London. 176 p. (1953).
5. Lakoff George and Johnson Mark "Metaphors We Live By". The University of Chicago Press, Chicago and London. Pp. 41-146. (1980).
6. Cimpean Andra M. "The Issue of Cognitivist Models of Metaphor Comprehension". In Studia Ubb. Philosophia, volume 59, special issue 1, pp. 39-50. (2014).
7. Alexeeva Dina A. Metaphors in Scientific Publications // Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM-2014: материалы симпозиума Saratov Fall Meeting 2014 "Оптика и биофотоника – II" / под ред. Г.В. Симоненко, В.В. Тучина. – Саратов: Изд-во "Новый ветер", 2014. – 182 с. – С. 170-172. (2014).
8. Сосновская А.А. Метафоризация в сфере «Новейшие техногенно опосредованные информационные и коммуникационные процессы»: автореф. дис. ...канд. филол. наук: 10.02.19 / А. А. Сосновская; Саратов. гос. ун-т. – Саратов, 2011. – 23 с. (2011).
9. Бучина Г.А. Роль метафоры в структурировании и функционировании лексики ограниченного употребления (на материале военной лексики в русском и английском языках): автореф. дис. ...канд. филол. наук: 10.02.19 / Г. А. Бучина; Саратов. гос. ун-т. – Саратов, 2003. – 18 с. (2003).
10. Балашова Л.В. Русская метафор: прошлое, настоящее, будущее. – Москва: Языки славянской культуры, 2014. – 496 с. (2014).

ON THE MEANING OF THE TERM

Svetlana V. Eremina, Alexander B. Pravdin
Saratov State University

The aim of the paper is to present a number of approaches to the problem of describing the meaning of the term as a phenomenon. The meaning of the term as a phenomenon is a subject of polemics of a number of scientists of different directions. The meaning of any lexical unit is a question just to put; that is why there is no definition of the phenomenon so far, there are only a number of approaches. The approaches made by the authorities of linguistics and those of logic are basically different and sometimes controversial. The authors of the paper did not aim at choosing the right approach to be used in theoretical research of the phenomenon, but presenting some methodological tools used and theoretical results of the analysis obtained by the researchers.

INTRODUCTION

Modern terminological theory accepts the occurrence of synonyms, expressions and variants of terms and rejects the narrowly prescriptive attitude of the past which related one concept to one term. Now it is recognized that one concept can have as many linguistic representations as there are different situations, which require different language forms. Thus, terminology adopts a corpus-based approach to lexical data collection. The increasing tendency to analyze terminology in the linguistic context leads to a number of new theoretical assumptions and new methodology of analysis.

The meaning of the term is formed by the whole system of terms of a certain specific subject area. If a term occurs in several areas, its meaning might have been influenced by several systems of terms, that is by other system relations. This accounts for different meanings of the same term as they occur in texts. It had always been accepted that a term form could belong to more than one field where it would be differently defined. What happens to the meaning of the term then? How it could be described? And again, what is the meaning of the term?

MATERIAL AND DATA

Objective reality comprises objects and phenomena which present a unity of the common and the individual. The common is presented in the individual expression, and individual is a representation of the common. The common is manifested by generic features of the object specifying possession of the object to one or other class of objects. The individual is specific features of the object which distinguish the object from the others belonging to one class of objects.

For proper understanding the nature of the term it is necessary to realize what features correspond to which categories.

The subject of any science is physical reality [1]. The system of terms of the science describes the phenomena of physical reality via the features. Separate phenomena of the reality will always contain both common and individual features of the reality or will belong to categories, both common and individual.

Any term names an individual phenomenon, and at the same time belongs to the whole class of similar phenomena revealing common features of those phenomena. For example, the term *luminescence (Phys.) – the emission of light by a substance for any reason other than a rise in its temperature* [2] implies the definite kind of *emission of light* distinguishing it from all kinds of emission along with testifying its belonging to the whole class of emission. The features of belonging to the class are called common or generic and those of distinguishing ones are called individual or specific.

The system of scientific concepts is isomorphic to the system of terms. Thus, terms can also be characterized via categories of common and individual. The term *luminescence* belongs to the terminological field of emission. The concept emission is common or generic. Whereas *of light by a substance for any reason other than a rise in its temperature* is a specific feature distinguishing this kind of emission from the others.

Formally, a term is a word, a lexical unit. Nevertheless, there is something distinguishing it from the word, despite the formal similarity of features. What essentially distinguishes a term as a phenomenon from a lexical unit is a logical component in its structure. This may be called a theoretical or conceptual load in a word which has a specific function, the function of naming a scientific concept. Presence of logical component indicates the links of term and concept. The early terms used by the Ancient philosophers had syncretic logico-linguistic sense. The term “Logos” meant “speech”, “idea”, “reasoning”, “simulation”, “sentence” [3]. Since the early scientists up to nowadays a term has been thought of as a dichotomy. On one hand term has been considered a sign, a material unit, a material form of an idea; on the other hand, it is a complex material-ideal formation which is characterized by a double entity (dichotomy) having “meaning” and “meant” components.

Links between term and concept are expressed by the definition. The definition also expresses historical links between a name and an object. In other words, the definition has a function of historical explanation of term. Two endpoints of the chain, name and object are mediated by the middle – idea, ideal representation of an object.

The nature of the term is a multilayered formation [4]. Its heterogeneous components are in indissoluble ties. Most adequately its nature is described by the following model: lexical substrate (term has the main features of the lexical unit), logical superstrate (links with the concept nominated by this term), and terminological specificity of the term presenting the features distinguishing term from lexical unit [5]. That is its specific function nominating the concept of a certain specific area. All three components are linked syncretically, so the meaning of the term would reflect those links.

Since the meaning of the term is characterized by syncretism the approach to analysis of the phenomenon should be syncretic either. Such an approach should consider both theoretical stress loading of the term and general linguistic characteristics of the term as a lexical unit.

Logically speaking, the opinion is that the meaning of the term has always been extensional or objective, that is pointing to the object or phenomenon or a class of objects or phenomena which the term names. There is also an intensional meaning which represents the contents of the term via its semantic characteristics. In other words, objective or extensional meaning attributes the term to the sphere of logic, and demands considering the phenomenon of the meaning of the term from the point of view of logic. For example, the term the objective or extensional meaning of the term 'laser skin interaction' points at the application of the laser as a means of physical exposure (impact) on the skin coverings, whereas the intensional meaning implies the total conceivable corpus of all possible kinds of interaction of laser radiation and the target tissue.

An important tendency in the logic-linguistic analysis of the term belongs to relating the meaning to the exact object. The fundamental idea of distinguishing two aspects of the meaning of the term – reference (denotatum) and sense (concept) belongs to Goetlob Froege [6]. He suggested to distinguish meaning as a way to denote an object and sense as pointing at the object meant. According to Froege each name (a term) is related to an object (denotate), expressed by this name sense (concept). The term “reference” has been luckily coined since a denotate can mean not only an object, but also a process, action, attribute, quality, phenomenon, etc. According to the theory, logic-linguistic background of the term can be represented as the following relation: term (as a material shell), referent (a phenomenon, etc.), concept (sense).

According to the authorities, referent and sense of the term could not be treated equally. Sense depends on its theoretical context and change with it. It can also change in time [7]. Whereas referent does not depend on the current theoretical changes of the context.

It is necessary to emphasize that to speak about the influence of the context on changing the meaning of the term is pertinent only to the sense of the last, the referent is permanent. Hence, priority of the referent against the sense in terminology is evident. For example, the referent of the term “*laser photoionization*” in the process of its historical development did not change and meant the following: «*Laser interaction with gaseous or condensed media such as biological liquid or tissue, single-photon, stepwise, or multiphoton ionization processes*» [8]. Whereas the sense of the term has changed in the process of development of science both qualitatively (invention of laser, development of ways of its application, development of photonics as a scientific area and so on), and quantitatively (forms of interaction of laser with various media).

This approach as a scientific theory is quite attractive since it explains change of the sense of the term caused by developing scientific concepts. However, application of this approach in practice is inconsistent due to absence of criteria of correspondence of referent and term [9].

While considering terminology of Biophotonics as a semiotic system and each term as a sign of this system the relational approach or relational model seems appropriate. According to this approach the meaning of the term is not a single entity but a relation, that is characteristics of semiotic relation between the other referents of the whole system of referents via terms. This relation or relations is the meaning of the term.

As has been mentioned earlier, there are many approaches to defining the phenomenon of the meaning of the term, some of them are somehow controversial. Thus, there exist contextually dependent and contextually independent. Though we know that one of the features of a term is contextual independence. Nevertheless, one assertion is shared by almost all authorities and it is the following: the meaning of the term is formed and changes under the influence of the whole system of terms of some scientific or professional area, which is isomorphic to the system of concepts of this area. The meaning of the term is determined by the ideas and theories of the area, the carcass of them is a conceptual apparatus. This assertion is true for it emphasizes links between terms and concepts which they name (words and ideas).

CONCLUSION

The most traditional and popular way taken by the majority of optimistic scientists led to a comparison the meaning of the term with the meaning of a lexical unit. But there is a principal difference between terms and lexical units, since the former is a nomination of a specific concept, whereas a lexical unit is a name of a “naive” concept, more often called “notion”. Those scientists who ignore lexical component in the approach in the analysis of the meaning of the term brought themselves to a simplified scheme as term – object. It was G. Froege who made a successful attempt to analyze the meaning of the term from the point

of view both linguistics (Lexis) and logic (Logos). The result was a three-component scheme – Term-Concept-Object.

References

1. Еремина С. В., Железовская Г. И. Упорядочение языка современной дидактики (Методологический аспект). – Саратов: изд-во «Лицей». 1998. – 122.
2. Minidictionary of Physics. Oxford University Press. Oxford. UK, 1996
3. Журавлев В. Ф. Философско-логические вопросы упорядочения терминологии// Проблемы разработки и упорядочения терминологии в Академиях наук союзных республик. – М.: Наука, - 1983. – С. 107 – 111
4. Суперанская А. В., Подольская Н. В., Васильева Н. В. Общая терминология. Вопросы теории. – М.: Наука, - 1989. – 246 с.
5. Leichik V. M. //Voprosy Yazykoznanija 1986, N 5, p. 87-89
6. G. Froege Sense and Denotate. (from German into Russian),1977
7. Eremina S. V., Pravdin A. B. Terminology Processing: Conceptual Approach. Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM-2013: материалы 17 –й Международной научной школы по оптике, лазерной физике и биофотонике/ под ред. Г. В. Симоненко, В. В. Тучина. – Саратов: Изд-во Саратов. Ун-та, 2013. -202 с.: ил.
8. Tuchin V. V. Handbook of Optical Biomedical Diagnostics / Valery V. Tuchin, editor. p. cm. – (SPIE Press monograph; v. PM 107) USA 2002
9. Sager Juan C. A practical course in terminology processing. John Benjamins Publishing Company, Amsterdam/Philadelphia, 1990, - 254p.

WRITING A SCIENCE PAPER: PROFITABLE AND EFFECTIVE

Anna Yu. Smirnova, Anna A. Sosnovskaya

Saratov State University

Main principles enabling to make an oral presentation or a poster presentation in English at the international scientific conference profitable and effective are represented in the given paper. The material is particularly useful for students, obtaining Master's Degree, postgraduates, and other scientists as it includes the key characteristics of Academic English, typical vocabulary relevant for scientific communication; some advice how to formulate objectives, tasks, subject and object and other essential parts of the research work, to present an article or a poster at the conference successfully and to prepare for possible questions and discussion.

INTRODUCTION

Fortunately nowadays practically any necessary and valuable information is accessible on the Internet, so there are no difficulties in exchanging the results of scientific work in professional areas. There are a lot of journals, databases with manuscripts, internet conferences, forums, and webinars where distinguished scholars, businessmen, students or people who are interested in the area can participate. But still scientific conferences, forums and seminars are held in leading universities and a lot of people from different cities and countries come to take part. These events have a long history and have become a peculiar tradition of such institutes.

But as the information can be shared so quickly at the international level, so a full-fledged member of the scientific community needs to be able to write and represent the results of their investigations for people all over the world. So an important tool which makes it possible is the English language which helps fulfill this opportunity.

Although writing a scientific paper is a very asked-for question for young scientists and there are a lot of tips which describe how to do it successfully, we want to consider this topic once again.

SSU EDUCATIONAL PROGRAMS FOR STUDENTS OBTAINING MASTER DEGREE AND POSTGRADUATES

Saratov State University has educational programs for students obtaining Master degree and postgraduate students, which include the English language studying. The particular program for students obtaining Master degree gives an opportunity to form students' ability to take part and to develop their skills in professional communication in English. According to the program the students have to be able to translate scientific articles, to make a glossary based on scientific papers, to learn to write abstracts [1].

The postgraduate program presupposes two terms of the English studying which primary goal is to prepare students to take part in scientific work using modern methods and technologies of communication [3]. Students should know general scientific terminology and grammar material sufficient for oral and written communication in the sphere of professional intercourse; rules of scientific works registration in English-language journals; stylistic peculiarities of oral and written scientific discourse; rules of scientific

information presenting in different spheres of communication. The program is focused on the Academic English, because it meets needs of learners to examine the information they can use for their scientific work from the international sources and publish their own results for a wide circle of readers. Moreover the target students have some practical lessons working in such systems as e-library and Web of Science where they search and analyze the material relevant to their investigations with English key words and abstracts.

The project 'My scientific research' is of great importance. The project includes a number of specific stages which are detailed in the program. Three forms of project implementation have been developed: an oral presentation, a poster session at a scientific conference, and creating a scientific article for a journal. It is assumed that students carry out most of the work independently, and the teacher organizes the cognitive activity of them, gives advice, being treated as an expert. Each form of implementation is presented in detail in the program: it requires a public presentation; the content requirements for the article; the main elements of the article; electronic resources detailing the rules for information searching, analyzing, and compiling; the principles of the poster's creating [2]. Thus, implementing this project, students are initially prepared for scientific work, providing them with comfortable training in postgraduate studies.

A final project of the course is creating their own article in English and its presentation at the annual conference 'Presenting Academic Achievements to the World'.

ISSUES MASTER AND POSTGRADUATE STUDENTS FACE STUDYING ENGLISH

There are some problems which teachers and learners usually face during the period of lessons and preparation of the article. Firstly, it is a gap in the process of studying the foreign language on different stages of education. So coming to the University after school all students have some course of General English and English for Specific Purposes (professionally oriented English) for a year, for a year and a half, or for two years, depending on the faculty and educational program realized there. Then most of them normally have a two-year-break. Two years without practice have destructive consequences for their skills which decline dramatically. Only a small part of learners continue to study the language occasionally themselves or at some courses, for instance, getting an additional qualification 'Translator in the sphere of professional communication'.

So we cannot neglect the different background students have when they resume English lessons at the first year of their Master Degree. Furthermore at the stage when students should give final products – a scientific poster, a report for an oral presentation or a scientific article – an individual approach should be taken to them. Some students have a ready-made material they would like to publish in English. Other students with more advanced level, those ones who have inherited sound knowledge from previous experience, can create an article in English. More or less it influences the degree of independence and autonomy a student demonstrates doing this type of tasks.

We should summarize two sides: firstly, has a clear idea about the rules of article making, secondly, working on the language side. Definitely, the work on the article is a close cooperation of a student, an academic adviser who has deep knowledge at the branch of investigation, and a language adviser who can supervise linguistic peculiarities.

HOW TO WRITE A SCIENCE PAPER: PROFITABLE AND EFFECTIVE

Students should take into account that in western scientific tradition an article is more formalized than in Russian and usually divided into sections which are defined in the text.

Usually they have their own proportion in the whole body of an article:

Title: Short and informative

Abstract+key words: 1 paragraph (<250 words)

Introduction: 10%

Methods: 20 %

Results: 30-40%

Discussion: 20-30%

Conclusion: 10 %

Reference

But in the process of composing an article it is more convenient to change the order an author writes these parts. It is better to start with Methods describing the ways a problem was studied. There is a list of standard and reliable methods all scientists are familiar with, such as surveys, experiments, laboratory, analytical, statistical methods, etc. In this part usually a summary is enough, and the references are used to

show the succession in studying the problem. Only if a method is new and unique, an author should concentrate on this part. On the whole the applied methods should be enumerated in the logical order they were used in research.

For [STEM disciplines](#) figures and tables are also desirable for presenting the data. Thus an author of the article can include tables with experimental results or figures comparing actual outcome with theoretical values.

The results' section should be representative and relevant for discussion section which is crucial for the whole work. Here an author interprets the results, in a way they confirm a hypothesis, and shows how the objectives of the work have been achieved.

A [conclusion](#) must be clear and brief but informative, plus the possibilities of further investigation and future experiments should be mentioned.

Introduction, which comes first in the article, should be written last, when an author can observe a clear picture of the ready work. It includes the following aspects: the problem which is going to be solved, description of present state of knowledge and analysis of advantages and disadvantages of existing solutions, definition of hypothesis, object, subject, purpose and objectives.

It is really preferable to compose an abstract and select a key word for indexation after finishing an article because an author can see a product in general. Also it is useful to think about expected readers of the article and try to draw their attention. The same important function the title of the article conveys. Reading a title and an abstract, a potential reader decides weather or not to continue reading.

A list of References consists of other papers and manuscripts which are quoted or mentioned in the article as they consider the same problem and topic.

CONCLUSIONS

The skills of writing a science paper in the English language allow students obtaining Master degree and postgraduates to work successfully in the chosen field of activity, broaden their horizons, improve professional skills which will help to increase their competitiveness in the labor market.

References

1. Образовательные программы. Аспирантура, <<http://www.sgu.ru/education/courses?aot-f=4018>> (20 September 2017).
2. Smirnova Anna Yu., Sosnovskaya Anna A. POSTER SESSION AT THE INTERNATIONAL CONFERENCE: EXPERIENCE OF ORGANIZING AND HOLDING// Проблемы оптической физики и биофотоники. SFM-2016: материалы Международного симпозиума и Международной молодежной научной школы Saratov Fall Meeting 2016 / под ред. Г. В. Симоненко, В. В. Тучина. – Саратов : Изд - во «Новый ветер», 2016. – 207 с. – С. 203-205, <http://optics.sgu.ru/_media/library/pop/sfm2016.pdf> (19 September 2017).
3. Образовательные программы. Механико-математический факультет, Прикладная информатика 09.04.03 (Магистратура) <<http://www.sgu.ru/education/courses/09-04-03-prikladnaya-informatika>> (22 September 2017).

TERMINOLOGY IN COMPUTER SCIENCE

Arina O. Shelyugina

Saratov State University

English became language of the modern communicative environment. Important feature of development of modern society is its informatization. The computer and the worldwide information network are a powerful factor of modern life, the instrument of dissemination of knowledge, the means of communication, managements, training. The computer and the Internet became the causes of anglicisms in Russian, they change the dictionary of Russian with amazing speed.

INTRODUCTION

In modern conditions streamlining of special lexicon and its adequate representation in dictionaries of various types gains huge value for successful development of science and effective understanding of experts. The last decades of the 20th century and the beginning of the 21st century can be characterized as the time of constantly accelerating scientific progress. Continuous development of human knowledge sets a task to provide all aspects of life and activity of the person with new terms.

It should be noted that the problem of the terms and professionalisms making computer terminology is linked with a problem of computer language, sublanguage or slang and a problem of professionalism. Borders between classes of terms and professionalism and professional jargons are not always accurate. So, for example, speaking about modern computer slang, we deal with some synthesis of four groups:

professionalism, vulgarisms, jargons, slang. The majority of the words relating to computer slang are derivative of professional terms. [1]

REASONS OF FORMATION OF A COMPUTER SLANG

Unlike fully assimilated borrowing foreign words retain traces of the foreign origin of the sound, spelling, grammatical and semantic features. Foreign words relate mainly to special branches of knowledge or production.

The word "Internet" came to the Russian at the same time with the word "network"; translated into English it means "интерсеть", or "объединенная сеть". The first part of the word - an inter - has been russified and does not require interpretation being international. The second part - NET - net - in English has several meaning - сеть, сетка, узел, паутина, западня.. The emergence of new realities in our lives, thanks to new victories computer conquests, and brings them new designations in the language, such as byte - a unit of measurement information capacity, spam - annoying ads, file - is a place in the computer's memory. The complexity of the translation of computer terms is that many computer terms are non-equivalent, that is, do not have regular matches in the Russian language (except descriptive entries in the dictionary). But that does not mean the fundamental impossibility of the translation.

Methodology

Many of the existing professional terms are rather bulky and inconvenient in daily use. There is a powerful tendency to reduction, simplification of words. For example, one of the most often used terms - 'motherboard' has an equivalent in Russian as "материнская плата". In a slang it corresponds to words "материнка", or "мать". Or another example: "CD ROM Drive" is translated into Russian as "накопитель на лазерных дисках", in a slang it has equivalents "сидюк", "сидюшник". [2]

The following sentence contains the words illustrating a tendency to reduction: "Компы бывают двух видов - бимы и маки" ("Персональные компьютеры бывают двух видов - IBM-совместимые и Macintosh). There are two types of Personal computers - IBM compatible and Macintosh). [2]

It is also necessary to note the fact that most of nonprofessional users don't have the sufficient level of English. But, anyway, they all should use new English terminology, and often, there is the wrong reading of the English word, and the words arising, thus, sometimes strongly settle in their lexicons. So, for example, from the wrong reading of the message of NO CARRIER in a slang expression has appeared: НО КАРЬЕР and, both expressions mean lack of connection at communication on the modem. [2]

1 Ways of the formation of a computer slang are very various, but all of them come down to adapting the English word for the Russian reality and to make them suitable for constant use.

These are the main methods of formation of a slang which, in my opinion, cover the majority of nowadays existing slang lexicon:

- 1) Calques
- 2) Semi - calques
- 3) Translation
 - a) use of standard lexicon in special meaning
 - b) use of a slang of other professional groups
- 4) Phonetic mimicry [3]

I. CALQUES

This way of formation includes the borrowings. At the same time the word is borrowed entirely with the pronunciation, writing and meaning. Each sound in the borrowed word is replaced with the corresponding sound in Russian according to phonetic laws. These words seem foreign in pronunciation and writing, they meet all standards of English. Here are examples of the words which are completely borrowed from English:

Device - девайс, hard drive - хард

In this group the Russian or just wrong reading of the English word takes place. Sometimes the mistake becomes attractive: message- мессага.

Very often transfer of a word in Russian meets the wrong accent just: label - лабэль

Therefore some slang loans are unstable in writing. For example, it is possible to meet several different loans of a word: keyboard- кэйборд - кэборд - кúборд.

It is remarkable that stylistically neutral words in English, having passed into a slang of the Russian programmers, get ironical and scornful or just colloquial coloring.

II. SEMI - CALQUES

Upon transition of the term from English into Russian, the last tries to find the accepted word under norms not only the phonetics as in the previous group, but also a spelling with grammar. At grammatical development the English term goes into the disposal of the Russian grammar, submitting to its rules. Nouns, for example, get endings: “application” (прикладная программа) “апликуха”

The words of this group are formed as follows. To an initial English basis by certain methods word-formation models of Russian increase. First of all, diminutive-hypocoristic suffixes of nouns concern them: “disk drive” - “дискетник”, “user's manual” – “мануалка”.

As English is analytical, and borrowing synthetic, addition of inflections to verbs takes place:

To connect - коннектиться (соединяться при помощи компьютеров),

To programm - програмить (заниматься программированием),

To click - кликать (нажимать на клавиши мыши).

III. Translation

Not always the words borrowed from English get to the Russian computer slang. Very often slang lexicon is formed by the way of the translation of the English professional term. In the classification I distinguish two possible ways of the translation. The first way includes the translation of a word with use of the neutral words existing in Russian which at the same time gain new value with the reduced stylistic coloring:

virus- живность

user's manual - букварь

IV. Phonetic mimicry

This method, in my opinion, is the most interesting from the point of view of a lexicology. As a sources of a slang also there can be professional terms of the English origin which are transferred often with the Russian pronunciation:

хард-драйв, хард-диск, хард (harddrive – жёсткий диск); коннект (connecting – соединение, подключение; как связь) коннектиться (to connect – соединять, связывать, подключать); джоин (join – присоединение, подключение; как акт установления связи) джоиниться (to join – присоединяться, примыкать); [4]

Conclusion

As we see, the computer slang in most cases represents the English loans or phonetic association, cases of the translation meet less often and that thanks to rough imagination of programmers.

English has become the language of the modern communicative environment. The Important feature of the development of modern society is its informatization. The computer and the worldwide information network are a powerful factor of modern life, the instrument of language dissemination, the means of communication, managements, training. The computer and the Internet have become the causes of anglicisms in Russian, they have changed the dictionary of Russian with amazing speed.

Reference

1. Brian Lockett «Beyond the dictionary»
2. Брейтер М.А. Англицизмы в русском языке: история и перспективы: Пособие для иностранных студентов-русистов. Владивосток: изд-во «Диалог»,1995
3. Macmillan «English dictionary»
4. Bell R. Translation and Translating: Theory and Practice. – London and New York: Longman, 1991
5. И в а н о в А. О. Английская безэквивалентная лексика и ее перевод на русский язык. Л.: Изд-во Ленингр. Ун-та, 1985.

GUIDELINES FOR PREPARING ESL STUDENTS FOR ORAL PRESENTATIONS: THE LINGUISTIC ASPECT

Darya N. Tselovalnikova

Saratov State University

Young scientists delivering oral reports at English-speaking conferences allow a number of errors typical for those who study English as a second language. We consider the most typical errors in pronunciation, word stress and intonation which impede the perception of reports, and give recommendations on how to avoid them. The material is particularly useful for students who started studying English quite recently as well as for those who lack regular speaking practice.

INTRODUCTION

There are a number of presentations at our conferences where speakers have excellent content and presentation skills while speaking their native Russian, but their English skills confuse the audience and distract it from the content. Different conferences for ESL students seem to have similar speaking problems. At some conferences some speakers talk to the slides instead of the audience, have too much information on slides, and are guilty of several speaking faults. Therefore, each English conference for non-native speakers seems to have similar problems.

Takeaways from these experiences and recommendations from contemporary English teachers, language schools and bloggers allow us to give ESL learners guidelines to improve their speaking skills and encourage better preparation while presenting in second language.

There are three main points that should be taken into consideration: pronunciation, word stress and intonation.

PRONUNCIATION

Accurate pronunciation is an important part of learning any language. The way the speech sounds can have a huge impact on whether or not people understand what the speaker is saying. The problem about pronunciation is that it is not just a question of acquiring knowledge, it is a physical skill that learners need to practice regularly.

To find out what are the most common mistakes ESL learners worldwide make we've looked through different resources in the English-speaking part of the internet, paying attention to the most recent and practical. Those are quite multiple although among the most interesting and useful are articles by Claudia Pesce [1], [2], Jakub Marian [3], Nicola Monro [4]. All these authors mention a wide range of mistakes, from which we picked out those that are common for our university conferences. They are the following: pronouncing the "th" and the /θ/; pronouncing the Schwa: a sound that is typical in unstressed syllables; pronouncing the Short "i"; confusing the "w" and the "v"; pronouncing the magic "e" in words like *not* and *note* or *bit* and *bite*; pronouncing silent consonants: like the "d" in *Wednesday* or the "g" in *foreign*, voicing.

As for voicing, many English words end in both voiced and voiceless consonants (sounds made by vibrating the vocal cords or sounds with no vibration) such as *serve* /sɜ:v/ and *surf* /sɜ:f/. Russian speakers of English tend to devoice end consonants which can cause confusion between the following words: voiced end consonants: *serve* /sɜ:v/, *pens* /penz/, *bag* /bæg/, *cod* /cɒd/, *road* /rəʊd/; voiceless end consonants: *surf* /sɜ:f/, *pence* /pens/, *back* /bæk/, *cot* /cɒt/, *wrote* /rəʊt/.

Claudia Pesce supposes that there are no shortcuts to perfect pronunciation; however there are some ways learners can practice more effectively and improve their skills faster. There are plenty of tips and pieces of advice on how to improve English pronunciation at various resources but the most practical and effective are the following [5]:

1. Copy the experts. There's no replacement for learning pronunciation from the experts – native-speakers. Learners should listen to English radio programs and watch television and films in English. It is essential to imitate what learners are hearing – even if they are not sure what they're saying yet.
2. Slow down. Many English learners think that speaking fluently means they need to speak fast. This is wrong. Speaking too fast reinforces bad habits and makes the speaker sound nervous and indecisive. Speaking slowly will give learners time to breathe properly and think about what they want to say next. It gives them time to think while they are speaking, therefore they feel more relaxed and are able to concentrate on making their English sound proper.
3. Picture it. Learners should close their eyes and think about how to make a sound before saying it. Visualize the positioning of mouth and face. If learners have studied with the phonemic chart, they should think about the sound they are making and how it relates to other English phonemes. If learners have used diagrams of the mouth and tongue, they should think about the shape they need to make inside their mouths.
4. Listen to yourself. It's often difficult to hear pronunciation errors in learners' own speech because they are concentrating actually on communicating rather than the sound they are making. If you can't hear your pronunciation problems, it's tough to correct them. Learners should try recording their speech with their smartphones or PCs and making a note of specific areas they need to improve on.

5. Watch yourself. Learners should stand in front of a mirror to see the placement of the tongue, lips, and shape of the mouth when they make certain sounds. Then it is useful to compare what they see with a video of a native-speaker saying the same thing.

6. Find a language friend. Getting feedback from an outside observer is crucial. Learners should find friends who are also interested in improving their English. Then they should try exchanging recorded messages so that they could listen closely to each other's pronunciation.

7. Sing a song, listen to audio books and follow the text. It is very useful to learn the words to popular English songs and sing along. Singing helps learners relax and just get those words out, as well as helping their rhythm and intonation. Because learners don't need to concentrate on constructing sentences for themselves, they can concentrate on making their pronunciation sound fine.

Definitely, learners should give each of these tips a try and find out which of those works best for them. Learners should remember that none of them is an instant fix but they will all help reach their goals as part of regular practice.

WORD STRESS

ESL learners may say something that is perfectly correct, grammatically speaking, but if they put the stress on the wrong word it may lead to confusion or misunderstanding. Consider the difference between, "He didn't pay for one **lesson**" vs. "He didn't pay for **one** lesson".

Most of the time, students who have trouble using the right stress and intonation speak native languages with very different rules. English is a stressed language, and this means that more attention should be paid to where you put the stress in a word or sentence, rather than the number of syllables. There are two very common stress and intonation mistakes: stress on the wrong syllable and stress on the wrong word.

Kenneth Beare [6] shows how the words you stress can change the underlying meaning of a sentence. Let's take a look at the following phrase: *I don't think he should get the job*. Shifting the stress from the first word to the last one in the phrase the author acquires nine different meaning of the same phrase. This simple sentence can have many levels of meaning based on the word learners stress. They should read each sentence aloud and give a strong stress to the word in bold.

The following tips offered by some authors [2], [7], [8], [9], [10] could be done in improving learners' stress:

1. Pay attention to the matter of stress. English is a stressed language and that word and/or sentence stress is important to convey the right meaning. Advise the learners to use clapping or tapping to indicate where the stress goes.

2. Encourage ESL learners to over basic rules of word stress. When the same word can be both a noun and a verb (*rebel, insult, suspect*), they should remember that the first syllable is stressed in the noun and the second syllable is stressed in the verb.

3. Make them indicate stress visually. Learners can mark the stress the way dictionaries do (/houˈtɛl/ for *hotel*) or use bigger or smaller circles.

4. Use the contrast. If it's hard to hear the right word stress, learners should say it different ways – put the stress in different syllables so you can hear the difference and hear the right stress.

INTONATION

Intonation mistakes usually made by ESL learners include such faults as no rising pitch and using the wrong pitch. The first intonation mistake is encountered most often. Yes/No questions typically have a rising pitch towards the end, and a lot of learners end their sentences flat so they don't sound like questions at all. They sound like statements. ESL learners often have more trouble imitating the rising than the falling intonation. As for the second mistake, learners often don't use the right pitch to convey feelings. A single word like really can express completely different feelings: "Really" said with a falling intonation expresses disbelief, while "Really?" with a rising pitch expresses surprise.

What can be done? Claudia Pesce [2] gives several tips, from which most useful seem to be the following items: exaggerate, even though it may not sound "natural", it's the best way to get the point across and you'll have a better chance of hearing the differences. Make the rising pitch as high as you can, and the flat intonation sound monotone; make sure your face also shows the right feeling; go over patterns and try to mind the pitch; remember that questions beginning with wh-words have a falling intonation, statements have a falling intonation; question tags may have either depending on the intention of the speaker (questions tags that are comments or observations have a falling intonation while questions tags used to check information

or express uncertainty have a rising intonation); use rising intonation to express surprise, use falling intonation to express sarcasm or disbelief. Another advice is quite simple though rather useful: to correct improper intonation, you need to remember to start high and end low.

CONCLUSIONS

We should remember that even native speakers make speech mistakes from time to time. ESL learners giving oral presentations at international conferences should avoid at least the most common errors, which include pronunciation, word stress and intonation faults. In this article we considered these three points and offered a solution on how to improve learners' oral skills. Modern means of communication offer a great number of possibilities, therefore we encourage ESL learners follow our guidelines, find out which recommendations and resources which work best for them and remember that mastering oral skills is just a matter of regular practice.

References

1. Pesce Claudia 7 Worst Pronunciation Mistakes ESL Students Make Around the World, <<http://busyteacher.org>>.
2. Pesce Claudia Do Your ESL Students Make These Stress and Intonation Mistakes? <<http://busyteacher.org>>.
3. Marian Jakub Common pronunciation errors in English, <<https://jakubmarian.com>>.
4. Monro Nicola ESL Pronunciation Mistakes, <<http://www.talk.edu/learn-english/grammar/accent-pronunciation>>.
5. 10 tips for perfect English pronunciation, <<https://englishlive.ef.com>>.
6. Beare Kenneth Pronunciation: Changing Meaning through Word Stress, <<https://www.thoughtco.com>>.
7. Pesce Claudia 7 Excellent Exercises to Improve ESL Intonation and Stress, <<http://busyteacher.org>>.
8. Mutoono Elena 3 Stress and Intonation Mistakes that Non-Natives Make <<https://www.elenamutoono.com>>.
9. Marian Jakub English words that change their meaning depending on stress position, <<https://jakubmarian.com>>.
10. Change the stress, change the meaning: 35 words that change meaning, <<https://www.engvid.com>>.