МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ



## НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ санкт-петербургского государственного

ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Физико-математические науки

## 1(189) 2014

Издательство Политехнического университета Санкт-Петербург 2014

#### НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

#### РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА

Алферов Ж.И., академик РАН – председатель; Боровков А.И., проректор по перспективным проектам; Варшалович Д.А., академик РАН; Глухих В.А., академик РАН; Жуков А.Е., чл.-кор. РАН – зам. председателя; Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор; Индейцев Д.А., чл.-кор. РАН; Рудской А.И., чл.-кор. РАН – зам. председателя; Рутберг Ф.Г., академик РАН; Сурис Р.А., академик РАН.

#### РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

Иванов В.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия – главный редактор; Фотиади А.Э., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия – зам. главного редактора; Капралова В.М., канд. физ.-мат. наук, доцент, СПбГПУ, СПб., Россия – ответственный секретарь; Антонов В.И., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия; Блинов А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия; Кожевников Н.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия; Козловский В.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия; Козловский В.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия; Состряков В.М., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия; Самойлов В.О., чл.-кор. РАМН, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия; Соловьёв А.В., д-р физ.-мат. наук, профессор, Франкфуртский ун-т им. И.В. Гёте, Франкфурт-на-Майне, Германия; Таганцев А.К., д-р физ.-мат. наук, профессор, Швейцарский федеральный институт технологий, Лозанна, Швейцария; Топтыгин И.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия; Топтыгин И.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия; Топтыгин И.Н., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия; Тропп Э.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия;

Фирсов Д.А., д-р физ.-мат. наук, профессор, СПбГПУ, СПб., Россия.

Журнал с 1995 года издается под научно-методическим руководством Российской академии наук.

Журнал с 2002 г. входит в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук.

Сведения о публикациях представлены в Реферативном журнале ВИНИТИ РАН, в международной справочной системе «Ulrich's Periodical Directory».

С 2008 года выпускается в составе сериального периодического издания «Научно-технические ведомости СП6ГПУ» ISSN 1994-2354.

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор). Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.

Распространяется по Каталогу стран СНГ, Объединенному каталогу «Пресса России» и по Интернет-каталогу «Пресса по подписке». Подписной индекс **71823**. Журнал включен в базу данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ), размещенную на платформе Научной электронной библиотеки на сайте http://www.elibrary.ru

При перепечатке материалов ссылка на журнал обязательна.

Точка зрения редакции может не совпадать с мнением авторов статей.

Адрес редакции и издательства: Россия, 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29. Тел. редакции (812) 294-22-85.

© Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, 2014



# ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL

## Physics and Mathematics

## 1(189) 2014

Polytechnical University Publishing House Saint Petersburg 2014

#### ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS

#### JOURNAL EDITORIAL COUNCIL

*Zh.I. Alferov* – full member of RAS, head of the editorial council; *A.I. Borovkov* – vice-rector for perspective projects; *D.A. Varshalovich* – full member of RAS; *V.A. Glukhikh* – full member of RAS; *A.Ye. Zhukov* – corresponding member of RAS, deputy head of the editorial council; *V.K. Ivanov* – Dr.Sc.(phys.-math.), prof.; *D.A. Indeitsev* – corresponding member of RAS; *A.I. Rudskoy* – corresponding member of RAS, deputy head of the editorial council; *Ph.G. Rutberg* – full member of RAS; *R.A. Suris* – full member of RAS.

#### JOURNAL EDITORIAL BOARD

V.K. Ivanov - Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia - editor-in-chief;

A.E. Fotiadi - Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia - deputy editor-in-chief;

*V.M. Kapralova* – Candidate of Phys.-Math. Sc., associate prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia – executive secretary;

V.I. Antonov - Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;

A.V. Blinov - Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;

D.A. Firsov - Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;

N.M. Kozhevnikov - Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;

V.V. Kozlovsky - Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;

V.M. Ostryakov - Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;

V.O. Samoilov - corresponding member of RAMS, prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;

A.V. Solovyev – Dr. Sc. (phys.-math.), prof., Johann Wolfgang Goethe University Frankfurt am Main, Germany;

A.K. Tagantsev - Dr. Sc. (phys.-math.), prof., Swiss Federal Institute of Technology, Lausanne, Switzerland;

I.N. Toptygin - Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia;

E.A. Tropp - Dr. Sc. (phys.-math.), prof., SPbSPU, St. Petersburg, Russia

The journal is published under the scientific and methodical guidance of RAS since 1995.

The journal is included in the List of leading peerreviewed scientific journals and other editions to publish major findings of theses for the research degrees of Doctor of Sciences and Candidate of Sciences.

The publications are presented in the VINITI RAS Abstract Journal and Ulrich's Periodical Directory International Database.

The journal is published since 2008 as part of the periodical edition 'Nauchno-tekhnicheskie vedomosti SPb-GPU' (ISSN 1994-2354).

The journal is registered with the Federal Service for Supervision in the Sphere of Telecom, Information Technologies and Mass Communications (ROSKOMNADZOR). Certificate  $\Pi M \mathbb{N} \Phi C77$ -52144 issued December 11, 2012.

The journal is distributed through the CIS countries catalogue, the «Press of Russia» joint catalogue and the «Press by subscription» Internet catalogue. The subscription index is **71823**.

The journal is in the Russian Science Citation Index (RSCI) database.

© Scientific Electronic Library (http://www.elibrary.ru).

No part of this publication may be reproduced without clear reference to the source.

The views of the authors may not represent the views of the Editorial Board.

Address: 195251 Politekhnicheskaya St. 29, St. Petersburg, Russia.

Phone: (812) 294-22-85.

© St. Petersburg State Polytechnical University, 2014

### Содержание

#### Физика конденсированного состояния

Горобей Н.Н., Лукьяненко А.С. О балансе энергии в термоупругом эффекте	9
Математическое моделирование физических процессов	
Хрущенко А.А., Арефьев К.М. Расчет кислородного массообмена в легких человека	16
Атомная физика, физика кластеров и наноструктур	
<b>Лебедева О.С., Лебедев Н.Г.</b> Влияние деформаций растяжения и сжатия на пьезорезистивность углеродных нанотрубок и графеновых нанолент	26
Математическая физика	
Канунникова Е.А. Аналитико-численный метод решения трехмерных внешних краевых задач для эллиптических уравнений	35
Приборы и техника физического эксперимента	
Пахотин В.А., Закревский В.А., Харалдин И.А. Некоторые особенности измерения тока электрического пробоя диэлектриков	39
Головков О.Л., Купцова Г.А., Степанов В.А. Влияние степени однородного уширения контура усиления на спектр генерации YAG:Nd-лазера	48
Головков О.Л., Купцова Г.А., Степанов В.А. Учет скорости релаксационных переходов между подуровнями мультиплета в спектре генерации YAG:Nd-лазера	55
<b>Петров В.М., Хоменко А.В., Криницкий Я.А., Гарсиа А.М.</b> Детектирование давления света посредством двухволнового смешения в фоторефрактивном кристалле BaTiO <sub>3</sub> :Со (статья на английском языке).	61

#### Физическая электроника

Андронов А.Н. Вторичная электронная эмиссия при очень низких энергиях электронов (стат	ЬЯ
на английском языке)	67

#### Биофизика и медицинская физика

Попугаева Е.А., Власова О.Л., Безпрозванный И.Б. Роль внутриклеточного кальция в развитии патогенеза болезни Альцгеймера	79
Власова О.Л., Плотникова П.В., Безрукова А.Г. Алгоритм реализации экспериментально- параметрических оптических методов анализа состояний биодисперсий	91
Сабанцев А.В., Федечкин С.О., Ходорковский М.А., Побегалов Г.Е., Ведяйкин А.Д., Смирнов С.Л. Характеризация кальций-связывающих свойств домена 6 виллина	101

#### Ядерная физика

Иванищев Д.А., Иванов А.Е., Котов Д.О. Рождение К* и ω-мезонов в столкновениях ядер дейтерия	
и золота при энергии 200 ГэВ	108

#### Математика

Петриченко М.Р., Серов Д.В. Полное и неполное аддитивные удвоения переменных в линейных	
системах с постоянными коэффициентами	118
Кондрашков А.В., Пичугин Ю.А. Идентификация и статистическая проверка устойчивости	
модели Вольтерры	124

#### Радиофизика

<b>Рыкшин</b> электрома	<b>А.Ю.,</b> гнитног	<b>Зацепин</b> го импульса	<b>П.М.,</b> на двуха	<b>Уланов</b> слойной ст	<b>п.н.</b> пруктур	Моделирован репри помощи	ние р вейвл	рассеяния em-преобр	короткого разования	136
<b>Голубев А.</b> комплексе,	Г <b>., Смирн</b> содержа	н <b>ов А.С.</b> Расч щем антен	чет допу ну с воле	стимого ур оконно-опп	овня шу пически	мов приемного ми гидрофона	тракт ми	пав гидроа	акустическом	144
<b>Голубев А</b> канала свя	<b>.Г., Мол</b> ч зи с тра	<b>чанов П.А</b> . нсформацие	Алгориг гй рабоч	пмы оцени его диапаз	вания и юна час	мпульсной хар тот	актер	ристики м	ноголучевого	150

#### Конференции

Васильева М.А., Гаврикова Т.А., Зыков В.А., Ильин В.И., Шалыгин В.А. Актуальные направления	
физики полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектроники (по	
материалам 15-й Всероссийской молодежной конференции)	157

#### Хроника

<b>Морачевский А.Г., Фирсова Е.Г.</b> Профессор Владимир Ефимович Грум-Гржимайло (к 150-летию со дня пождения)	164
	104
Авторский указатель	169

### Contents

#### **Condensed Matter Physics**

Gorobey N.N., Lukyanenko A.S. On the energy balance in the thermoelastic effect	9
Simulation of Physical Processes	
Hrushchenko A.A., Aref'ev K.M. The calculation of oxygen mass exchange in human lungs	16
Atom Physics and Physics of Clusters and Nanostructures	
<b>Lebedeva O.S., Lebedev N.G.</b> The influence of the stretching and compression deformations on the piezoresistance of the carbon nanotubes and graphene nanoribbons	26
Mathematical Physics	
<b>Kanunnikova E.A.</b> Analytic-numerical method to solve 3D exterior boundary problems for elliptic equations.	35
Experimental Technique and Devices	
Pakhotin V.A., Zakrevskii V.A., Kharaldin I.A. Some features of measurement of breakdown current through dielectrics	39
<b>Golovkov O.L., Kuptsova G.A., Stepanov V.A.</b> Influence of the extent of uniform broadening of an amplification line on the generation spectrum of YAG : Nd laser	48
<b>Golovkov O.L., Kuptsova G.A., Stepanov V.A.</b> The rate consideration of relaxation transitions between sublevels of a multiplet in the generation spectrum of YAG:Nd-laser	55
<b>Petrov V.M., Khomenko A.V., Krinitsky Y.A., Garcia A.M.</b> Light pressure detection by two-wave mixing in the photorefractive BaTiO <sub>3</sub> :Co crystal	61

#### **Physical Electronics**

Andronov A.N. Secondary electron emission at very low electron energy	67
---	----

#### **Biophysics and Medical Physics**

<b>Popugaeva E.A., Vlasova O.L., Bezprozvanny I.B.</b> The role of intracellular calcium in the development of Alzheimer disease pathogenesis	79
<b>Vlasova O.L., Plotnikova P.V., Bezrukova A.G.</b> Algorithm of realization of the experimental optical parametric methods for biological disperse systems analysis	91
Sabantsev A.V., Fedechkin S.O., Khodorkovskii M.A., Pobegalov G.E., Vedyaykin A.D.,	101

St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics No. 1(189) 2014

#### **Nuclear Physics**

Ivanishchev D.A., Ivanov A.E., Kotov D.O. $K^*$ and $\omega$ -mesons production in $d$ + Au collisions	
at 200 GeV	108

#### Mathematics

<b>Petrichenko M.R., Serov D.V.</b> Complete and incomplete additive doubling variables in linear systems with constant coefficients	118
<b>Kondrashkov A.V., Pichugin Yu.A.</b> On the identification and statistical testing stability of the Volterra model	124

#### Radiophysics

<b>Rykshin A.Yu., Zatsepin P.M., Ulanov P.N.</b> The modeling of a short electromagnetic pulse scattering by dual layers structure using wavelet transform	136
<b>Golubev A.G., Smirnov A.S.</b> The calculation of a tolerable noise level for the receiving section in the underwater acoustic unit containing an antenna with fibre-optic hydrophones	144
<b>Golubev A.G., Molchanov P.A.</b> <i>Estimation algorithms for impulse response of multibeam communication channel with transformation of the working frequency band</i>	150

#### Conferences

Vasil'eva M.A., Gavricova T.A., Zykov V.A., Ilyin V.I. Shalygin V.A. Actual directions of semiconduc-				
tor physics and nanostructures, semiconductor nano- and optoelectronics (on the 15th All-Russian Youth				
Conference)	157			

#### Chronicle

<b>Morachevskiy A.G., Firsova E.G.</b> Professor Vladimi of his 150th birthday)	r Efimovich Grum-Grzhimailo (on the occasion	164
Author indax		160

### ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 538.9(075)

#### Н.Н. Горобей, А.С. Лукьяненко

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

#### О БАЛАНСЕ ЭНЕРГИИ В ТЕРМОУПРУГОМ ЭФФЕКТЕ

Энергетический баланс в термоупругом эффекте анализируется в рамках модели механически деформируемого ансамбля ангармонических осцилляторов. Тем самым разделяются макроскопический аспект действия нагрузки — механическая деформация образца в целом с соответствующим вкладом в баланс энергии (механическая работа) и изменение колебательной энергии осцилляторов на микроскопическом уровне при данной деформации образца. В термоупругом эффекте между этими двумя составляющими происходит перераспределение внутренней энергии образца. Рассматривается также предельный случай низких температур, когда колебательная энергия сводится к энергии нулевых колебаний.

ЭНЕРГИЯ, ТЕРМОУПРУГИЙ ЭФФЕКТ, БАЛАНС ЭНЕРГИИ, ДЕФОРМАЦИЯ, АНГАРМО-НИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР.

#### Введение

В работах [1-3] обсуждается термоупругий эффект – понижение температуры образца при его адиабатическом механическом растяжении (наоборот, увеличение температуры при сжатии). Энергетика этого процесса, особенно при растяжении, не очевидна. Совершая положительную механическую работу при растяжении образца, мы понижаем колебательную энергию атомов (которая пропорциональна абсолютной температуре). При этом уменьшение внутренней энергии образца, связанное с охлаждением. по величине оказывается почти на порядок больше работы внешней силы. Этот эффект более ярко выражен при высоких температурах, однако будучи универсальным явлением, он проявляется и при низких температурах. В указанной температурной области речь идет скорее о термодинамическом проявлении ангармонического эффекта влияния механической нагрузки на частоту колебаний атомов. Будучи квантованной, энергия этих колебаний, а значит и колебательная часть внутренней энергии образца, меняются под действием нагрузки так же, как и в классическом термоупругом эффекте. Энергетика этого процесса для одного нагружаемого квантового ангармонического осциллятора в широкой области температур обсуждается в работе [4]. Сделан вывод, что, как и в классическом случае [1–3], изменение колебательной энергии под действием нагрузки является следствием ангармонизма межатомных связей.

В упомянутых выше работах этот эффект объясняется ангармонизмом межатомного взаимодействия, который является причиной перераспределения между различными составляющими энергии атомов, а внешняя сила играет роль «спускового крючка» в механизме перераспределения. В качестве простой модельной системы рассматривается ангармонический осциллятор во внешнем силовом поле. Однако это объяснение оставляет некоторую неясность в проблеме энергетического баланса, если оставаться в рамках простой одноосцилляторной модели. Причина в том, что самой этой модели придается двойное значение в трактовке эксперимента с механическим нагружением. С одной стороны, силовое

поле рассматривается как внешняя сила, действующая на образец (фактически к образцу подвешена гиря). Это - макроскопический аспект действия нагрузки. Тогда весь образец можно представить как ангармонический осциллятор во внешнем силовом поле. При этом динамическая переменная осциллятора описывает макроскопическое удлинение образца, которое не подвержено микроскопическим флуктуациям, а работа силы при растяжении образца (мы далее ограничиваемся этим случаем) - одна из составляющих баланса энергии. С другой стороны, колебания отдельного атома, например в простой модели Эйнштейна для твердого тела, также рассматриваются как колебания ангармонического осциллятора. И в этом случае действие механической нагрузки на колебания учитывается путем добавления потенциальной энергии силового поля к потенциальной энергии осциллятора. Но теперь координата осциллятора является флуктуирующей динамической переменной, возможные значения которой должны подчиняться статистике Максвелла-Больцмана. При этом потенциальную энергию силового поля следует рассматривать как часть внутренней энергии тела. Элементарные осцилляторы оказываются неизолированными, и как следствие энергия их колебаний меняется под действием силового поля. Энергия колебаний осциллятора является второй составляющей баланса энергии, а ее изменение в силовом поле объясняет термоупругий эффект. Однако в этом рассмотрении, очевидно, теряется связь между изменением внутренней энергии деформируемого твердого тела и макроскопической работой внешней силы.

Решение проблемы баланса энергии может быть получено, если использовать более реалистичную модель твердого тела. Следует разделить макроскопический аспект действия механической нагрузки и ее проявление в динамике отдельного атома. Необходимо учесть тот факт, что макроскопический образец составлен из большого количества элементарных осцилляторов, и в этом коллективе действуют статистические законы. Механическая нагрузка не действует непосредственно на флуктуирующие динамические переменные элементарных осцилляторов, определяя лишь макроскопическое удлинение образца. В качестве модели твердого тела (образца), учитывающей оба аспекта действия нагрузки, в данной работе рассмотрен ансамбль независимых ангармонических осцилляторов, которые все вместе деформируются внешней силой. В этой модели силовое поле вызывает деформацию образца в целом, причем в результате усреднения по ансамблю этот параметр является макроскопическим (не флуктуирующим). Теперь воздействие внешнего силового поля на каждый осциллятор определяется одним параметром макроскопической деформацией образца.

#### Ансамбль деформируемых ангармонических осцилляторов

Рассмотрим ансамбль  $N(N \rightarrow \infty)$  независимых ангармонических осцилляторов, которые скрепляют две жесткие рейки. Положение одной рейки фиксировано, а к другой приложена сила F(t). Сами эти рейки не являются необходимым элементом модели, они лишь дают наглядный образ динамической переменной образца, связанной с его макроскопической деформацией. Удлинение этого «образца» будем описывать параметром y(t), который считаем макроскопическим в том смысле, что он не подвержен микроскопическим флуктуациям. Флуктуирует координата смещения из положения равновесия отдельного осциллятора x<sub>k</sub>, который двумя одинаковыми связями (пружинками) соединен с рейками. Потенциальную энергию осциллятора запишем в приближении кубического ангармонизма:

$$U(x, y(t)) = \frac{fx^2}{2} + \frac{f(y(t) - x)^2}{2} - \frac{gx^3}{3} - \frac{g(y(t) - x)^3}{3}.$$
 (1)

Заметим, что в силу симметрии системы ангармоническая добавка в данном случае является квадратичной функцией координаты *x*:

$$-\frac{g}{3}(y^3-3y^2x+3yx^2),$$

что значительно упрощает последующее рассмотрение.

Функция Гамильтона всей системы, включающая потенциальную энергию внешнего силового поля F(t), имеет вид:

$$H(x_k, p_k, y(t)) = \sum_{k=1}^{N} h(x_k, p_k, y(t)) - F(t)y(t), (2)$$

где

$$h(x, p, y(t)) = \frac{p^2}{2m} + U(x, y(t))$$
(3)

 функция Гамильтона одного осциллятора.

Деформация образца y(t) определяется внешней силой следующим образом. Условие адиабатичности нагружения, помимо термодинамического значения этого слова, в нашем случае означает, что внешняя сила изменяется со временем медленно, так что скорость деформации образца много меньше средней скорости осциллятора:

$$\dot{y}(t) \ll \frac{\langle p \rangle}{m}.$$
 (4)

Считаем также, что подвижная рейка перемещается без ускорения, поэтому в каждый момент времени внешняя сила уравновешена упругой суммарной силой, действующей со стороны осцилляторов. Флуктуациями этой упругой силы пренебрегаем (результат «самоусреднения» в большом ансамбле). Равенство сил означает, что средняя сила, действующая на подвижную рейку равна нулю:

$$\left\langle \frac{\partial H}{\partial y} \right\rangle = 0$$

Отсюда получаем соотношение:

$$y = \langle x \rangle + \frac{F}{Nf} + \frac{g}{f} (y^2 - 2y \langle x \rangle + \langle x^2 \rangle), \quad (5)$$

где средние вычисляются по периоду колебаний отдельного осциллятора. Эти величины одинаковы для всех осцилляторов.

Второе соотношение между величинами y(t) и  $\langle x \rangle$  получим, усредняя по периоду колебаний уравнение движения отдельного осциллятора:

 $m\ddot{x} + fx + f(x - y) - g(y^2 - 2yx) = 0.$ 

В результате получаем:

$$\langle x \rangle = \frac{y}{2} - \frac{g}{2f} (y^2 - 2y \langle x \rangle).$$
 (6)

Поскольку термоупругий эффект — первого порядка по константе ангармонизма g [3], всюду в дальнейшем ограничиваемся этим приближением. Решение системы уравнений (5), (6) в этом приближении имеет вид:

$$y = 2\langle x \rangle \cong 2\left(\frac{F}{Nf} + \frac{g}{f}\langle x^2 \rangle_0\right),$$
 (7)

где индекс 0 у среднеквадратичного смещения осциллятора означает, что эта величина определяется в гармоническом приближении, в котором имеет место соотношение

$$2f\left\langle x^{2}\right\rangle_{0}=E_{0\text{кол}},\tag{8}$$

где  $E_{0_{\text{кол}}}$  — начальное значение энергии колебаний осциллятора.

Для колебательной энергии осциллятора в гармоническом приближении классический закон равнораспределения энергии дает известное соотношение:

$$E_{\rm KOH} = kT. \tag{9}$$

Фактически на данном этапе произошло разделение упомянутых выше двух аспектов действия силы. С одной стороны, деформация образца y(t) определяет работу внешней силы:

$$A = \int F dy = \int_0^t dt F(t) \dot{y}(t) \cong \frac{F^2(t)}{Nf}, \quad (10)$$

где в последнем равенстве мы учли соотношение (7). Эта работа, как видно, дает известный вклад в упругую энергию деформированного образца. С другой стороны, y(t)является внешним параметром в динамике отдельного осциллятора, к рассмотрению которой обратимся в следующем разделе.

#### Энергия колебаний и баланс энергии в термоупругом эффекте

Объяснение термоупругого эффекта в новой модели практически сводится к определению зависимости энергии колебаний отдельного осциллятора от классического параметра y(t). Энергией колебаний мы назовем ту часть полной энергии осциллятора, которая остается после вычитания ее минимального значения при данной деформации y(t). Минимум потенциальной энергии достигается в точке  $x_0$ , определяемой уравнением:

$$\frac{\partial U}{\partial x} = 2fx_0 - fy + g(y^2 - 2yx_0) = 0,$$

откуда получаем  $x_0 = y/2$ . Минимальное значение потенциальной энергии равно:

$$U_0 = \frac{fy^2}{4} - \frac{gy^3}{12}.$$
 (11)

Это будет второй составляющей в рассматриваемом здесь балансе энергии.

Третья составляющая — энергия колебаний осциллятора:

$$E_{\rm KOR} = K + U_{\rm KOR}, \qquad (12)$$

где

$$K = \frac{p_z^2}{2m} - \frac{p_z \dot{y}}{2} \cong \frac{p_z^2}{2m}$$
(13)

 – кинетическая энергия (в последнем равенстве учтено неравенство (4));

$$U_{\rm KOR} = \frac{m\tilde{\omega}^2(t)z^2}{2} - \frac{gz^3}{3}$$
(14)

потенциальная энергия колебаний, в которой

$$\tilde{\omega}(t) = \sqrt{\frac{2}{m}(f - gy(t))} \cong \omega_0 \left(1 - \frac{gy(t)}{2f}\right) (15)$$

— «смягченная» частота деформированного ангармонического осциллятора, а  $\omega_0$  — его собственная частота в отсутствие ангармонизма. Колебательная степень свободы теперь описывается координатой  $z \equiv x - x_0$ .

Термоупругий эффект объясняется в новой модели зависимостью энергии колебаний (12) от деформации образца, которая целиком определяется временной зависимостью «смягченной» частоты (15). При медленном деформировании образца в динамике осциллятора имеется адиабатический инвариант, который в книге [5] найден для случая гармонического осциллятора:

$$\frac{E_{\text{кол}}(t)}{\omega(t)} = \text{const.}$$
(16)

Однако нетрудно видеть, что с точностью до первого порядка по константе ангармонизма *g* включительно этот инвариант сохраняется и для ангармонического осциллятора со смягченной частотой (15). Действительно, с точностью до первого порядка по g из (12) получаем:

$$p_z \cong p_{oz} - \frac{gz^3}{6p_{0z}},$$
 (17)

где

$$p_{0z} \equiv \sqrt{2m\left(E_{\text{кол}} - \frac{m\tilde{\omega}^2 z^2}{2}\right)}$$

Адиабатическим инвариантом является площадь, ограниченная замкнутой кривой  $p_z(z)$  в фазовом пространстве осциллятора, а ангармоническая поправка в выражении (17) является нечетной функцией от *z*. Отсюда следует, что с растяжением образца его температура падает в нашей модели пропорционально внешней нагрузке следующим образом:

$$k_{\rm B}\Delta T = \Delta E_{\rm KOR} \cong -\frac{gF}{f^2} E_{\rm KOR}.$$
 (18)

Термоупругий эффект объясняется соотношением (18). Однако теперь возникает естественный вопрос, куда «девается» энергия колебаний  $\Delta E_{\text{кол}}$  при заданной работе внешней силы (10). Ответ на него следующий: эта энергия добавляется к упругой энергии растяжения химических связей. Действительно, изменение потенциальной энергии  $U_0$ , определяемой формулой (11), в первом порядке по константе ангармонизма следует выражению:

$$\Delta U_{0} \cong \frac{F^{2}}{Nf} + \frac{gF}{f^{2}} E_{\text{кол}} - \frac{2gF^{3}}{3N^{2}f^{3}}.$$
 (19)

Последнее слагаемое в соотношении (19) мало, и мы им пренебрегаем, если внешняя сила мала по сравнению с максимальной силой для ангармонического осциллятора:

$$F << F_{\rm max} = \frac{f^2}{2g}.$$

Таким образом, баланс энергии восстанавливается соотношением (19). При этом отношение первого и второго слагаемых в (19) имеет порядок

$$\sim \frac{x_0 F_{\max}}{E_{\min}},$$

что очевидно мало при высоких темпера-

турах и относительно малых деформациях образца. Это объясняет существенное различие между работой внешней силы и изменением колебательной части внутренней энергии образца, которое наблюдается в эксперименте.

Таким образом, энергетика процесса адиабатического механического нагружения твердого тела и его результат - термоупругий эффект становятся понятными, если четко разделить макроскопический аспект действия нагрузки и его проявление на микроскопическом уровне. Это подразумевает также разделение всех степеней свободы образца на две группы: микроскопические, динамика которых подчиняется статистическим законам, и макроскопические, которые описывают деформацию образца в целом и не подвержены флуктуациям. Аналогичный анализ можно провести и в области низких температур, где существенны квантовые закономерности.

## Ансамбль деформируемых квантовых ангармонических осцилляторов

Рассмотрим ансамбль  $N(N \to \infty)$  независимых квантовых ангармонических осцилляторов. Рассуждения аналогичны тем, которые были проведены в разделе «Ансамбль деформируемых ангармонических осцилляторов». Только в этом случае проводится уже квантовомеханическое усреднение и тогда в неравенстве (4)  $\langle p \rangle = \langle \Psi_0 | \hat{p} | \Psi_0 \rangle$ . Для определенности ограничиваем рассмотрение пределом нулевой температуры, когда все осцилляторы находятся в основном состоянии  $| \Psi_0 \rangle$ . В формуле (5) все величины вычисляются в основном состоянии.

Собственная функция основного состояния (в каждый момент времени) имеет вид

$$\Psi_0(z, y) = A \exp\left[-\frac{m\tilde{\omega}^2 z^2}{2\hbar}\right],$$

где A — нормировочная постоянная, а «смягченная» частота  $\tilde{\omega}$  деформированного ангармонического осциллятора определяется выражением (15). В этом состоянии имеем:

$$\langle x \rangle = \frac{y}{2}, \langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{4m\tilde{\omega}}.$$

Вместе с уравнением (5) это дает:

$$y = 2\frac{F}{Nf} + 2\frac{g}{f}\left\langle x^2 \right\rangle \cong 2\frac{F}{Nf} + \frac{g}{f^2}\frac{\hbar\omega_0}{2}, (19)$$

где  $\omega_0$  — частота осциллятора без ангармонизма, как и раньше.

Механическая работа (10), которая затрачивается на деформирование образца в условиях адиабатического нагружения, идет целиком на приращение его внутренней энергии. Но вызываемые этим воздействием ангармонические эффекты могут быть больше по величине и иметь другой источник, подобно тому, как это наблюдается в термоупругом эффекте. Представляет интерес проанализировать, как это происходит с энергией основного состояния при нулевой температуре. Условие адиабатичности нагружения в данном случае означает, что осциллятор остается в основном состоянии, но меняется его собственная частота, а вместе с ней энергия основного состояния. Тем самым мы имеем квантовый вариант классической теоремы об адиабатическом инварианте [5]. Изменение частоты атомных колебаний при механическом нагружении образца – измеримый эффект ангармонизма. С этим эффектом связана вторая составляющая рассматриваемого здесь баланса энергии:

$$\Delta E_{\rm KOR} = N \frac{\hbar}{2} \Delta \tilde{\omega} \cong -\frac{\hbar \omega_0}{2} \frac{gF}{f^2}.$$
 (20)

Это изменение колебательной части внутренней энергии образца измеряется на опыте по изменению частоты колебаний осциллятора. Оно не совпадает ни по знаку, ни по величине с работой внешней силы (10).

Третья составляющая баланса энергии – изменение потенциальной энергии (11), связанной с макроскопической деформацией образца в целом. С точностью до первого порядка по константе ангармонизма включительно, и с учетом соотношения (19), получаем:

$$\Delta U_0 \cong \frac{F^2(t)}{Nf} + \frac{\hbar\omega_0}{2} \frac{gF}{f^2}.$$
 (21)

Таким образом, изменение внутренней энергии образца  $\Delta E_{\kappa o \pi} + \Delta U_0$  равно работе внешней силы (10), и баланс энергии восстановлен. В связи с этим следует обратить внимание на то обстоятельство, что энергия основного состояния  $\hbar \omega_0/2$  и ее изменение (20) при механическом нагружении являются необходимыми составляющими рассматриваемого здесь баланса энергии.

Следовательно, адиабатическое механическое нагружение твердого тела при низких температурах вызывает перераспределение энергии между двумя составляющими: энергией нулевых колебаний («смягчение» частоты) и энергией упругой деформации всего образца. В отличие от предшествующих работ, в рассматриваемой здесь модели в обмене энергии участвуют два масштабных уровня: макро- и микроскопический. В этом случае следу-

1. Гиляров В.Л., Слуцкер А.И., Володин В.П., Лайус Л.А. Энергетика адиабатически нагружаемого возбужденного ангармонического осциллятора // Физика твердого тела. 1997. Т. 39. Вып. 1. С. 153–157.

2. Слуцкер А.И., Гиляров В.Л., Лукьяненко А.С. Особенности энергетики адиабатически нагружаемого ангармонического осциллятора // Физика твердого тела. 2006. Т. 48. Вып. 10. С. 1832–1837.

ет говорить о разделении всех степеней свободы образца на квантовые, энергия которых квантуется, и на классические, динамика которых описывается законами классической механики.

#### Заключение

Следует отметить, что, в отличие от предшествующих работ, перераспределение энергии при адиабатическом механическом нагружении в нашей модели осуществляется между двумя масштабными уровнями: микроскопическим уровнем атомных колебаний и макроскопическим уровнем, где измеряется упругая деформация образца в целом.

Авторы благодарят докторов физикоматематических наук А.И. Слуцкера и В.Л. Гилярова за плодотворные обсуждения материалов статьи.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

3. Слуцкер А.И., Поликарпов Ю.И., Каров Д.Д., Гофман И.В. Энергетика упругого нагружения ангармонического твердого тела // Физика твердого тела. 2013. Т. 55. Вып. 3. С. 610–616.

4. Гиляров В.Л., Слуцкер А.И. Энергетика нагруженного квантового ангармонического осциллятора // Физика твердого тела. 2010. Т. 52. Вып. 3. С. 540–544.

5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. М.: Наука, 1976. 206 с.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГОРОБЕЙ Наталья Николаевна — доктор физико-математических наук, доцент кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. 195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 n.gorobey@mail.ru

**ЛУКЬЯНЕНКО** Александр Сергеевич — доктор физико-математических наук, профессор кафедры экспериментальной физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. 195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 alex.lukyan@rambler.ru

## *Gorobey N.N., Lukyanenko A.S.* ON THE ENERGY BALANCE IN THE THERMOELASTIC EFFECT.

The energy balance in the thermo-elastic effect is analysed in the framework of the mechanically deformed ensemble of anharmonic oscillators. As the result, two aspects of mechanical loading – the macroscopic deformation of a sample, with corresponding addition to the energy balance (the mechanical work), and the vibration energy of oscillators change at the microscopic level, are separated. Between these two parts of the internal energy of the sample the exchange in the thermo-elastic effect takes place. The low

temperature limit in which the vibration energy reduces to the energy of zero vibrations is also considered. ENERGY, THERMO-ELASTIC EFFECT, ENERGY BALANCE, DEFORMATION, ANHARMONIC OSCILLATOR.

#### REFERENCES

1. Gilyarov V.L., Slutsker A.I., Volodin V.P., Laius L.A. Energetics of an adiabatically-loaded excited anharmonic oscillator. *Physics of Solid State*, 1997, Vol. 39, No. 1, pp. 132-135.

2. Slutsker A.I., Gilyarov V.L., Luk'yanenko A.S. Energy features of an adiabatically loaded anharmonic oscillator. *Physics of Solid State*, 2006, Vol. 48, No. 10, pp. 1947-1953.

3. Slutsker A.I., Polikarpov Yu.I., Karov

**D.D., Gofman I.V.** Energy of the elastic loading of anharmonic solids. *Physics of Solid State*, 2013, Vol. 55, No. 3, pp. 668-674.

4. Gilyarov V.L. Slutsker A.I. Energy features of loaded quantum anharmonic oscillator. *Physics of Solid State*, 2010, Vol. 52, No. 3, pp. 585-590.

5. Landau L.D., Liefshits E.M. Theoretical Physics. Vol. 1. Mechanics. Moscow, Nauka, 1976. 206 p.

#### THE AUTHORS

**GOROBEY** Natalya N.

St. Petersburg State Polytechnical University,29 Politeknicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia n.gorobey@mail.ru

#### LUK'YANENKO Alexander S.

St. Petersburg State Polytechnical University,29 Politeknicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia alex.lukyan@rambler.ru

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

УДК 533.15: 612.22

#### А.А. Хрущенко, К.М. Арефьев

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

#### РАСЧЕТ КИСЛОРОДНОГО МАССООБМЕНА В ЛЕГКИХ ЧЕЛОВЕКА

В статье рассматривается влияние диффузионной способности легких на процесс переноса кислорода из газовой фазы альвеол в кровь капилляров легких. Основной перенос кислорода в крови осуществляется в связанном состоянии с гемоглобином эритроцитов. Поэтому на диффузионную способность легких по транспорту газов, кроме диффузии через ткани, оказывает влияние скорость реакции кислорода с гемоглобином и проницаемость мембраны эритроцита. С использованием различных литературных источников проведен анализ зависимости скорости реакции кислорода с гемоглобином от напряжения кислорода. Проведена оценка скорости реакции кислорода с гемоглобином; при этом применялась математическая модель легких, а также использовались экспериментальные данные, опубликованные в литературе. Получено хорошее согласие результатов численного расчета с экспериментом.

ДИФФЎЗЙОННАЯ СПОСОБНОСТЬ, СКОРОСТЬ РЕАКЦИИ КИСЛОРОДА С ГЕМОГЛО-БИНОМ, ПРОНИЦАЕМОСТЬ МЕМБРАНЫ ЭРИТРОЦИТА, ПЕРЕНОС КИСЛОРОДА ИЗ ГА-ЗОВОЙ ФАЗЫ В КРОВЬ.

Изучение кислородного массообмена в легких и разработка соответствующих методов расчета является актуальной задачей физиологии как теоретической основы медицины. Особые трудности при расчетах возникают из-за противоречивых опытных данных по скорости поглощения кислорода гемоглобином в эритроцитах крови, протекающей по легочным капиллярам.

В настоящей статье предпринята попытка разрешения этой проблемы, а также даются примеры расчетов кислородного массообмена для разных случаев.

В начальный период изучения кислородного массообмена в легких человека были введены представления о диффузионной способности  $D_L$ , [мл<sub>o</sub>·мин<sup>-1</sup>·(мм рт.ст.)<sup>-1</sup>], легочной системы в целом и предложено следующее соотношение [1 – 4]:

$$\frac{1}{D_L} = \frac{1}{D_M} + \frac{1}{\Theta V_C},$$

где  $D_{M}$ ,  $[Mn_{o} \cdot Muh^{-1} \cdot (MM pt.ct.)^{-1}] - диффу$ зионная способность переноса кислорода из альвеол через альвеолярно-капиллярную мембрану в кровеносные сосуды;  $\Theta$ ,  $[Mл_o \cdot MuH^{-1} \cdot (MM \text{ рт.ст.})^{-1} \cdot Mn_{bl}^{-1}] - скорость реакции кислорода с гемоглобином (Hb); <math>V_c$ ,  $[Mn_{bl}] - объем крови, находящейся в легочных капиллярах.$ 

Основной перенос кислорода кровью осуществляется в его связанном состоянии с гемоглобином. В работах [1 - 4] сообщаются результаты экспериментальных исследований скорости насыщения гемоглобина кислородом (оксигенации). Установленные значения скорости  $\Theta$  в большинстве случаев не согласуются между собой.

В альвеолы (легочные пузырьки) кровь поступает с гемоглобином, насыщенным кислородом до 70% или несколько выше. В капиллярах происходит насыщение крови (в пределе до 100%), значения  $\Theta$  обычно меняются примерно от 1,5 [мл<sub>o</sub>·мин<sup>-1</sup>× ×(мм рт.ст.)<sup>-1</sup>·мл<sub>bl</sub><sup>-1</sup>] до значений, приближающихся к нулю. В работах рассматриваемого начального периода выполнены расчеты насыщения крови кислородом в ка-

пиллярах, а также значений  $D_L$  для тех или иных условий. Эти расчеты носили, по большей части, оценочный характер. В работе [5] скорость оксигенации определялась для отдельных капель крови (зажатых между двумя газопроницаемыми мембранами), взятых из проб, отвечающих различным временам процесса. Сам прибор основан на измерении поглощения красного и инфракрасного излучения с предварительной градуировкой по опытам с ненасышенным и полностью насыщенным гемоглобином. Однако наши оценки кислородного массообмена в легких человека с использованием этих значений  $\Theta$ приводят к слишком быстрому насыщению крови, по сравнению с имеющимися опытными данными. Как сообщается в статье [6], известный специалист по строению легких и процессам дыхания Э.Р. Вейбель [7] предложил использовать в расчетах существенно более низкие значения  $\Theta$ , по сравнению с результатами, имеющимися в то время. На рис. 1 дается сравнение значений  $\Theta$ , предложенных Вейбелем, с опытными данными [4]. В этой работе значения  $\Theta$  устанавливались из химического анализа кислорода в пробах крови.

Сравнение значений  $\Theta$ , полученных в работе [5], с рекомендованными Вейбелем, дается далее на рис. 2 для уровня насыщения кислородом свыше 70 %, т. е. в рабочем диапазоне.

Следует подчеркнуть, что значения  $\Theta$  определяются средним напряжением кислорода в эритроцитах, а не в плазме крови, хотя иногда такое различие не учитывается. Предпринятые оценки с использованием представлений, развитых в работе [7], показывают, что, например, при  $\Theta = 1$  [мл<sub>o</sub>·мин<sup>-1</sup>·(мм рт.ст.)<sup>-1</sup>·мл<sub>bl</sub><sup>-1</sup>] среднее значение напряжения кислорода в эритроцитах ниже такового в плазме крови не более, чем на несколько процентов.

Под напряжением кислорода в плазме крови или в эритроцитах подразумевается его давление над кровью, измеряемое в миллиметрах ртутного столба, в равновесном состоянии с жидкостью, с учетом растворимости. Газ считается идеальным. Под объемом кислорода  $O_2$  понимается объем идеального газа при нормальных условиях, причем 1 мл кислорода соответствует его массе 1,43 мг.

Следует также отметить, что при уменьшении значений  $\Theta$  должна пропорционально уменьшаться величина относительного понижения напряжения кислорода в эритроцитах. В любых случаях можно не учитывать погрешность, связанную с различием напряжения кислорода в крови и в отдельных эритроцитах. На рис. 2 приведены значения  $\Theta$  по рекомендации Вейбеля и полученные расчетным путем по зависимости степени насыщения гемоглобина



Рис. 1. Зависимости скорости реакции кислорода с гемоглобином Θ от его насыщенности кислородом S. Сравнение значений Θ, полученных в работе [4] (кривая I), с рекомендованными Вейбелем [6] (2)



Рис. 2. Зависимости скорости реакции кислорода с гемоглобином (1) и величины насыщения гемоглобина (2) от напряжения кислорода в крови. Концентрация диоксида углерода в легких принята равной 10 мм рт.ст.

от напряжения кислорода в эритроцитах. Представленные значения  $\Theta$  будут использоваться далее в настоящей статье при расчетах кислородного массообмена.

В работе [8] приведен приближенный вывод формулы осредненной скорости реакции кислорода с гемоглобином в эритроците  $\Theta_t [Mn_o \cdot Muh^{-1} \cdot (MM \text{ рт.ст.})^{-1} \cdot Mn_{Hb}^{-1}],$ причем  $\Theta_t = \Theta/h$ , где h,  $Mn_{Hb} / Mn_{bl} - по$ казатель гематокрита, т. е. относительныйобъем гемоглобина в эритроците.

В среднем для здорового мужчины h = 0,50, для женщины h = 0,45, и обычно в оценках для них принимают одинаковое значение h = 0,50. Приближенные формулы для  $\Theta_t$  при высоких уровнях насыщения гемоглобина кислородом имеют вид

$$\Theta_{t} = h\Theta = \frac{h\alpha_{bl}\left(\frac{S_{e}}{V_{e}}\right)}{\frac{\delta}{D_{bl}} + \frac{1}{\operatorname{Sh}D_{e}}\left(\frac{V_{e}}{S_{e}}\right)} \cdot M; \quad (1)$$

$$M = 1 + \frac{D_{Hb}}{D_e} [Hb]_T \frac{\beta}{\alpha_e}.$$
 (2)

В приведенных соотношениях  $\alpha_{bl}$  – растворимость кислорода в плазме крови;  $S_e/V_e$  – среднее значение отношения площа-

ди поверхности эритроцита к его объему; δ – толщина невозмущенного слоя плазмы крови у наружной поверхности эритроцита;  $D_{\mu}$ ,  $D_{e}$  – коэффициенты диффузии кислорода в плазме крови и в эритроците, соответственно; Sh - число Шервуда, т. е. средний массовый коэффициент переноса, который определяет значение внутреннего градиента напряжения кислорода у границы эритроцита; а – растворимость кислорода в эритроците; [Hb]<sub>т</sub> – полная концентрация гемоглобина в эритроците,  $\beta = dS/dP_{a}$  – производная от степени насыщения гемоглобина кислородом S по напряжению кислорода *P*<sub>a</sub> в эритроците. Значения β меняются вдоль кривой насыщения и приближаются к нулю при величине S, стремящейся к единице. В расчетах для эритроцита принималось значение числа Шервуда Sh = 2 на основании решения задачи, полученного для короткого цилиндра, имитирующего форму эритроцита.

В упомянутой ранее работе [5] принималось изменение величины δ от 2,0 до 0,5 мкм. При низких значениях δ авторы получали более высокие значения Θ. Эритроциты в среднем имеют диаметр порядка 8 мкм и толщину 1,6 мкм. Характер их движения Рис. 3. Сравнение модельных расчетов кислородной диффузионной емкости Θ<sub>t</sub> (1, 4) (выполнены по формулам (1) и (2)) как функции от *S*, с экспериментальными данными из статьи [5] (2) и с рекомендованными Вейбелем (3); принятые расчетные значения δ, мкм: 0,5 (1) и 2,0 (4); *h* = 0,5 мл<sub>ну</sub>/мл<sub>ы</sub>

в капиллярах со средним диаметром около 8 мкм носит сложный характер. На рис. 3 представлены кривые  $\Theta/h$  [мл<sub>o</sub>·мин<sup>-1</sup>× ×(мм рт.ст.)<sup>-1</sup>·мл<sub>нb</sub><sup>-1</sup>] при высоких значениях степени насыщения *S*, построенные с учетом приведенных в работе [8] расчетов по формулам (1) и (2), а также опытные данные по величине  $\Theta$ , взятые из статьи [5], и эффективные значения этой величины по Вейбелю [6].

Формулы (1) и (2) являются приближенными и дают только общий характер зависимостей. Тем не менее, из графиков на рис. 3 видно, что данные опытов из статьи [5] в главных чертах согласуются с расчетной кривой при  $\delta = 0,5$  мкм. То же самое можно сказать и о значениях величин Θ, отвечающих рекомендациям Вейбеля: они лежат выше кривой для  $\delta = 2$  мкм, но ниже опытных значений статьи [5]. Полученная картина носит качественный характер, однако свидетельствует об отсутствии существенных противоречий между рекомендациями Вейбеля и экспериментальными данными [5] при повышенных уровнях насыщения гемоглобина.

Есть еще одна причина понижения величины Θ. В работе [9] показано, что при взаимодействии эритроцита со стенками капилляров внутри него возможна электростатическая перестройка полярных молекул в бинарном граничном слое, приводящая к уменьшению проницаемости мембраны эритроцита. Кроме того, эритроцит с запасенным кислородом не отдает его сразу после попадания в поток крови в сосудах большого диаметра (это известный физиологический факт). Только после попадания в узкие сосуды в различных органах (мышцы, глаза, мозг и др.) эритроцит начинает отдавать кислород в результате взаимодействия со стенками. Это показано в опытах работы [9], выполненных с потоком непрерывно перемешиваемой крови, находящейся в контакте с воздухом. Изменение насыщения гемоглобина кислородом непрерывно измерялось с помощью оптического оксигенометра. Показано, что с повышением площади контакта крови с воздухом скорость оксигенации при приближении насыщения гемоглобина к 100 % резко понижается. В опытах по деоксигенации выяснено, что при воздействии переменного электрического поля с частотой около 50 Гц скорость процесса понижается, что связано с диэлектрической перестройкой ионов внутри эритроцита в граничном слое.

Таким образом, можно считать, что предложенное Вейбелем понижение эффективных значений  $\Theta$  (с учетом выясненных в работе [9] факторов) также оправдано.

С появлением современных компьютеров и методов программирования расчеты кислородного массообмена в легких человека стали давать более полное описание процессов. В работах [10, 11] одновременно вычисляются как поступление кислорода в кровь, так и потребление его в тканях, а также оценочно учитываются воспроизводство гемоглобина в костном мозге и затраты энергии на мышечную работу дыхания. Для расчетов подобного рода необходимо использовать значительное число характеристик тканей (дополнительно к параметрам, относящимся непосредственно к легким). Требуемые характеристики могут



существенно различаться для разных людей, поэтому необходимо проведение дополнительных исследований, что зачастую и делалось. Удается при соответствующем наборе значений параметров, характеризующих кислородный массообмен в легких и другие факторы (например, поглощение кислорода в тканях, вывод диоксида углерода и прочие), получить достаточное соответствие расчетных результатов экспериментальным данным по величинам, относящимся к дыханию, в частности по изменению парциального давления кислорода в альвеолах и напряжения в капиллярах. Естественно, необходимо и в дальнейшем развивать и уточнять такие методы расчета.

Вместе с тем, нужны и более детальные расчеты массообмена в легких, например, по методу, развитому в работе [12], где требуются только данные, определяющие перенос кислорода непосредственно в легких. Авторами использованы значения скорости реакции кислорода с гемоглобином **Ю**, рекомендованные Вейбелем. Результаты расчетов согласуются с опытными данными, полученными, например, при дыхании человека на разной высоте над уровнем моря. Рассматриваемый метод расчета достаточно подробно изложен в цитируемой выше статье. При описании строения легких используется модель Вейбеля [7] с учетом цифровых данных по альвеолярнокапиллярной структуре. В частности, для здоровых легких толщина мембраны, через которую кислород из альвеолы проникает (диффундирует) в кровь, принимается равной 0,54 мкм. Коэффициент диффузии кислорода в скелетных мышечных волокнах в условиях их относительного покоя у различных позвоночных равняется (0,9 - 1,8)·10<sup>-10</sup> м<sup>2</sup>/с [13]. Эти значения коэффициента диффузии кислорода ниже, коэффициент диффузии в воде, в чем среднем на порядок. В случае болезненных состояний толщина мембраны может увеличиваться. В расчетной схеме [12] используются два исходных уравнения: баланса при вдохе и выдохе расхода кислорода, а также массообмена этого газа между альвеолами и кровью, протекающей по капиллярам. Разработана программа, которая позволяет учитывать разнообразные факторы, влияющие на кислородный массообмен (например, вентиляционно-перфузионное отношение). При этом могут использоваться параметры, отвечающие как спокойному дыханию, так и усиленному при выполнении человеком физической нагрузки. Во втором случае увеличиваются расходы как воздуха, так и крови; дополнительно включаются ранее не задействованные кровеносные сосуды. В расчетах число дополнительно включенных капилляров задается таким, чтобы скорость крови в них оставалась такой же, как и при спокойном дыхании. При этом увеличивается газообменная поверхность легких в соответствии с повышением числа работающих сосудов.

Кроме того, оказалось возможным использовать метод работы [12] для моделирования болезненных состояний легких человека [14]. Основные параметры состояния легких у пациентов были взяты из данных предварительных клинических обследований [2]; при этом оказалось, что результаты расчетов соответствуют указанным данным обследований.

Метод расчета [12] с использованием значений  $\Theta$  по Вейбелю может быть рекомендован как часть общих расчетов кислородных массообменных процессов в организме человека, так как дает достоверные результаты по потреблению кислорода в легких.

Особый интерес представляют расчеты кислородного обмена в легких физически здоровых мужчин, занимавшихся в прошлом каким-либо видом спорта. Для обследования их дыхания было выбрано девять человек в возрасте от 19 до 35 лет (средний возраст – 26 лет) с различными уровнями физического развития. Данные о таких испытаниях приведены в работе [15]. У всех испытуемых, которые жили рядом с местом исследования (Дарем, Северная Каролина, высота 460 м над уровнем моря) и были некурящими, не выявлено нарушений здоровья и конкретно легочных заболеваний. Обследования проводились при условиях, отвечающих различной высоте над уровнем моря в состоянии покоя, и при трех

Таблица

#### Результат измерения [15] Расчет Режим $P_{air}$ , MM $P_{A}$ Po $P_{o}$ $P_{A}$ $P_{\rm v}$ f, $V_{\rm E}$ , рт.ст. опыта $V_{\Lambda}/Q$ *Q*<sub>т</sub>/60, л **МИН**<sup>-1</sup> л/мин мм рт.ст. Объект опыта – С.М. 760 (0) 0.88 14 10.1 0.132 39 86.6 99.3 85.4 90-104 Ι \_ 23 30.1 0.23 30 93.5 103.9 94 104-122 Π \_ 0.308 30 25 43.1 88,5 106.9 88,5 106-126 0,382 III 2,69 40 70,5 29,1 91,5 118,8 913 115-131 632 12,9 0,153 64,4 80,0 78-90 (0) 14 36,6 71 Ι 1,67 26 31,1 0,255 27,9 60,9 78,8 64 84-98 Π \_ 30 44,6 0,322 26,1 60,6 82,4 68 87-102 III 81,3 36 0,391 23,2 60,9 89,2 66 95-110 (0) 0.90 0,166 33,7 49,8 59 60 62 - 72523 14 12,1 1.80 24 35,6 0.28 19.3 38,3 69.7 63 66 - 80Ι Π 2,40 31 55,3 0.336 16,6 39,2 56.7 66 71-84 429 (0) 1,40 19,3 0,183 25,9 38,5 49,3 52 55-64 16 $I^*$ 14 10,4 0,150 41,7 316,9 100 182-229 \_ \_ Объект опыта – С. Вd. 0,095 760 (0)2,44 19 17,0 35,6 119.3 126,6 100 117-127 1.99 0,245 97.6 110-125 Ι 30 34,0 31,8 93,8 98 0,335 Π 2.22 35 50,2 31.3 90.9 105,4 97 113-128 III 2,63 50,8 0,263 99 118-127 59 24,1 91,1 110,4 632 (0) 1,66 20 15,5 0,123 33,1 84,9 92,0 82 89-98 3,65 0,222 89 99-110 Ι 33 38,4 22,3 81,1 82,5 Π 2.96 38 43.6 0.210 19,1 70.6 80.8 86 96-106 2,54 III 43 83,6 82 92-105 58,5 0,340 21,8 59,9 Объект опыта – M.S. 760 2,30 0,108 34,1 119,8 (0)19 17,7 120,3 100 114-125 2,38 30 29,6 0,175 21,3 101,6 99,6 99 Ι 111-123 Π 2,48 0,276 97,0 99 35 46,4 22,2 106,7 112-127 III 2,31 59 64.1 0,398 22.0 91.3 107.8 98 113-126 632 (0)1,86 20 15,3 0,110 33,9 84,7 88,3 87 92-100 2,10 30,6 0,205 77,7 82,9 91-101 Ι 33 27,0 86 Π 2,19 50,6 0,343 25,5 68,7 85,7 90-103 38 84 III 3,16 43 74,1 0,357 18,1 64,8 89,5 86 95-108 523 (0)2,37 20 18,3 0,108 35.9 69,6 73,8 76 80-86 2,44 29 28,5 0,165 21,7 55,9 64,7 75-83 Ι 71 Π 3,30 36 48,0 0,215 12,5 45,7 67,8 72 77-86 III 43 74,9 72,8 70 3,65 0,313 13,0 41,9 78-88 429 (0)2,68 23 19,2 0,098 28,6 57,4 59,5 61 66 - 70Ι 30 31,7 0,167 14,2 35,4 51,4 56 61-68

## Сопоставление результатов расчета параметров кислородного массообмена в легких человека с экспериментальными данными

<i>Р<sub>аіг</sub></i> , мм рт.ст.	Режим опыта	Результат измерения [15]						Расчет		
		V/O	$V_{\rm A}/Q \begin{bmatrix} f, & V\\ MUH^{-1} & J/M \end{bmatrix}$	$V_{\rm E}$ ,	V <sub>E</sub> , /мин Q <sub>T</sub> /60, л	$P_{\rm v}$	P <sub>o</sub>	P <sub>A</sub>	P <sub>o</sub>	P <sub>A</sub>
		, ∧ <i>Q</i>		л/мин		мм рт.ст.				
	II	2,56	41	57,6	0,335	15,5	31,4	57,9	52	61–69
	III*	1,55	36	40,8	0,380	38,6	354,5	344,0	100	253-300

Окончание таблицы

Обозначения:  $P_{air}$  – атмосферное давление;  $V_A/Q$  – вентиляционно-перфузионное отношение; f – частота дыхания;  $V_E$  – объем воздуха, проходящего через легкие за минуту;  $Q_T$  – объем крови, циркулирующей через легкие за минуту;  $P_V$  – напряжение кислорода в венозной крови (перед легочными капиллярами);  $P_o$  – напряжение кислорода в артериальной крови (большого круга кровообращения);  $P_A$  – давление кислорода в альвеоле.

Примечание. Звездочкой отмечены опытные данные при дыхании чистым кислородом.

уровнях физической нагрузки: легкие (I), умеренные (II) и тяжелые (III) упражнения на велоэргометре (в зависимости от состояния субъекта). Выбор рабочего режима для основного эксперимента был таким, чтобы дать сердцу нагрузки, соответствующие пульсу 120 (I), 150 (II) и 180 (III) уд./мин при трех указанных уровнях сложности физических уравнений. Условия, отвечающие разным высотам над уровнем моря, были смоделированы в гипобарической камере. Каждое упражнение длилось 7 – 9 мин, измерения начинались с шестой минуты (момент достижения стационарного состояния). До начала контрольных измерений испытуемые длительное время находились в состоянии покоя. После каждого упражнения мужчины отдыхали, чтобы восстановиться и вернуться к частоте сердечных сокращений, близких к соответствующим значениям в состоянии покоя. Эти периоды отдыха длились примерно 15, 20 и 25 мин после легких, средней тяжести и тяжелых упражнений соответственно.

В таблице представлены результаты измерений, характеризующих перенос кислорода из газовой фазы альвеол легких в кровь для троих из девяти испытуемых. Имена этих лиц обозначены инициалами С.М., С.Вd. и М.S. В таблице приведены результаты как для дыхания в состоянии покоя (0), так и для дыхания при выполнении физических нагрузок различного уровня (I – III).

Значения напряжения кислорода в крови определялось в опытах по пробе артериальной крови (после сердца), помещенной в хроматограф марки Вариан-3700.

Давление кислорода в альвеоле измерялось по выдыхаемому воздуху с помощью газоанализатора (в таблице представлены средние значения этой величины за периоды вдоха и выдоха). В таблице также приведены значения величин, рассчитанные по методу [12]: напряжение кислорода в крови после насыщения в альвеолах, средние значения парциального давления кислорода в альвеоле и объем крови в легочных капиллярах.

Пример расчета. Моделируем случай дыхания испытуемого СМ, используя данные измерений, представленных в таблице. Рассмотрим состояние покоя. Если принять объем вдыхаемого воздуха (в среднем) равным  $V_{T} = 0,72$  л, а частоту дыхания f = 14 цикл/мин, то получим объем V<sub>F</sub> = 10,1 л. Расход крови, проходящей через легкие,  $Q_{T} = 7,9$  л/мин. В результате вентиляционно-перфузионное отношение в данном случае составит  $V_A/Q = 0.88$ . Толщину мембраны зададим равной 0,54 мкм в соответствии со среднестатистическими данными Вейбеля, относящимися к здоровым легким. Из расчета по формуле (2) получаем значение диффузионной способности мембраны легких  $D_{M} = 17,2$  мл·мин<sup>-1</sup>× ×(мм рт.ст.)<sup>-1</sup>. Аналогично приведенному примеру моделируются варианты при дыхании под нагрузкой и при различном внешнем давлении.

Расчеты показали, что у первых двух испытуемых выход кислорода из альвеол через



Рис. 4. Сравнение экспериментальных (2, 4) и расчетных (1, 3) данных по парциальному давлению кислорода в альвеолах (1, 2) и по напряжению кислорода в крови (3, 4) испытуемых мужчин в зависимости от уровня физической нагрузки (0, I, II, III). Испытания проведены при значениях атмосферного давления 755 (а) и 632 (б) мм рт.ст.

альвеолярную мембрану затруднен. Увеличение в два раза диффузионной способности мембраны у этих мужчин приводит к соответствию расчетных и измеренных напряжений кислорода в крови.

При использовании результатов проведенного моделирования отклонение расчетных данных от экспериментальных значений стало небольшим для дыхания без нагрузки. При дыхании под нагрузкой возрастают расходы как крови, так и воздуха. Как указывалось выше в данной статье, в легких включаются неиспользуемые ранее капилляры, т. е. возрастает объем крови V<sub>с</sub> и, соответственно, газообменная поверхность легких. Легкие тех людей, которые ранее активно занимались спортом (либо продолжают им заниматься), более подготовлены к переносу кислорода из газовой фазы в кровь капилляров, поэтому процессы увеличения V<sub>с</sub> и газообменной поверхности облегчены. При подборе повышенных значений V<sub>с</sub>, отвечающих уровням нагрузки, удается получать расчетные значения величин, согласующиеся с опытными данными. Для наглядности результаты двух вариантов испытаний представлены на рис. 4.

На рис. 4 проведено сопоставление экспериментальных (взяты из работы [15]) и расчетных данных (расчеты выполнены нами). По вертикальной оси отложены две физические величины: среднее за дыхательный цикл давление кислорода в альвеолах (символы 1, 2) и напряжение в крови испытуемых на выходе из капилляров (3, 4). Уровень физической нагрузки представлен номерами: 0 — отсутствие нагрузки; I, II, III — уровни нагрузки, при которой пульс испытуемых мужчин составлял 120, 150 и 180 уд./ мин. Представлены два варианта атмосферного давления: близкого к нормальному и пониженного.

Как видно из графиков и данных таблицы, различие расчетных и экспериментальных данных составляет от нескольких процентов до 10% в некоторых случаях. Причинами указанного различия могут быть отклонения от средних значений показателя гематокрита (обычно не более чем на 20 - 30 %). Экспериментальные данные имеют погрешности измерений. Но важно отметить, что в целом результаты расчета достаточно полно согласуются с опытными данными.

Для остальных шести испытуемых мужчин (для них данные в таблице не приводятся) нами получены результаты, аналогичные представленным для трех первых субъектов.

В заключение статьи отметим, что разработанный метод расчета кислородного массообмена в легких человека позволяет получать надежные (в достаточной мере) результаты как для случаев спокойного дыхания, так и дыхания при выполнении физических нагрузок. Метод может быть также использован в полных расчетах процессов потребления кислорода человеческим организмом для исходной фазы вычислений процессов переноса кислорода в легких.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gibson Q.H., Kreuzer F., Meda E., Roughton F.J.W. The kinetics of human hemoglobin in solution and in the red cell at  $37^{\circ}$ C // J. Physiol. Lond. 1955. No 129. P. 65-89.

2. Гриппи М.3. Патофизиология легких. М.: Бином, Х.: МТК-книга, 2005. 304 с.

3. Roughton F.J.W., Forster R.E. Relative importance of diffusion and chemical reaction rates in determining rate of exchange of gases in the human lung, with special reference to true diffusing capacity of pulmonary membrane and volume of blood in the lung capillaries // J. Appl. Physiol. 1957. Vol. 2. P. 290-302.

4. Staub N.C., Bishop J.M., Forster R.E. Importance of diffusion and chemical reaction rates in  $O_2$  uptake in the lung // J. Appl. Physiol. 1962. No 17(1). P. 21-27.

5. Heidelberger E., Reeves R.B.  $O_2$  transfer kinetics in a whole blood unicellular thin layer // J. Appl. Physiol. 1990. No 68. P. 1854-1864.

6. Физиология дыхания. Отв. ред. Бреслав И.С., Исаев Г.Г. СПб.: Наука, 1994. 680 с.

7. Вейбель Э.3. Морфометрия легких человека. М.: Медицина, 1970. 175 с.

8. Chakraborti S., Balakotaiah V., Bidani A. Diffusing capacity reexamined: relative roles of diffusion and chemical reaction in red cell uptake of  $O_2$ , CO, CO<sub>2</sub>, and NO // J. Appl. Physiol. 2004. No 97. P. 2284-2302.

9. Фок М.В., Грачев В.И., Зарицкий А.Р., Про-

копенко Г.А. Эритроцит как физическая система // Препринты ФИАН. М.: 1991. № 50, 51 р.

10. Колчинская А.З., Пшеничный Б.Н. и др. Моделирование динамики массопереноса газов в организме человека // Кибернетика и вычислительная техника. 1978. Вып. 41. С. 54–61.

11. **Бухаров И.3.** Система транспорта кислорода: Оптимизационно-технический подход и математическое моделирование. Автореферат дис. ... доктора технических наук. М.: 2002. 29 с.

12. **Хрущенко А.3.** Моделирование нестационарного газообмена в легких человека // Научно-технические ведомости СПбГПУ. 2006. № 6-1 (48) С. 183–188.

13. Баранов В.И., Беличенко В.М., Новосельцев С.В., Шошенко К.А. Коэффициент диффузии кислорода в мышечном волокне и факторы, на него влияющие // Физиология мышечной деятельности: Тез. докл. Междунар. конф. М.: 2000. С. 25–26.

14. **Хрущенко А.А., Арефьев К.М.** Возможности моделирования болезненных состояний легких человека // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2011. № 3 (129). С. 118–123.

15. Torre-Bueno J.R., Wagner P.D., Saltzman H.A., Gale G.E., Moon R.E. Diffusion limitation in normal humans during exercise at sea level and simulated altitude // J. Appl. Physiol. 1985. Vol. 58.  $\mathbb{N}$  3. P. 989-995.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ХРУЩЕНКО Александр Анатольевич** — ассистент кафедры «Гидроаэродинамика» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 hrushenko@mail.ru

**АРЕФЬЕВ Константин Максимович** – доктор технических наук, профессор кафедры «Гидроаэродинамика» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. 195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 garefiev@gmail.com

## *Hrushchenko A.A., Aref'ev K.M.* THE CALCULATION OF OXIGEN MASS EXCHANGE IN HUMAN LUNGS.

The article considers the impact of the diffusion capacity of the lungs to process oxygen transfer from the gas phase of the alveoli into the blood capillaries of the lungs. The main transport of oxygen in the blood takes place in a bound state with the hemoglobin of red blood cells. Therefore, the diffusion capacity

Математическое моделирование физических процессов

of the lungs to transport gases other than diffusion through tissue affects the rate of reaction of oxygen with hemoglobin and red blood cell membrane permeability. The dependence of the reaction rate of oxygen on hemoglobin oxygen tension is analyzed using various literary sources. Using a mathematical model of the lungs and experimental data taken from the literature the rate of oxygen reaction with hemoglobin was evaluated. Numerical results when compared with the experimental data showed a good result.

DIFFUSION CAPACITY, OXYGEN REACTION RATE WITH HEMOGLOBIN, PERMEABILITY OF THE ERYTHROCYTE MEMBRANE, OXYGEN TRANSFER FROM GAS PHASE INTO BLOOD.

#### REFERENCES

1. Gibson Q.H., Kreuzer F., Meda E., Roughton F.J.W. The kinetics of human hemoglobin in solution and in the red cell at 37°C. *J. Physiol. Lond.*, 1955, No. 129, pp. 65-89.

2. Grippi M.3. Patofiziologiya legkikh. Moscow, Binom, Kh.: MTK-kniga, 2005, 304 p. (rus)

3. Roughton F.J.W., Forster R.E. Relative importance of diffusion and chemical reaction rates in determining rate of exchange of gases in the human lung, with special reference to true diffusing capacity of pulmonary membrane and volume of blood in the lung capillaries. *J. Appl. Physiol.*, 1957, Vol. 2, pp. 290-302.

4. Staub N.C., Bishop J.M., Forster R.E. Importance of diffusion and chemical reaction rates in  $O_2$  uptake in the lung. *J. Appl. Physiol.*, 1962, No. 17(1), pp. 21-27.

5. Heidelberger E., Reeves R.B.  $O_2$  transfer kinetics in a whole blood unicellular thin layer. *J. Appl. Physiol.*, 1990, No. 68, pp. 1854-1864.

6. Fiziologiya dykhaniya. Otv. red. Breslav I.S. Isaev G.G. St. Petersburg, Nauka, 1994, 680 p. (rus)

7. **Veybel' E.3.** Morfometriya lyogkikh cheloveka. Moscow, Meditsina, 1970, 175 p. (rus)

8. Chakraborti S., Balakotaiah V., Bidani A. Diffusing capacity reexamined: relative roles of diffusion and chemical reaction in red cell uptake of  $O_2$ , CO, CO<sub>2</sub>, and NO. *J. Appl. Physiol.*, 2004, No. 97, pp. 2284-2302.

9. Fok M.V., Grachev V.I., Zaritskiy A.R., Prokopenko G.A. Eritrotsit kak fizicheskaya sistema. Preprinty FIAN. Moscow, 1991, No. 50, 51 p. (rus)

10. Kolchinskaya A.Z., Pshenichnyy B.N. i dr. Modelirovanie dinamiki massoperenosa gazov v organizme cheloveka. *Kibernetika i vychislitel'naya tekhnika*, 1978, Iss. 41, pp. 54-61. (rus)

11. **Bukharov I.3.** Sistema transporta kisloroda: Optimizatsionno-tekhnicheskiy podkhod i matematicheskoe modelirovanie. Avtoreferat dissertatsii na soiskanie uchenoy stepeni doktora tekhnicheskikh nauk. Moscow, 2002, 29 p. (rus)

12. **Khrushchenko A.Z.** Modelirovanie nestatsionarnogo gazoobmena v legkikh cheloveka. *St. Petersburg Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics*, 2006, No. 6-1 (48), pp. 183-188. (rus)

13. Baranov V.I., Belichenko V.M., Novosel'tsev S.V., Shoshenko K.A. Koeffitsient diffuzii kisloroda v myshechnom volokne i faktory, na nego vliyay-ushchie. Fiziologiya myshechnoy deyatel'nosti: Tez. dokl. Mezhdunar. konf. Moscow, 2000, pp. 25-26. (rus)

14. Khrushchenko A.A., Aref'ev K.M. Vozmozhnosti modelirovaniya boleznennykh sostoyaniy legkikh cheloveka. *St. Petersburg Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics.* 2011, No.3 (129), pp. 118-123. (rus)

15. Torre-Bueno J.R., Wagner P.D., Saltzman H.A., Gale G.E., Moon R.E. Diffusion limitation in normal humans during exercise at sea level and simulated altitude. *J. Appl. Physiol.* 1985. Vol. 58, No. 3, pp. 989-995.

#### THE AUTHORS

#### HRUSHCHENKO Alexander A.

St. Petersburg State Polytechnical University, 29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia hrushenko@mail.ru

#### AREF'EV Konstantin M.

St. Petersburg State Polytechnical University,29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia garefiev@gmail.com

© Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, 2014

### АТОМНАЯ ФИЗИКА, ФИЗИКА КЛАСТЕРОВ И НАНОСТРУКТУР

УДК 544.225.22+25; 544.22.022.384.3; 539.371

О.С. Лебедева, Н.Г. Лебедев

Волгоградский государственный университет

#### ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИЙ РАСТЯЖЕНИЯ И СЖАТИЯ НА ПЬЕЗОРЕЗИСТИВНОСТЬ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК И ГРАФЕНОВЫХ НАНОЛЕНТ

В работе теоретически изучено влияние деформаций растяжения и сжатия на проводящие свойства углеродных наночастиц (нанотрубок, нанолент) с учетом изменения поперечных размеров образца. Проведен аналитический расчет пьезорезистивных констант углеродных наночастиц с учетом поперечных деформаций. Показано, что тензор эластопроводимости металлических нанотрубок не зависит от их диаметра. Для полупроводниковых трубок получено монотонное возрастание продольной компоненты тензора с ростом диаметра. Показано возрастание или убывание пьезорезистивной константы полупроводниковых нанотрубок с ростом относительного растяжения или сжатия. Проведено сравнение полученных результатов с литературными данными. Дано физическое обоснование для наблюдаемых зависимостей.

ПРИБЛИЖЕНИЕ ХЮККЕЛЯ, МОДЕЛЬ ХАББАРДА, МЕТОД ФУНКЦИЙ ГРИНА, ТЕНЗОР ЭЛАСТОПРОВОДИМОСТИ.

#### Введение

Углеродные наночастицы, такие как графен, графеновые ленты и углеродные нанотрубки (УНТ) различных типов и хиральности выступают, за счет уникальных высокопроводящих и пьезорезистивных свойств, одним из основных базовых элементов при разработке пьезоэлектрических сенсоров, причем практически сразу после их открытия [1 - 3].

Электронные характеристики УНТ достаточно чувствительны и по отношению к механическим воздействиям [4 – 6]. Механические деформации наноматериалов приводят к реконструкции атомной кристаллической решетки и геометрической модификации межатомных связей, что в свою очередь способствует изменению их электронного спектра и, как следствие, проводимости. Такое явление называют пьезорезистивным эффектом, и он характеризуется тензорами пьезосопротивления, эластосопростивления и эластопроводимости [7]. Экспериментально определяются компоненты тензора эластосопротивления [2], в то время как теоретически можно рассчитать тензор эластопроводимости. Численные значения пьезорезистивных констант позволяют судить о количественном изменении проводимости наноматериалов, подвергнутых внешней механической нагрузке.

Теоретическое исследование влияния нагрузок продольного растяжения (сжатия), которые моделировались путем варьирования длин межатомных связей, на пьезорезистивные свойства углеродных наночастиц описано в работе [8]. Такой подход не отражает полной картины изменения энергетического спектра в результате указанных деформаций наночастиц. При внешних механических нагрузках изменяются не только длины связей, но и валентные углы, величина которых модифицируется в результате механического воздействия.

В статье рассматривается атомная реконструкция кристаллической решетки углеродных нанотрубок и геометрическая молификация связей между атомами углерода и валентных углов под действием упругой деформации растяжения (сжатия) с учетом изменения поперечных размеров образца. Рассчитана основная пьезорезистивная константа углеродных наночастиц - продольная компонента тензора эластопроводимости М, характеризующая изменение их проводимости в результате механических деформаций. Численные оценки пьезоэлектрических констант УНТ необходимы для количественной калибровки сенсоров на основе УНТ, работа которых основана на преобразовании механической энергии в электрическую. Изменение ширины запрещенной зоны УНТ под действием внешней механической нагрузки не дает исчерпывающей информации об изменении их проводимости, поэтому расчет тензора эластопроводимости в контексте поставленной задачи представляется актуальным.

#### Выбор модели

Моделирование геометрической структуры углеродных наночастиц (нанотрубок и графеновых лент) начинается с рассмотрения графитовой плоскости, имеющей гексагональную решетку с параметрами  $a_1 = a_2 = a = \sqrt{3}R_0 = 2,46$  Å и углом  $\alpha_0 = 60^\circ$  (рис. 1). Элементарная ячейка графитового слоя содержит два атома углерода, межатомное расстояние полагается  $R_0 = 1,44$  Å. Электронная структура углеродных нанотрубок, а также изоспектральных графеновых лент описывается, как правило, в  $\pi$ -электронном приближении Хюккеля [9] и в общем случае выражается хорошо известным соотношением [10, 11]:

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \pm \gamma_0 \{3 + 2\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_1) + 2\cos(\mathbf{k}\mathbf{a}_2) + 2\cos(\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2))\}^{1/2} =$$
  
=  $\pm \gamma_0 \left\{ 1 + 4\cos\left(\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)}{2}\right) \times (1) \right\}^{1/2} \left\{ \cos\left(\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2}\right) + 4\cos^2\left(\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)}{2}\right) \right\}^{1/2},$ 

где уровень Ферми принят за 0 эВ;  $\gamma_0 = 1,4$  эВ — интеграл перескока (матричный элемент перехода) электрона с одного узла на соседний узел недеформированной УНТ, который оценивается как резонансный параметр квантовохимического полуэмпирического метода MNDO [9]; **k** — волновой вектор, одна из компонент которого квантуется вдоль периметра нанотрубки (или ширины графеновой ленты) в зависимости от ее типа, а вторая непрерывна вдоль оси трубки.



Х

Рис. 1. Деформация растяжения углеродного гексагона для УНТтипов (*n*, 0) «zig-zag» (*a*) и (*n*, *n*) «arm-chair» ( $\delta$ ); **a**<sub>1</sub>, **a**<sub>2</sub> – векторы трансляций,  $\alpha$  – угол между ними;  $\Lambda_1 - \Lambda_3$  – векторы углеродной решетки; **F**<sub>x</sub>, **F**<sub>y</sub> – векторы растягивающей силы

Если ось УНТ выбрать вдоль направления вектора  $(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$ , то получится зигзагообразная нанотрубка (типа «zig-zag»), а если выбрать эту ось вдоль вектора  $(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)$ , то получится нанотрубка кресельного («arm-chair») типа.

Моделирование упругой механической деформации наночастицы под действием внешней силы **F**, направленной вдоль оси УНТ, осуществляется с помощью варьирования длин межатомных связей на величину их относительного удлинения  $\delta = \Delta R/R_0$  и варьирования валентных углов, что отражается в изменении параметров решетки. Геометрические преобразования углеродного гексагона кристаллической решетки деформированных УНТ двух типов показаны на рис. 1. На нем символами  $\Delta_i$  обозначены длины межатомных связей УНТ, измененные вследствие растяжения или сжатия:

$$\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta_3 = R_0(1+\delta)$$

для УНТ типа «zig-zag»;

$$\Delta_1 = R_0(1-\delta), \ \Delta_2 = \Delta_3 = R_0(1+\delta)$$

для УНТ типа «arm-chair».

За  $R_0$  принято межатомное расстояние в недеформированных УНТ. Векторы основных трансляций гексагональной решетки с учетом принятых обозначений определяются следующим образом:

 $\mathbf{a}_1 = \mathbf{\Delta}_2 - \mathbf{\Delta}_1; \ \mathbf{a}_2 = \mathbf{\Delta}_3 - \mathbf{\Delta}_1.$ 

Буквой  $\alpha$  обозначен угол между векторами основных трансляций с исходным значением  $\alpha_0 = 60^\circ$ , модифицированный деформацией.

Изменение поперечных размеров (диаметр и ширина) УНТ и графеновых лент в результате деформации учитывается путем модификации модуля хирального вектора  $C_h = na_1 + ma_2$  по следующей формуле:

$$C_h = (1 - v\delta) C_{0h},$$
 (2)

где n, m — индексы хиральности (целые числа), с помощью которых осуществляется классификация УНТ типа (n, m); v — коэффициент Пуассона, значение которого, в соответствии с экспериментальными данными [4], равно 0,19 и 0,27 для УНТ типов «arm-chair» и «zig-zag» соответственно;  $C_{0h}$  — модуль хирального вектора недеформированной УНТ типа (*n*, *m*),

$$C_{0h} = a_0\sqrt{n^2 + m^2 + nm}$$

 $(a_0 = \sqrt{3}R_0 -$ постоянная решетки недеформированной УНТ).

С учетом изложенного выше и выбора системы координат, показанной на рис. 1, аргументы тригонометрических функций в спектрах (1) деформированных УНТ преобразуются к следующему виду:

1) для УНТ типа (n, 0) «zig-zag» -

$$\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_{1}+\mathbf{a}_{2})}{2} = \frac{\mathbf{k}_{x}(\mathbf{a}_{1}+\mathbf{a}_{2})}{2} = k_{x}R_{0}(1+\delta)(1+\cos\alpha),$$

 $k_x$  ∈ зоне Бриллюэна;

$$\frac{\mathbf{k}(\mathbf{a}_{1} - \mathbf{a}_{2})}{2} = \frac{\mathbf{k}_{y}(\mathbf{a}_{1} - \mathbf{a}_{2})}{2} =$$
$$= k_{y}R_{0}(1 + \delta)\sin\alpha = \frac{\pi q}{n}, \quad q = 1, ..., n,$$
$$\sin\alpha = \left(\frac{1 - v\delta}{1 + \delta}\right)\cos\left(\frac{\alpha_{0}}{2}\right); \quad (3)$$

2) для УНТ типа (*n*, *n*) «arm-chair» УНТ –

$$\frac{\mathbf{k}_{x}(\mathbf{a}_{1}+\mathbf{a}_{2})}{2} = k_{x}R_{0}(1+\delta)\frac{1+\cos\alpha}{2} \times \left[1+\sqrt{1+\frac{2}{1+\cos\alpha}\left(\left(\frac{1+\delta}{1-\delta}\right)^{2}-1\right)}\right] = \frac{\pi q}{n}, q = 1,...,n;$$
$$\frac{\mathbf{k}_{y}(\mathbf{a}_{1}-\mathbf{a}_{2})}{2} = 2k_{y}R_{0}(1-\delta)\sin\alpha \times 1$$

$$\times \left[1 + \sqrt{1 + \frac{2}{1 + \cos \alpha} \left( \left(\frac{1 + \delta}{1 - \delta}\right)^2 - 1 \right)} \right],$$

 $k_{v} \in$  зоне Бриллюэна;

$$\cos\frac{\alpha}{2} = \frac{1}{2\left(\frac{1-\nu\delta}{1+\delta}\right)\cos\left(\frac{\alpha_0}{2}\right)} \times \left[\left(\frac{1-\nu\delta}{1+\delta}\right)^2\cos^2\left(\frac{\alpha_0}{2}\right) + 1 - \left(\frac{1+\delta}{1-\delta}\right)^2\right].$$
(4)

С учетом соотношений (3) и (4) преобразованный энергетический спектр деформированных УНТ «zig-zag» и «arm-chair» можно представить в виде:

$$\varepsilon_{z}(\mathbf{k}) = \pm \gamma \left( 1 \pm 4 \cos\left(\frac{\pi q}{n}\right) \times (5) \times \cos[k_{x}R_{0}(1+\delta)(1+\cos\alpha)] + 4\cos^{2}\left(\frac{\pi q}{n}\right) \right)^{\frac{1}{2}};$$

$$\varepsilon_{a}(\mathbf{k}) = \pm \gamma \left( 1 \pm 4\cos\left[\frac{\mathbf{k}_{y}(\mathbf{a}_{1}-\mathbf{a}_{2})}{2}\right] \times (6) \times \cos\left(\frac{\pi q}{n}\right) + 4\cos^{2}\left(\frac{\mathbf{k}_{y}(\mathbf{a}_{1}-\mathbf{a}_{2})}{2}\right) \right)^{\frac{1}{2}},$$

где аргументы в выражении (6) определяются соотношениями (4), знак  $\pm$  под корнем появляется вследствие того, что в элементарной ячейке УНТ и нанолент конечной ширины содержится 4 атома углерода.

Прыжковый интеграл у также изменяется вследствие изменения межатомного расстояния. Это можно учесть разложением в ряд до второго слагаемого в силу малости относительной деформации δ:

$$\gamma \approx \gamma_0 + R_0 \frac{\partial \gamma_0}{\partial R} \delta.$$
 (7)

С учетом зависимости интеграла перескока  $\gamma_0$  от длины связи *R* градиент  $d\gamma_0/dR$  можно оценить по следующей формуле:

$$\frac{\partial \gamma_0}{\partial R} = \beta_{\rm C} \, \frac{\partial}{\partial R} \, S_{pp}, \qquad (8)$$

где  $\beta_{\rm C}$  — резонансный параметр метода MNDO для атома углерода;  $S_{pp}$  — интеграл перекрывания атомных *p*-орбиталей соседних атомов углерода.

После взятия производной и последующего численного интегрирования по методу Симпсона [12] градиент принимает значение  $d\gamma_0/dR \approx 2,42$  эB/Å.

Для расчета основной пьезорезистивной константы и характеристики пьезорезистивного эффекта — тензора эластопроводимости воспользуемся его определением [7]:

$$\frac{\Delta\sigma_{\alpha\beta}}{\langle\sigma\rangle} = \sum_{nm} m_{\alpha\beta,nm} \varepsilon_{nm}, \qquad (9)$$

где  $m_{\alpha\beta,nm}$  — компоненты тензора эластопроводимости;  $\varepsilon_{nm}$  — компоненты тензора де-

формации;  $\Delta \sigma_{\alpha\beta}$  — изменение компоненты тензора электропроводности вследствие деформаций;  $\alpha$ ,  $\beta$ , n, m = x, y, z.

Поскольку симметрия кристалла может понижать число независимых компонент тензоров, то в случае рассмотрения УНТ и графеновых нанолент как одномерных объектов будет произведен расчет только продольной компоненты тензора вдоль оси нанотрубки или длины наноленты соответственно:

 $m_{_{_{XX,XX}}}=M,\ \varepsilon_{_{_{XX}}}=\delta$ для УНТ типа «zig-zag»;

 $m_{_{yy,yy}} = M, \epsilon_{_{yy}} = \delta$ для УНТ типа «arm-chair».

Удельная проводимость деформированной и недеформированной УНТ вычислялась с использованием формулы Кубо – Гринвуда [13] методом функций Грина [14] в рамках модели Хаббарда [15], без учета кулоновского взаимодействия электронов на одном узле. Подробный аналитический вывод расчетной формулы для продольной проводимости УНТ был описан в работе [8].

Окончательная формула для расчета проводимости углеродных наночастиц в однозонном приближении может быть представлена в виде:

$$\sigma_{\alpha\beta} = 2 \frac{i\pi e^2}{k_{\rm B}TV} \sum_{k,\sigma} \sum_{q,\lambda} v_{\alpha}(\mathbf{k}) v_{\beta}(\mathbf{q}) \langle n_{k\sigma} \rangle \times \\ \times [\langle n_{q\lambda} \rangle + \delta_{kq} \delta_{\lambda\sigma} (1 - \langle n_{k\sigma} \rangle)], \qquad (10)$$

где **k**, **q** — волновые векторы, лежащие в пределах зоны Бриллюэна;  $\sigma$ ,  $\lambda$  — спиновые индексы; e — элементарный заряд;  $k_{\rm B}$  — константа Больцмана; T — абсолютная температура; V — объем кристалла;  $v_{\alpha}(\mathbf{k}) = \nabla_{\alpha} \varepsilon(\mathbf{k})/\hbar$  — компоненты скорости электрона в зоне Бриллюэна,  $\langle n_{k\sigma} \rangle$  — распределение Ферми — Дирака:

$$\langle n_{k\sigma} \rangle = \left[ e^{\frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{k_{\mathrm{B}}T}} + 1 \right]^{-1},$$
 (11)

 $\varepsilon(\mathbf{k})$  — дисперсионные соотношения деформированных или недеформированных УНТ типов «zig-zag» и «arm-chair», которые выражаются формулами (5) и (6) соответственно.

#### Обсуждение результатов

Анализ изменения зонной структуры углеродных нанотрубок, деформированных растяжением и сжатием, подробно проведен в работе [8]. На рис. 2 показан только модифицированный (вследствие 25 %-х деформаций растяжения) энергетический спектр УНТ двух структурных типов: «zigzag» (9, 0) и (10, 0), а также «arm-chair» (5, 5). Качественных изменений, по сравнению с зонной структурой недеформированных УНТ [16], на рис. 2 не наблюдается. Количественный же анализ показывает уменьшение наклона дисперсионных кривых к оси абсцисс и сужение зоны проводимости (3П) и валентной зоны (ВЗ) в случае сжатия и увеличение наклона и уширение ЗП и ВЗ при деформации растяжения.

Подставляя выражения (5) и (6) в формулы (10) и (11), а затем в выражение (9), можно провести теоретический расчет продольной компоненты тензора эластопроводимости M для УНТ разных типов с учетом деформаций в поперечном направлении.

В таблице представлены полученные расчетные значения величины M для ряда углеродных нанотрубок при различных величинах относительной деформации растяжения (сжатия)  $\delta$ . Результаты были получены при температуре T = 300 К.

Из данных таблицы следует, что для УНТ типа «arm-chair» при наложении деформации растяжения значение продольной компоненты тензора является положительным; это означает одинаковое увеличение проводимости для всех трубок, т. е. проводимость нанотрубки не зависит от ее диаметра и увеличивается с ростом модуля относительной деформации растяжения. Деформация сжатия приводит к уменьшению величины М с ростом модуля б. Исключение составляет случай максимальной деформации  $\delta = 0.25$ , которая приводит к росту пьезорезистивной константы при сильном сжатии. Такое поведение обусловлено количественным изменением зонной структуры, описанным выше; его следствием является изменение плотности состояний с ростом величины деформации, особенно в области высоких энергий.



Рис. 2. Дисперсионные соотношения для различных типов УНТ, деформированных растяжением величиной  $\delta = 25$  %, с учетом поперечных деформаций; типы УНТ:  $a - (10, 0), \delta - (9, 0), s - (5, 5)$ 

Тепловые флуктуации приводят к заполнению зоны проводимости УНТ электронами, согласно функции распределения Ферми — Дирака. Изменение плотности состояний ведет к изменению удельной проводимости, учитывающей все возмож-

Таблица

	М								
IИП УНІ ( <i>n</i> , <i>m</i> )	$\delta_2 = 0,035$	$\delta_3 = 0,069$	$\delta_4 = 0,104$	$\delta_{end} = 0,25$					
$Pастяжение (\delta > 0)$									
(5, 5), (6, 6), (9, 9), (10, 10)	4,03	4,13	4,24	11,73					
(6, 0), (9, 0), (12, 0),	4,85	4,95	5,06	5,54					
(4, 0)	-24,01	-1,11	-9,58	-4,00					
(10, 0)	-14,47	-10,94	-8,48	-3,98					
(20, 0)	-7,60	-6,72	-5,92	-3,65					
(50, 0)	-1,21	-1,36	-1,47	-1,63					
(100, 0)	1,13	0,97	0,83	0,36					
<i>Сжатие</i> (δ < 0)									
(5, 5), (6, 6), (9, 9), (10, 10)	3,80	3,69	3,58	3,97					
(6, 0), (9, 0), (12, 0),	4,69	4,66	4,88	_					
(4, 0)	-147,07	-489,50	$-1,79\cdot10^{3}$	_					
(10,0)	-28,18	-39,80	-52,90	_					
(20, 0)	-9,59	-10,34	-9,62	_					
(50, 0)	-0,69	-0,22	0,87	_					
(100, 0)	1,57	1,89	2,66	_					

Полученные расчетные значения продольной компоненты тензора эластопроводимости УНТ различных типов в зависимости от относительной деформации  $\delta$  с учетом поперечной деформации

Примечание. Все типы УНТ (n, 0) – «zig-zag», a (n, n) – «arm-chair».

ные заполненные электронные состояния, а следовательно, ведет к симбатному росту или снижению величины M с увеличением или уменьшением  $\delta$ .

Для всех проводящих УНТ типа «zig-zag» (6, 0), (9, 0), (12, 0), ... величина тензора эластопроводимости также положительна и не зависит от диаметра трубки, но оказывается немногим больше, чем у проводящих УНТ типа «arm-chair», в большинстве случаев на величину приблизительно 0,8 (растяжение) и в среднем на 1,0 (сжатие). Количественный анализ зонной структуры проводящих УНТ показывает, что плотность низкоэнергетических состояний у зигзагообразных нанотрубок немного выше, чем такая же плотность у УНТ кресельного типа, поэтому и наблюдается незначительная разница пьезорезистивных констант у проводящих УНТ двух разных структурных модификаций.

Практически у всех рассмотренных полупроводниковых зигзагообразных УНТ (4, 0), (10, 0), (20, 0), (50, 0) пьезорезистивная константа M — отрицательная (см. таблицу), что свидетельствует об уменьшении удельной проводимости наночастицы вследствие деформации. Кроме того, эта константа увеличивается (уменьшается) с ростом деформации растяжения (сжатия) и возрастает с ростом диаметра трубки. Исключение составляет УНТ большого диаметра, в данном случае (100, 0), у которой величина M положительна и уменьшается (увеличивается) с ростом деформации растяжения (сжатия).

Увеличение (уменьшение по модулю) величины M с ростом относительной деформации растяжения  $\delta$  объясняется увеличением энергетической щели в электронном спектре. Плотность электронных состояний вблизи уровня Ферми, в запрещенной зоне, равна нулю, поэтому основной вклад в удельную проводимость вносят состояния зоны проводимости: заселенность последней экспоненциально убывает в соответствии с фермиевской функцией распределения. Для полупроводниковых УНТ, так же как и для проводящих, наблюдается эффект сжатия зоны проводимости, который ведет к росту плотности состояний. Поэтому, несмотря на увеличение ширины запрещенной зоны, которое должно уменьшать проводимость вещества, возрастание плотности состояний компенсирует изменение величины Е<sub>а</sub> и в результате приводит к росту проводимости и константы М. Для трубки большого диаметра (100, 0) определяющим для проводящих свойств является увеличение ширины запрещенной зоны, которая обратно пропорциональна диаметру трубки. Поэтому поведение пьезорезистивной константы отличается от остальных рассмотренных трубок.

Важно отметить, что на данный момент остается открытым вопрос о «критическом» значении диаметра УНТ, т. е. значении, начиная с которого изменяется тенденция в поведении зависимости константы *M* от величины относительной деформации.

Увеличение (уменьшение по модулю) компоненты тензора эластопроводимости с ростом диаметра УНТ можно объяснить следующим образом. В зоне проводимости нанотрубок с увеличением их диаметра растет число дисперсионных кривых, повышающих плотность электронных состояний. Поэтому малые деформации приводят в целом к незначительному изменению плотности состояний, по сравнению с недеформированной УНТ и, как следствие, приводит к малому изменению удельной проводимости. Это и находит отражение в описанном поведении величины *М*.

Сравнение представленных результатов с полученными ранее в работе [8], где не были учтены поперечные деформации, показывает, что значения пьезорезистивных констант в нашем случае оказываются больше для «металлических» УНТ примерно на 11 %, а для полупроводниковых эта разница увеличивается с ростом их диаметра приблизительно от 1 до 50 % для рассмотренного ряда УНТ (см. таблицу).

Количественные оценки тензора эластопроводимости ОУНТ и зависимость его величины от относительной деформации, приведенные в работе, находятся в согласии с экспериментальными данными по калибровочным факторам, полученными для пленок из углеродных нановолокон [2, 17] и многослойных углеродных нанотрубок [18], а также для типичных полупроводников, например, для пленок поликристаллического кремния *p*-типа [19].

Представленные выше результаты расчета продольной компоненты тензора эластопроводимости углеродных нанотрубок могут быть распространены и на изоспектральные графеновые ленты, из которых путем сворачивания в цилиндр получаются рассмотренные нанотрубки.

#### Заключение

Сформулируем основные результаты и выводы проведенного теоретического исследования.

1. В работе выполнено теоретическое моделирование изменения зонной структуры деформированных углеродных нанотрубок и нанолент в  $\pi$ -электронном приближении, вызванного деформацией сжатия и растяжения, с учетом поперечной деформации образца; при этом были выбраны зигзагообразные и кресельные нанотрубки, а также изоспектральные графеновые наноленты.

2. Кратко проанализировано изменение электронного спектра проводящих и полупроводниковых нанотрубок и нанолент вследствие деформаций растяжения и сжатия.

3. В рамках модели Хаббарда с использованием метода функций Грина проведен теоретический расчет продольной компоненты тензора эластопроводимости для зигзагообразных и кресельных углеродных нанотрубок и изоспектральных графеновых нанолент.

4. Показано, что тензор эластопроводимости металлических нанотрубок не зависит от их диаметра. А для полупроводниковых трубок получено монотонное возрастание продольной компоненты тензора с ростом диаметра. Показано возрастание или убывание пьезорезистивной константы полупроводниковых нанотрубок с ростом относительного растяжения или сжатия. Проведено сравнение полученных результатов с литературными данными. Дано фи-

1. Roman C., Helbling Th., Hierold Ch. Singlewalled carbon nanotubes sensors concepts. In book «Springer Handbook of Nanotechnology. Part B». Heidelberg: Springer Berlin, 2010. 403 p.

2. **Obitayo W., Liu T.** A review: carbon nanotubebased piezoresistive strain sensors// Journal of Sensors. 2012. Vol. 2012, p. 652438 (1–15).

3. Brian R. Burg, Helbling Th., Hierold Ch., Poulikakos D. Piezoresistive pressure sensors with parallel integration of individual single-walled carbon nanotubes// J. Appl. Phys.2011. Vol. 109. No. 6. P. 064310 (1-6).

4. **Rafii-Tabar H.** Computation physics of carbon nanotubes. New York: Cambridge University Press, 2008. 493 p.

5. Carbon nanotubes / Edited by J. M. Marulanda. Vukovar: In-Tech, 2010. 776 p.

6. **Елецкий А.В.** Механические свойства углеродных наноструктур и материалов на их основе // УФН. 2007. Т. 177. № 3. С. 233–274.

7. Бир Г.Л., Пикус Г.Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1972. 584 с.

8. Ляпкосова О.С., Лебедев Н.Г. Пьезорезистивный эффект в однослойных углеродных нанотрубках // Физика твердого тела. 2012. Т. 54 № 7. С. 1412–1416.

9. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, 2001. 519 с.

10. **Mintmire J.W., White C.T.** Electronic and structural properties of carbon nanotubes // Carbon.

зическое обоснование для наблюдаемых зависимостей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 13-03-97108).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1993. Vol. 33. No. 7, pp. 893-902.

11. **Saito R., Dresselhaus M.S., Dresselhaus G.** Physical properties of carbon nanotubes. London: Imperial College Press, 1999. 251 p.

12. Бахвалов Н.С. Численные методы (анализ, алгебра, обыкновенные дифференциальные уравнения). М.: Наука, 1975. 632 с.

13. **Маделунг О-В.** Физика твердого тела. Т. 3. Локализованные состояния. М.: Наука, 1985. 182 с.

14. **Тябликов С.В.** Методы квантовой теории магнетизма. М.: Наука, 1975. 528 с.

15. Изюмов Ю.А., Чащин Н.И., Алексеев Д.С. Теория сильно коррелированных систем. Метод производящего функционала. М.: Изд-во «Регулярная и хаотическая динамика», 2006. 384 с.

16. **Харрис П.** Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века. М.: Техносфера, 2003. 336 с.

17. Yong Li, Wanlu Wang, Kejun Liano, Chenguo Hu, et. al. Piezoresistive effect in carbon nanotube films// Chinese Science Bulletin. 2003. Vol. 48. No. 2, pp. 125-127.

18. Mohamed N.M., Kou L.M. Piezoresistive effect of aligned multiwalled carbon nanotubes array // J. Appl. Sci. 2011. Vol. 11. No. 8, pp. 1386-1390.

19. Гридчин В.А., Любимский В.М. Пьезосопротивление в пленках поликристаллического кремния *p*-типа // Физика и техника полупроводников. 2004. Т. 38. № 8. С. 1013–1017.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ЛЕБЕДЕВА Ольга Сергеевна** — младший научный сотрудник кафедры теоретической физики и волновых процессов Волгоградского государственного университета.

400062, Россия, г. Волгоград, Университетский пр., 100 lyapkosovaolga@mail.ru

**ЛЕБЕДЕВ Николай Геннадьевич** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики и волновых процессов Волгоградского государственного университета. 400062, Россия, г. Волгоград, Университетский пр., 100

lebedev.ng@mail.ru

*Lebedeva O.S., Lebedev N.G.* THE INFLUENCE OF THE STRETCHING AND COMPRESSION DEFORMATIONS ON THE PIEZORESISTANCE OF THE CARBON NANOTUBES AND GRAPHENE NANORIBBONS.

In this article the influence of the stretching and compression on the conducting properties of carbon

nanoparticles (nanotubes, nanoribbons) accounting the changes in the transverse dimensions of the sample is studied theoretically. The analytical calculation of piezoresistive constants of carbon nanoparticles with the account of transverse strain was carried out. It is shown that the elastoconductivity tensor of metallic nanotubes is independent of its diameter. The monotonic increase in the longitudinal component of the tensor with the increasing its diameters of semiconducting nanotubes was obtained. It is shown that increasing or decreasing of the piezoresistive constant of semiconducting nanotubes with the relative tension or compression strain. The results are compared with the literature data. A physical justification of the observed dependence was described.

HUCKEL APPROXIMATION, HUBBARD'S MODEL, GREEN'S FUNCTION METHOD, ELASTOCONDUCTIVITY TENSOR.

#### REFERENCES

1. Roman C., Helbling Th., Hierold Ch. Singlewalled carbon nanotubes sensors concepts. In book «Springer Handbook of Nanotechnology. Part B». Heidelberg: Springer Berlin, 2010. 403 p.

2. **Obitayo W., Liu T.** A Review: Carbon Nanotube-Based Piezoresistive Strain Sensors. *Journal of Sensors,* 2012, Vol. 2012, P. 652438 (1-15).

3. Brian R. Burg, Helbling Th., Hierold Ch., Poulikakos D. Piezoresistive pressure sensors with parallel integration of individual single-walled carbon nanotubes. *J. Appl. Phys.*, 2011, Vol. 109, No. 6, P. 064310 (1-6).

4. **Rafii-Tabar H.** Computation physics of carbon nanotubes. New York: Cambridge University Press, 2008. 493 p.

5. Carbon nanotubes / Edited by Jose Mauricio Marulanda. Vukovar: In-Tech, 2010. 776 p.

6. **Eletskii** A.V. Mekhanicheskie svoystva uglerodnykh nanostruktur i materialov na ih osnove *// UFN*. 2007. Vol. 177. No. 3. S. 233-274.

7. **Bir G.L., Pikus G.Ye.** Simmetriya i deformatsionnye effekty v poluprovodnikah. M.: Nauka, 1972. 584 s.

8. **Lyapkosova O.S., Lebedev N.G.** Pyezorezistivnyi effekt v odnosloynyh uglerodnyh nanotrubkah // *Fizika tverdogo tela.* 2012. Vol. 54 No. 7. C. 1412- 1416.

9. **Stepanov N.F.** Kvantovaya mehanika i kvantovaya himiya. M.: Mir, 2001. 519 s.

10. Mintmire J.W., White C.T. Electronic and

structural properties of carbon nanotubes. *Carbon*, 1993, Vol. 33, No. 7, pp. 893-902.

11. **Saito R., Dresselhaus M.S., Dresselhaus G.** Physical properties of carbon nanotubes. London: Imperial College Press, 1999. 251 p.

12. **Bahvalov N.S.** Chislennye metody (analiz, algebra, obyknovennye differentsialnye uravneniya). M.: Nauka, 1975. 632 c.

13. **Madelung O-V.** Fizika tverdogo tela. T. 3. Lokalizovannye sostoyaniya. M.: Nauka, 1985. 182 s.

14. **Tyablikov S.V.** Metody kvantovoy teorii magnetizma. M.: Nauka, 1975. 528 s.

15. **Izyumov Yu.A., Chashchin N.I., Alekseyev D.S.** Teoriya silno korrelirovannyh sistem. Metod proizvodyaschego funktsionala. M.: Izd-vo «Regulyarnaya i haoticheskaya dinamika», 2006. 384 s.

16. **Harris P.** Uglerodnye nanotruby i rodstvennyye struktury. Novye materialy XXI veka. M.: Tehnosfera, 2003. 336 s.

17. Yong Li, Wanlu Wang, Kejun Liano, Chenguo Hu, et. al. Piezoresistive effect in carbon nanotube films. *Chinese Science Bulletin*. 2003, Vol. 48, No. 2, pp. 125-127.

18. Mohamed N.M., Kou L.M. Piezoresistive effect of aligned multiwalled carbon nanotubes array. *J. Appl. Sci.*, 2011, Vol. 11, No. 8, pp. 1386-1390.

19. Gridchin V.A., Lyubimskiy V.M. Pyezosoprotivleniye v plenkah polikristallicheskogo kremniya *p*-tipa // *Fizika i tekhnika poluprovodnikov*. 2004. Vol. 38. No. 8. S. 1013-1017.

#### THE AUTHORS

LEBEDEVA Olga S.

Volgograd State University, 100 University Avenue, Volgograd, 400062, Russia. lyapkosovaolga@mail.ru

#### **LEBEDEV** Nikolay G.

Volgograd State University, 100 University Avenue, Volgograd, 400062, Russia. lebedev.ng@mail.ru

### Математическая физика

УДК 519.632

Е.А. Канунникова

Белгородский государственный национальный исследовательский университет

#### АНАЛИТИКО-ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ТРЕХМЕРНЫХ ВНЕШНИХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ

В статье рассматривается аналитико-численный метод решения внешних краевых задач для эллиптических уравнений с граничными условиями Дирихле и Неймана в трехмерном полупространстве. Приводится алгоритм решения. ВНЕШНИЕ КРАЕВЫЕ ЗАДАЧИ, ТРЕХМЕРНОЕ ПОЛУПРОСТРАНСТВО, ЭЛЛИПТИЧЕ-СКИЕ УРАВНЕНИЯ.

Аналитическое решение внешних краевых задач существует только для узкого круга их постановок [1], что приводит к необходимости использования численных методов. В свою очередь применение численных методов осложняется необходимостью учета граничного условия на бесконечности [2] или задания граничных условий на внешней границе расчетной области, не содержащейся в исходной постановке задачи [3]. Это приводит к необходимости разработки и развития методов численного решения внешних краевых задач в этих условиях. Перспективным является подход [4, 5], позволяющий сводить неограниченное пространство к конечной области (метод инверсии). Граничное условие на бесконечности при этом учитывается следующим образом.

Пусть G — конечная область, ограниченная замкнутой поверхностью  $\Sigma$ ,  $G_e$  — неограниченная область, границей которой является поверхность  $\Sigma$ ,  $\mathbb{R}^3 = G \cup \Sigma \cup G_e$  — все пространство. В область  $G_e$  добавляется сфера S, причем  $\Sigma$  целиком лежит внутри S, отсюда  $G_e = D_S \cup S \cup D_{\infty}$ ,  $D_S$  — конечная область, ограниченная замкнутыми поверхностями  $\Sigma$  и S, а S является границей неограниченной области  $D_{\infty}$ .

Согласно аналитико-численному методу инверсии, неограниченное трехмерное пространство

$$\mathbb{R}^3 = G \cup \Sigma \cup G_e, \ G_e = D_S \cup S \cup D_e$$

преобразуется в конечную двусоставную область

$$D_3 = G \cup \Sigma \cup \widetilde{D}_3, \ \ \widetilde{D}_3 = D_S \cup S \cup D^*,$$

где  $D^*$  — конечная область, представляющая собой отображение неограниченной области  $D_{\infty}$ .

Аналогично преобразуется трехмерное полупространство

$$\mathbb{R}^{3}_{1/2} = G \cup \Sigma \cup \Xi^{1}_{3} \cup G^{1/2}_{e},$$
$$G^{1/2}_{e} = D^{1/2}_{S} \cup S^{1/2} \cup D^{1/2}_{\infty}$$

в конечную область

$$D_3^{1/2} = G \cup \Sigma \cup \Xi_3^1 \cup \tilde{D}_3^{1/2},$$
  
 $\tilde{D}_3^{1/2} = D_S^{1/2} \cup S^{1/2} \cup D_{1/2}^*.$ 

Граница  $\Xi_3^1$  проходит через геометрический центр двусоставной области  $D_3$ , деля ее пополам.

Этот этап предполагает использование аналитических преобразований, реализация которых позволяет в дальнейшем применять стандартные приемы и методы численного анализа на основе сеточных моделей. Таким образом, предполагается применение идеологии аналитико-численных процессов. Эти процедуры будут обладать спецификой в зависимости от типа исходной задачи. Целью данной работы является развитие аналитико-численного метода для решения эллиптических внешних краевых задач с граничными условиями Дирихле и Неймана в трехмерном полупространстве.

Внешняя краевая задача Дирихле для уравнения Лапласа в трехмерном пространстве состоит в следующем [1]. Требуется найти функцию u, непрерывную в зам-кнутой области  $G_e \cup \Sigma$ , удовлетворяющую уравнению Лапласа

$$\Delta u = 0 \quad \mathbf{B} \quad G_e, \tag{1}$$

непрерывно примыкающую к граничному условию

$$u|_{\Sigma} = \varphi_1(P), \ P \in \Sigma$$
 (2)

и равномерно стремящаяся к нулю на бес-конечности

$$u(M) \to 0$$
 при  $M \to \infty$ . (3)

Таким образом, первая внешняя краевая задача для случая трех независимых переменных (1) - (3), согласно методу инверсии, принимает вид:

$$\begin{cases} \Delta u = 0 \text{ B } \tilde{D}_{3}; \\ u|_{\Sigma} = \phi_{1}(P), P \in \Sigma; \\ u(M) = 0, M \in D^{*}. \end{cases}$$

$$(4)$$

Если замкнутых поверхностей несколько и их можно представить с физической точки зрения как систему тел, в которой



Схематическое изображение полупространства  $\mathbb{R}^3_{1/8}$ 

есть граница  $\Xi_3^1$  геометрически правильной формы, проходящая между положительно и отрицательно заряженными телами, то мы имеем задачу в полупространстве, задавая на границе  $\Xi_3^1$  однородное условие первого рода.

Значит, внешняя задача Дирихле (1) – (3) с учетом выражений

$$u\Big|_{\Sigma_1} = \varphi_2(P), \ P \in \Sigma_1;$$
  

$$u\Big|_{\Sigma_2} = -\varphi_2(P), \ P \in \Sigma_2$$
(5)

принимает следующий вид:

$$\begin{cases} \Delta u = 0 \text{ в } G_e^{1/2}; \\ u|_{\Sigma_1} = \varphi_2(P), P \in \Sigma_1; \\ u|_{\Xi_3^1} = 0; \\ u(M) \to 0 \text{ при } M \to \infty. \end{cases}$$
(6)

Согласно аналитико-численному методу инверсии, получаем внешнюю задачу Дирихле в полупространстве следующего вида:

$$\begin{cases} \Delta u = 0 \text{ B } \tilde{D}_{3}^{1/2}; \\ u|_{\Sigma_{1}} = \varphi_{2}(P), P \in \Sigma_{1}; \\ u|_{\Xi_{3}^{1}} = 0; \\ u(M) = 0, M \in D_{1/2}^{*}. \end{cases}$$
(7)

При наличии симметрии в задаче рассматривается часть области  $D_3$ , и при этом на границе задается однородное условие Неймана. Так, опираясь на систему (7) и с учетом симметрии относительно поверхностей  $\Xi_3^3$  и  $\Xi_3^2$  (см. рисунок), имеем:

$$\begin{vmatrix} \Delta u = 0 \ B \ \tilde{D}_{3}^{1/8} = D_{S}^{1/8} \cup S^{1/8} \cup D_{1/8}^{*}; \\ u|_{\Sigma_{3}} = \varphi_{3}(P), P \in \Sigma_{3}; \\ u|_{\Sigma_{4}} = \varphi_{4}(W), W \in \Sigma_{4}; \\ u|_{\Xi_{3}^{1}} = 0; u_{x}|_{\Xi_{3}^{2}} = 0; \\ u_{y}|_{\Xi_{3}^{2}} = 0; u(M) = 0; M \in D_{1/8}^{*}, \end{aligned}$$

$$(8)$$

при этом область  $D_S^{1/8}$  и  $D_{1/8}^*$  является восьмой частью сферы *S*.

Итак, на основе аналитического преобразования внешняя краевая задача сводится к внутренней, далее строится разностная задача одним из сеточных методов [6–8].
Рассмотренная процедура реализации аналитико-численного метода при решении внешних краевых задач в трехмерном полупространстве сводит задачу к возможности использования традиционных приемов и метолов численного анализа.

Описанный аналитико-численный метод, характеризующийся простотой реализации, позволяет решать принципиально

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Изд-во МГУ, 1999. 798 c.

2. Калиткин Н.Н., Альшин А.Б., Альшина Е.А., Рогов Б.В. Вычисления на квазиравномерных сетках. М.: Физматлит, 2005. 224 с.

3. Рябенький В.С. Метод разностных потенциалов и его приложения. М.: Физматлит, 2002. 420 c.

4. Канунникова Е.А. Математическое моделирование электрических полей методом инверсии: монография. Белгород: Изд-во БГТУ, 2010. 92 с.

5. Канунникова Е.А. Об эффективном подходе моделирования стационарных физических полей в неограниченном пространстве // Научные ведомости Белгородского государственного

новые задачи, требующие значительных вычислительных затрат и высокой точности решения.

Аналитико-численный метод приводит внешнюю задачу в трехмерном полупространстве к виду, поддающемуся более простому численному решению, чем обеспечивает усовершенствование известных методов.

университета. История, политология, экономика, информатика. 2013. № 8 (151). Вып. 26/1. C. 108-111.

6. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. М.: Наука, 1978. 312 c.

7. Калиткин Н.Н. Численные методы. М.: Наука, 1978. 512 с.

8. Дедюлин С.К., Канунникова Е.А., Корсунов Н.И. Анализ возможности сокращения общего времени работы алгоритма решения дифференциальных уравнений методом конечных элементов // Научные ведомости Белгородского государственного университета. История, политология, экономика, информатика. 2012. №13 (132). Вып. 23/1. С. 160-165.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ

КАНУННИКОВА Елена Александровна – кандидат технических наук, докторант кафедры математического и программного обеспечения информационных систем Белгородского государственного национального исследовательского университета.

308015, Россия, г. Белгород, ул. Победы, 85 kanunnikova@bsu.edu.ru

# Kanunnikova E.A. ANALYTIC-NUMERICAL METHOD TO SOLVE 3D EXTERIOR BOUNDARY PROBLEMS FOR ELLIPTIC EQUATIONS

The paper considers analytic-numerical method to solve 3D exterior problems for elliptic equations under Dirichlet and Neumann boundary conditions in half-space. The solution algorithm is concerned. EXTERIOR BOUNDARY PROBLEMS, 3-D HALF-SPACE, ELLIPTIC EQUATIONS.

#### REFERENCES

1. Tikhonov A.N., Samarsky A.A. Equations of mathematical physics. Moscow: MSU Publishing House, 1999. 798 p. (rus)

2. Kalitkin N.N., Alshin A.B., Alshina E.A., Rogov B.V. Calculus using semi-uniform net. Moscow : Phizmatlit, 2005. 224 p. (rus)

3. Raybenky V.S. Method of difference potentials and its sphere of application. Moscow: Phizmatlit, 2002. 420 p. (rus)

4. Kanunnikova E.A. Mathematical modelling of electric fields using by inversion method. Monograph. Belgorod: «BSTU» Publishing House, 2010. 92 p. (rus)

5. Kanunnikova E.A. On effective approach to simulate stationary physical fields in an infinite domain // Belgorod State University Scientific Bulletin. History, Political Science, Economics, Information Technologies. 2013. No. 8 (151). Iss. 26/1. pp. 108-111. (rus)

6. Samarsky A.A., Nikolaev E.S. Methods of net equation solution. Moscow: Nauka, 1978. 312 p. (rus)

7. Kalitkin N.N. Numerical methods. Moscow: Nauka, 1978. 512 p. (rus)

8. Dedyulin S.K., Kanunnikova E.A., Korsunov N.I. Analysis of reducing algorithm total time possibility to solve differential equations by finite element method // Belgorod State University Scientific Bulletin. History, Political Science, Economics, Information Technologies. 2012. No.13 (132). Iss. 23/1. pp. 160-165. (rus)

#### THE AUTHOR

KANUNNIKOVA, E A. Belgorod State National Research University, 308015, Pobeda Str. 85, Belgorod, Russia kanunnikova@bsu.edu.ru

# ПРИБОРЫ И ТЕХНИКА ФИЗИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

УДК 537.529:621.317

# В.А. Пахотин<sup>1</sup>, В.А. Закревский<sup>1</sup>, И.А. Харалдин<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН

<sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

# НЕКОТОРЫЕ ОСОБЕННОСТИ ИЗМЕРЕНИЯ ТОКА ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПРОБОЯ ДИЭЛЕКТРИКОВ

Проанализированы различные схемы измерения тока пробоя диэлектрических пленок и введено понятие шунтирующего тока разряда конденсатора измерительной ячейки через канал пробоя. Предложена электрическая схема измерения тока пробоя, которая позволяет рассчитать шунтирующий ток и сопротивление канала пробоя на основе результатов измерений параметров импульса тока пробоя.

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ПРОБОЙ, ТОК ПРОБОЯ, МЕТОДИКА ИЗМЕРЕНИЯ, ПАРАМЕТР ИМПУЛЬСА, ШУНТИРУЮЩИЙ ТОК.

Проблема электрической прочности и работоспособности полимерных диэлектриков в сильных электрических полях привлекает внимание исследователей ввиду ее несомненной научной и практической значимости. В физике пробоя диэлектриков к одному из важнейших относится вопрос о величине тока в канале пробоя. Сведения об истинных значениях указанной величины позволят получить дополнительную информацию о механизме явления путем сравнения таких данных с выводами теории пробоя, а также выяснить условия разрушения диэлектриков в электрическом поле и, следовательно, наметить пути повышения их электрической прочности и работоспособности.

Согласно оценкам, плотность тока в канале пробоя микронных размеров может достигать  $10^5 - 10^6$  А/см<sup>2</sup> при длительности пробоя  $10^{-7}$  с [1, 2]. Надежные экспериментальные данные о токах пробоя, по нашему мнению, отсутствуют, поскольку существующие методики регистрации тока в канале пробоя несовершенны и их использование приводит к существенным ошибкам.

Цель настоящей работы — разработка способа измерения истинного тока в кана-

ле пробоя с учетом сопротивления канала пробоя и параметров элементов измерительной схемы.

Для определения тока через образец обычно измеряется падение напряжения на известном сопротивлении R, включенном последовательно с измерительной ячейкой (образцом) [3, 4] (рис. 1,*a*), или используется измеритель тока, через который образец замыкается на землю [5]. Эти методы имеют недостатки, поскольку в обоих случаях не учитывается, что ток пробоя складывается не только из замыкающегося на землю, но и из тока саморазряда конденсатораобразца, который невозможно измерить непосредственно, так как он замыкается в объеме образца.

Назовем этот ток шунтирующим. Иллюстрация этого обстоятельства приведена на рис. 1,  $\delta$ . Очевидно, что с учетом изложенного выше при оценке тока пробоя необходимо использовать не схему на рис. 1, *a*, а схему на рис. 1, *в*.

В схеме же на рис. 1,  $\delta$  при образовании проводящего канала, имеющего сопротивление  $R_0$ , собственная емкость образца разряжается через этот канал в обход измерительного сопротивления. Поэтому на-



Рис. 1. Схемы измерения тока пробоя:

C – емкость образца диэлектрика;  $C_d$  – дополнительный конденсатор; R – сопротивление измерительного резистора;  $R_{orp}$  – ограничительное сопротивление;  $R_0$  – сопротивление канала пробоя; U – напряжение источника напряжения; I(t) – шунтирующий ток пробоя (не замыкающийся на землю),  $I_1(t)$  – измеряемый ток пробоя

дежное измерение тока пробоя в подобной схеме невозможно. Без учета сопротивления  $R_0$  трудно объяснить явление пробоя и регистрацию значительных токов, потому что при отсутствии  $R_0$  разряд емкости *С* (релаксация энергии, накопленной образцом) должен происходить через большое сопротивление  $R_{orp}$ . Последнее используется в опытах по изучению пробоя для предохранения источника напряжения *U* от повреждения. Высокое значение указанного сопротивления определяет небольшой ток источника при пробое.

В схеме на рис. 1, *в* напряжение на измерительном резисторе *R* будет определяться и напряжением, создаваемым шунтирующим током I(t) на сопротивлении канала пробоя, поэтому имеется принципиальная возможность определять ток пробоя путем измерения напряжения на резисторе *R* или протекающего через него тока  $I_1(t)$ .

В связи с тем, что в процессе пробоя со-

противление канала значительно изменяется за очень короткий промежуток времени, строгий анализ приведенной схемы требует использования неких физических моделей и аппарата дифференциальных уравнений для задач с переменным параметром. Эту задачу, которая представляет самостоятельный интерес, предполагается решить в отдельной работе с использованием численных методов.

В настоящей работе ограничимся лишь рассмотрением электрической цепи, представленной на рис. 2, где исследуемый образец диэлектрика представлен конденсатором C и сопротивлением канала пробоя  $R_{0}$ .

Примем, что в момент времени t = 0 сопротивление образца мгновенно изменяется от  $R_i$  до  $R_0$ , причем  $R_i >> R_0$ . При этом конденсаторы C и  $C_d$ , полностью заряженные до напряжения U, разряжаются. Задача состоит в том, чтобы определить параметры



Рис. 2. Эквивалентная схема при измерении тока пробоя: *R*<sub>0</sub> – некоторое среднее фиксированное сопротивление, которое определяет ток на завершающей фазе пробоя; *L* – индуктивность проводов цепи либо какого-либо измерительного датчика (например, импульсного трансформатора)

импульса тока, протекающего по измерительному сопротивлению R, и (или) по индуктивности L, и по полученным формулам рассчитать  $R_0$  и амплитуду шунтирующего тока разряда I(t).

Обозначим мгновенные напряжения на конденсаторах C и  $C_d$  как  $U_c(t)$  и  $U_d(t)$ , тогда выражения для токов будут таковы:

$$\begin{cases} I(t) = C \frac{dU_c(t)}{dt}; \\ I_1(t) = C_d \frac{dU_d(t)}{dt}. \end{cases}$$
(1)

Сначала рассмотрим случай, когда индуктивность отсутствует. Введем следующие обозначения:

p — оператор Лапласа;

 $u_{c}$ ,  $u_{d}$  — образы напряжений соответственно  $U_{c}(t)$  и  $U_{d}(t)$ ;

$$A_{0} = R_{0}R \ CC_{d};$$
  

$$B_{0} = (R_{0} + R)C_{d} + R_{0}R;$$
  

$$p_{1} = \frac{1}{2A_{0}}(\sqrt{B_{0}^{2} - 4A_{0}} - B_{0});$$
  

$$p_{2} = 1 / (p_{1}A_{0}).$$

Для данной цепи начальные условия выбираются с учетом направления обхода контуров:  $U_c(0) = U$ ,  $U_d(0) = -U$ , и будет справедлива система операторных уравнений:

$$\begin{cases} p \cdot u_d + U = -\frac{u_c + u_d}{R \cdot C_d}; \\ p \cdot u_c - U = -\frac{(R + R_0)u_c + R_0u_d}{R \cdot C \cdot R_0}. \end{cases}$$
(2)

Решив эту систему уравнений и перейдя к оригиналам, получим, что

$$U_{d}(t) = \frac{U}{p_{1} - p_{2}}(p_{1} \exp(p_{2}t) - p_{2} \exp(p_{1}t)); (3)$$
$$U_{c}(t) = \frac{U}{A_{0}(p_{1} - p_{2})}[(A_{0}p_{2} + RC_{d}) \times (4)$$
$$\times \exp(p_{1}t) - (A_{0}p_{1} + RC_{d})\exp(p_{2}t)]; (4)$$

$$\frac{dU_{d}(t)}{dt} = \frac{Up_{1}p_{2}}{p_{1} - p_{2}}(\exp(p_{2}t) - \exp(p_{1}t));$$
(5)

$$\frac{dU_{c}(t)}{dt} = \frac{U}{R_{0}C(p_{1}-p_{2})}[p_{1}(R_{0}Cp_{2}+1) \times \exp(p_{1}t) - p_{2}(R_{0}Cp_{1}+1)\exp(p_{2}t)].$$
(6)

Выражения (5), (6) позволяют определить токи по формулам (1), (2).

Для определенности положим, что  $R = 500 \text{ Om}, C = 100 \text{ m}\Phi, C_d = 1000 \text{ m}\Phi,$ U = 1000 В. Сопротивление  $R_0$ , методика измерения которого есть предмет настоящей статьи, зависит от толщины образца и свойств полимера. Поэтому предположим, что сопротивление канала пробоя может иметь значение от десятков Ом и выше. На рис. 3 представлены графики токов  $I_1(t)$  и I(t) для двух значений  $R_0$ . Как видно, токи  $I_{1}(t)$  и I(t) заметно различаются по амплитуде при  $R_0 \ll R$ . Но возможность непосредственного измерения имеется только для тока  $I_1(t)$ . Поскольку он имеет импульсный характер с небольшой длительностью, то на практике проще всего измерять параметры импульса, например, с помощью осциллографа.

Момент времени, соответствующий экстремальному значению тока, равен

$$\tau_m = \frac{\ln\left(\frac{p_1}{p_2}\right)}{p_2 - p_1}.$$
(7)

Следовательно, амплитудное значение тока составит

$$I_{1}(\tau_{m}) = UC_{d} p_{2} \left(\frac{p_{1}}{p_{2}}\right)^{\frac{p_{2}}{p_{2}-p_{1}}}.$$
 (8)

Когда экспериментально получено значение амплитуды тока, то сопротивление канала пробоя можно определить путем численного решения уравнения (8) отно-



Рис. 3. Изменение со временем токов  $I_1$  (*a*), I (*б*) для двух значений  $R_0$ , Ом: 10 (сплошная линия), 100 (точки)

сительно  $R_0$ . Если же на практике можно измерить  $\tau_m$ , то  $R_0$  нетрудно найти из уравнения (7). Амплитудное значение шунтирующего тока будет равно

$$I(0) = \frac{U}{R_0}.$$
 (9)

Интересен случай, когда  $R \to 0$ . Тогда из системы уравнений (2) получим:

$$I(t)C_d = CI_1(t),$$
 (10)

т. е. токи перераспределяются в соответствии с величинами емкостей. Уменьшение токов происходит с одной и той же постоянной времени:

$$I_{1}(t) = \frac{UC_{d}}{R_{0}(C+C_{d})} \exp\left(-\frac{t}{R_{0}(C+C_{d})}\right);$$

$$I(t) = \frac{UC}{R_{0}(C+C_{d})} \exp\left(-\frac{t}{R_{0}(C+C_{d})}\right).$$
(11)

Из выражений (11) следует, что при  $C = C_d$  токи разряда выравниваются и по каналу пробоя протекает удвоенный ток. Если же  $C \ll C_d$ , то шунтирующим током можно пренебречь. Отсюда следует, что при измерительном сопротивлении, много меньшем сопротивления канала пробоя, возможно непосредственное измерение истинного тока пробоя.

Соединительные провода обладают ин-

дуктивностью и на высоких частотах могут вносить заметное сопротивление. Например, индуктивность отрезка прямого медного провода длиной  $l_0 = 10$  см и диаметром 2r = 1 мм, рассчитанная по формуле [7]

$$L = \frac{\mu_0 l_0}{2\pi} \ln\left(\frac{2l_0}{r} - 1\right),$$
 (12)

составляет приблизительно 1.2.10<sup>-7</sup> Гн. На частоте 1 ГГц реактивное сопротивление будет 2*π*·10<sup>9</sup>·1,2·10<sup>-7</sup> ≈ 752 Ом. Для измерения тока в проводнике можно использовать импульсный трансформатор. Очевидно, что его сопротивление будет еще выше. Необходимо подчеркнуть, что сопротивление, вносимое индуктивностью, пропорционально скорости изменения тока, которая должна быть максимальна именно в момент пробоя. Поэтому индуктивность может функционировать как гасящее сопротивление. Таким образом индуктивность может оказывать влияние на сам процесс пробоя, и при измерении тока пробоя ее необходимо учитывать.

Чтобы снизить погрешность, вносимую реактивным сопротивлением, исследователи прибегают к методам измерений тока, позволяющим либо скомпенсировать индуктивность [8], либо уменьшить ее величину. Однако компенсация возможна только при относительно больших мощ-

ностях пробоя, когда влиянием самих индукционных датчиков можно пренебречь. Чтобы снизить величину индуктивности, прибегают к укорочению проводников и использованию светоизлучающих диодов в качестве датчиков тока [9]. Такой метод неэкономичен и требует применения широкополосных фотоэлектронных умножителей. В связи с этим следует отметить, что имеются работы по измерению радиоволн, вызванных протеканием тока в процессе пробоя [10]. Предлагаемый авторами метод позволяет вообше избавиться от соединительных проводов. Однако недостатком метода является относительно узкая полоса частот, используемая при измерениях; вследствие этого при случайном характере возникновения тех или иных новых частот электромагнитных волн трудно согласовать настроенный радиочастотный тракт приемника с полезным сигналом. Так что все же остается актуальной проблема влияния индуктивности на возможность измерения тока пробоя.

При наличии индуктивности порядок уравнений (2) возрастает:

$$\begin{cases} p^{2} \cdot u_{d} + p \cdot U = -\frac{u_{c} + u_{d}}{L \cdot C_{d}}; \\ p \cdot u_{c} - U = \frac{(p \cdot u_{d} + U)C_{d}R_{0} - u_{c}}{C \cdot R_{0}}. \end{cases}$$
(13)

В соответствии с вышеприведенными рекомендациями, в системе уравнений (13) сопротивление R принято равным нулю. Несмотря на это, строгое решение этой системы остается довольно громоздким. Для уменьшения объема формул введем следующие обозначения:

$$A = R_0 L \ CC_d;$$
  

$$B = LC_d;$$
  

$$D = R_0 (C + C_d);$$
  

$$\alpha = (B^2 - 3AD)^{0.5};$$
  

$$\beta = 27A^2 - 9ABD + 2B^3; \gamma = B / (3A);$$
  

$$s_1 = \frac{2\alpha}{3A} \cos\left[\frac{1}{3} \arccos\left(-\frac{\beta}{2\alpha^3}\right)\right] - \gamma;$$
  

$$s_2 = -\frac{2\alpha}{3A} \sin\left[\frac{1}{3} \arcsin\left(-\frac{\beta}{2\alpha^3}\right) + \frac{\pi}{3}\right] - \gamma;$$

$$s_3 = -\frac{2\alpha}{3A}\sin\left[\frac{1}{3}\arcsin\left(-\frac{\beta}{2\alpha^3}\right)\right] - \gamma,$$

где  $s_1, s_2, s_3$  — корни характеристического уравнения

$$As^{3} + Bs^{2} + Ds + 1 = 0.$$

Тогда решение системы (13) можно представить в следующем виде:

$$U_{d}(t) = \sum_{i=1}^{3} -\frac{U}{G_{i}} e^{s_{i}t} CR_{0}(C_{d} Ls_{i}^{2} + 1) + \sum_{i=1}^{3} -\frac{U}{G_{i}} e^{s_{i}t} C_{d}(Ls_{i} + R_{0}); \qquad (14)$$

$$U_{c}(t) = \sum_{i=1}^{3} \frac{UR_{0}}{G_{i}} e^{s_{i}t} C(C_{d} Ls_{i}^{2} + 1) + \sum_{i=1}^{3} \frac{UR_{0}}{G_{i}} e^{s_{i}t} C_{d}$$

где  $G_i = 3As_i^2 + 2Bs_i + D$ .

Соответствующие токи  $I_1(t)$ , I(t) определяются с помощью формул (1).

На рис. 4 представлены графики напряжений  $U_c(t)$ ,  $U_d(t)$  и токов I(t),  $I_1(t)$  при конкретных значениях емкостей C,  $C_d$ , сопротивления  $R_0$ , индуктивности L и напряжения источника U. Видно, что колебательные процессы начинаются только после саморазряда емкости образца (разряда конденсатора C) (кривая I). Несмотря на отсутствие измерительного сопротивления, шунтирующий ток I значительно превышает измеряемый ток  $I_1$ . Анализ выражений (14) показал, что при  $C \ll C_d$  и  $L > C_d R_0^2/4$ ток  $I_1(t)$  хорошо описывается выражением

$$I_{1}(t) = -2 \frac{U\sqrt{C_{d}}e^{-\frac{R_{0}t}{2L}}}{\sqrt{4L - C_{d}R_{0}^{2}}} \sin\left(\frac{\sqrt{4L - C_{d}R_{0}^{2}}}{2\sqrt{C_{d}}L}t\right).$$
(15)

Очевидно, что затухание колебаний определяется преимущественно сопротивлением канала пробоя  $R_0$  и индуктивностью *L*. Поэтому, измерив на опыте время затухания колебаний, можно найти значение  $R_0$  и величину шунтирующего тока *I*(*t*).

Для случая  $C \le C_d$  и  $L \le C_d R_0^2/4$  графики токов  $I_1(t)$ , I(t) представлены на рис. 5. Данные кривые можно рассматривать как результат наложения тока с быстро затухающими колебаниями (из-за наличия индуктивности) на некий ток в отсутствие индуктивности цепи. Период таких колебаний следует выражению



Рис. 4. Зависимости от времени напряжений  $U_c(I)$ ,  $U_d(2)$  и токов I(3),  $I_1(4)$  при C = 100 пФ,  $C_d = 1000$  пФ,  $R_0 = 10$  Ом, L = 6,3 мкГн, U = 1 кВ

$$T = \frac{2\pi}{\operatorname{Im} s_1}.$$
 (16)

Время затухания колебаний в *е* раз определяется реальной частью *s*<sub>1</sub>:

$$\tau = -\frac{1}{\operatorname{Re} s_1}.$$
 (17)

Длительность спада тока  $I_1$  определятся величиной третьего корня  $s_3$ :

$$\tau_1 = -\frac{1}{\operatorname{Re} s_3}.$$
 (18)

Измерив в ходе эксперимента T,  $\tau$  и  $\tau_1$ , из выражений (16) — (18) можно определить корни характеристического уравнения  $s_1$ ,  $s_2$ ,  $s_3$  и сопротивление канала пробоя.

Действительно, корни  $s_1$ ,  $s_2$  являются

комплексно-сопряженными, поэтому

$$s_{1} = -\frac{1}{\tau} + i\frac{2\pi}{T};$$
  

$$s_{2} = -\frac{1}{\tau} - i\frac{2\pi}{T}.$$
(19)

Третий корень является действительным числом, поэтому

$$s_3 = -\frac{1}{\tau_1}$$
. (20)

Далее, используя теорему Виета, находим, что

$$-\frac{B}{A} = s_1 + s_2 + s_3, \tag{21}$$

или

$$\frac{1}{R_0} = C\left(\frac{2}{\tau} + \frac{1}{\tau_1}\right). \tag{22}$$

Из соотношения (22) находим  $R_0$  и шунтирующий ток по формуле (9). В качестве примера оценим  $R_0$  по кривой *1* на рис. 5. Быстрые колебания затухают за время  $\tau \approx 2,5$  нс, а ток спадает за время  $\tau_1 \approx 12$  нс. Правая часть равенства (22) будет равна приблизительно 0,1 Ом<sup>-1</sup>, что соответствует  $R_0 \approx 10$  Ом.

При некоторых значениях индуктивности протекание токов может иметь апериодический характер. Чтобы выявить условия возникновения этого режима, рассмотрим поведение дискриминанта  $\Delta$  характеристического уравнения



Рис. 5. Расчетные зависимости от времени величин  $I_1$  (*I*), *I* (*2*) для  $C = 100 \text{ п}\Phi$ ,  $C_d = 1000 \text{ п}\Phi$ ,  $R_0 = 10 \text{ Ом}$ и  $L < C_d R_0^2/4$ 

$$As^3 + Bs^2 + Ds + 1 = 0.$$

Выражение для указанного дискриминанта имеет вид:

$$\Delta = -\frac{1}{A^4} [27A^2 + 2AD(2D^2 - 9B) + B^2(4B - D^2)].$$
(23)

Отсутствие колебаний в исследуемой цепи возможно лишь при неотрицательных значениях  $\Delta$ . Для заданных параметров цепи  $\Delta \ge 0$  в интервале индуктивностей

$$\delta L = \frac{R_0^2}{4C_d^2} \sqrt{C_d^3 (C_d - 8C)^3}$$
(24)

протекание токов может иметь апериодический характер при центральном значении  $L_m = 3,65 \cdot 10^{-8}$  Гн. Заметим, что как  $\delta L$ , так и  $L_m$  квадратично зависят от сопротивления канала пробоя. Поэтому при увеличении  $R_0$ , например до 20 Ом, центральное значение индуктивности увеличится в четыре раза и достигнет индуктивности отрезка прямого медного провода длиной  $l_0 = 10$  см и диаметром 2r = 1 мм (12). Следовательно, апериодический режим вполне достижим экспериментально. При этом зависимость  $I_1(t)$  напоминает по форме одну из кривых на рис. 3, *a* и практически совпадает с током в цепи, не содержащей конденсатора *C* (поскольку  $C \ll C_d$ ):

$$I_{1}(t) \approx UC_{d} \left[ k_{1} \frac{Lk_{1} + R_{0}}{2Lk_{1} + R_{0}} \exp(k_{1}t) + k_{2} \frac{Lk_{2} + R_{0}}{2Lk_{2} + R_{0}} \exp(k_{2}t) \right],$$
(25)

где

$$k_{1} = \frac{\sqrt{C_{d}R_{0}^{2} - 4L} - \sqrt{C_{d}}R_{0}}{2\sqrt{C_{d}}L};$$

$$k_{2} = -\frac{\sqrt{C_{d}R_{0}^{2} - 4L} + \sqrt{C_{d}}R_{0}}{2\sqrt{C_{d}}L}.$$

Для определения сопротивления канала пробоя в данном случае можно использо-

1. Закревский В.А., Сударь Н.Т. Электрическое разрушение тонких полимерных пленок // Физика твердого тела. 2005. Т. 47. Вып 5. С. 931–936. вать измеренное значение момента времени, соответствующего экстремальному значению тока, либо значение экстремума тока. С целью приближенной оценки сопротивления канала достаточно воспользоваться следующей формулой для тока:

$$I_1(t) \approx \frac{4Ut}{C_d R_0^2} \exp\left(-\frac{2t}{C_d R_0}\right), \qquad (26)$$

полученной путем предельного перехода зависимости (25) при  $L \to C_d R_0^2/4$ .

Наибольшее значение тока по формуле (26) составляет  $I_{1m} = 2U/(eR_0)$  и позволяет легко определить  $R_0$ .

Итак, в работе проанализированы различные схемы измерения тока пробоя и введено понятие шунтирующего тока разряда конденсатора измерительной ячейки через канал пробоя. Предложена электрическая схема измерения тока пробоя, позволяющая рассчитывать шунтирующий ток и сопротивление канала пробоя на основе результатов, получаемых при измерениях параметров импульса тока пробоя.

При определенных условиях, а именно – в отсутствие индуктивности цепи, а также при величине измерительного сопротивления, много меньшей сопротивления канала пробоя, установлена возможность непосредственного измерения истинного тока пробоя; однако реальное измерение этой величины может вызвать затруднения.

При наличии небольших значений емкости и индуктивности период колебаний тока в измерительной цепи может оказаться сравнимым с длительностью пробоя. Таким образом индуктивность может влиять на сам процесс пробоя. Это обстоятельство необходимо учитывать при создании измерительных устройств для исследования явления пробоя при постоянном напряжении.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ. Грант РФФИ № 13-08-00448.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

2. Веттегрень В.И., Закревский В.А., Смирнов А.Н., Сударь Н.Т. Образование проводящего канала в полимерной диэлектрической пленке под влиянием электрического поля // Физика твер-

дого тела. 2010. Т. 52. Вып. 8. С. 1650-1655.

3. **Кучинский Г.С.** Частичные разряды в высоковольтных конструкциях. Л.: Энергия, 1979. 224 с.

4. **Riehl N., Baessler H., Spannring W.** Nondestructive breakdown in mylar film // Z. Angew. Phys. 1969. Vol. 27. P. 261-267.

5. Liu D., Kao K.C. High-field hole injection, conduction, and breakdown in polyethylene films fabricated by plasma polymerization // J. Appl. Phys. 1991. Vol. 69. P. 2489-2496.

6. Райзер Ю.П. Физика газового разряда; 2-е изд., перераб. и доп. М.: Наука, 1992. 592 с.

7. **Калантаров П.Л., Цейтлин Л.А.** Расчет индуктивностей. Справочная книга. Л.: Энергоатомиздат, 1986. 488 с.

8. Проскурин Б.Б., Кривовяз В.И., Егоров А.Г. Измеритель электрических параметров высоковольтных импульсов при пробое диэлектриков // Приборы и техника эксперимента. 1992. № 2. С. 143–146.

9. Yamada H., Fujiwara T., Suzuoki Y. Electrical breakdown time delay and breakdown propagation velocity in polypropylene under a highly nonuniform field condition // J. Phys. D: Appl. Phys. 1993. Vol. 26. P. 1328-1330.

10. Miyata T., Otani H. Microwave sensor for detecting a discharge occurring in an electrical apparatus. US Patent  $\mathbb{N}$  5726576, G01R 31/12 (20060101); G01R 29/08 (20060101), 1998.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПАХОТИН Владимир Александрович — доктор технических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН.

194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26 v.pakhotin@mail.ioffe.ru

ЗАКРЕВСКИЙ Владимир Александрович — доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН. 194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26 v.zakrevsky@mail.ioffe.ru

**ХАРАЛДИН Иван Алексеевич** — студент магистратуры Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 ikharaldin@gmail.com

# Pakhotin V.A., Zakrevskii V.A., Kharaldin I.A. SOME FEATURES OF MEASUREMENT OF BREAKDOWN CURRENT THROUGH DIELECTRICS

Some different circuits for measurement of breakdown current through dielectric films have been analyzed and a notion for shunting discharge current in a capacitor measuring cell flowing along the breakdown canal was introduced. A circuitry for measurement of breakdown current was put forward. It permits one to work out the shunting current and the breakdown canal resistance using the results of measurements of pulse parameters of breakdown current.

ELECTRICAL BREAKDOWN, BREAKDOWN CURRENT, MEASURING PROCEDURE, PULSE PARAMETER, SHUNTING CURRENT.

#### REFERENCES

1. Zakrevskiy V.A., Sudar' N.T. Elektricheskoe razrushenie tonkikh polimernykh plenok. *Fizika tver-dogo tela*, 2005, Vol. 47, Iss. 5, pp. 931-936. (rus)

2. Vettegren' V.I., Zakrevskiy V.A., Smirnov A.N., Sudar' N.T. Obrazovanie provodyashchego kanala v polimernoy dielektricheskoy plenke pod vliyaniem elektricheskogo polya. *Fizika tverdogo tela*, 2010, Vol. 52, Iss. 8, pp. 1650-1655. (rus)

3. **Kuchinskiy G.S.** Chastichnye razryady v vysokovol'tnykh konstruktsiyakh. Leningrad, Energiya, 1979, 224 p. (rus)

4. Riehl N., Baessler H., Spannring W. Non-destructive breakdown in mylar film. *Z. Angew. Phys*, 1969, Vol. 27, pp. 261-267.

5. Liu D., Kao K.C. High-field hole injection, conduction, and breakdown in polyethylene films fabricated by plasma polymerization. *J. Appl. Phys*, 1991, Vol. 69, pp. 2489-2496.

6. **Rayzer Yu.P.** Fizika gazovogo razryada; 2–e izd., pererab. i dop. Moscow, Nauka, 1992, 592 p. (rus)

7. Kalantarov P.L., Tseytlin L.A. Raschet in-

duktivnostey. Spravochnaya kniga. Leningrad, Enerroatomizdat, 1986, 488 p. (rus)

8. **Proskurin B.B., Krivovyaz V.I., Egorov A.G.** Izmeritel' elektricheskikh parametrov vysokovol'tnykh impul'sov pri proboe dielektrikov. *Pribory i tekhnika eksperimenta*, 1992, № 2, pp. 143-146. (rus)

9. Yamada H., Fujiwara T., Suzuoki Y. Electrical

breakdown time delay and breakdown propagation velocity in polypropylene under a highly non-uniform field condition. *J. Phys. D: Appl. Phys*, 1993, Vol. 26, pp. 1328-1330. (rus)

10. Miyata T., Otani H. Microwave sensor for detecting a discharge occurring in an electrical apparatus. US Patent No. 5726576, G01R 31/12 (20060101); G01R 29/08 (20060101), 1998.

#### THE AUTHORS

#### PAKHOTIN Vladimir A.

Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences 26 Polytekhnicheskaya Str. St. Petersburg, 194021, Russia v.pakhotin@mail.ioffe.ru

#### ZAKREVSKII Vladimir A.

Ioffe Physical Technical Institute of the Russian Academy of Sciences 26 Polytekhnicheskaya Str. St. Petersburg, 194021, Russia v.zakrevsky@mail.ioffe.ru

#### KHARALDIN Ivan A.

St. Petersburg State Polytechnical University 29 Politekhnicheskaya Str. St. Petersburg, 195251, Russia ikharaldin@gmail.com УДК 621.373.826

О.Л. Головков, Г.А. Купцова, В.А. Степанов

Рязанский государственный университет им. С.А. Есенина

# ВЛИЯНИЕ СТЕПЕНИ ОДНОРОДНОГО УШИРЕНИЯ КОНТУРА УСИЛЕНИЯ НА СПЕКТР ГЕНЕРАЦИИ YAG : Nd-ЛАЗЕРА

Теоретические исследования, представленные в статье, ставят целью выяснение влияния степени однородного уширения контура усиления на спектр генерации YAG:Nd<sup>+3</sup>-лазера в режимах генерации одной длины волны (1064,2 нм) и двух длин волн (1064,2 и 1061,5 нм). Полученные результаты сопоставлены с другими опубликованными данными.

ДЛИНА ВОЛНЫ, ЛАЗЕР НА YAG : Nd, СПЕКТР ГЕНЕРАЦИИ, ЛАЗЕРНАЯ МОДА, СТЕПЕНЬ ОДНОРОДНОГО УШИРЕНИЯ, СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ ТАНГА – СТАТЦА – ДЕМАРСА.

#### Введение

Известно, что при комнатной температуре в (YAG:Nd<sup>+3</sup>)-лазере однородное уширение превосходит неоднородное. Последнее определяется наличием двух линий усиления (1064,15 и 1064,40 нм) и фононным воздействием кристаллической решетки на ионы неодима. При этом чем выше температура кристалла, тем больше вклад неоднородного уширения в общую ширину спектра генерации (YAG : Nd<sup>+3</sup>)-лазера (далее YAG-лазер).

В исследовании одновременной генерации двух длин волн (1064,2 и 1061,5 нм), проведенном в работах [1, 2], учитывается генерация каждой аксиальной моды резонатора и не учитывается влияние однородного уширения контура усиления. Из расчета системы уравнений Танга – Статца Демарса [4] для резонатора длиной 30 мм генерация YAG-лазера осуществляется на десяти аксиальных модах, при этом с увеличением длины резонатора прямо пропорционально увеличивается количество генерируемых мод; это не соответствует другим опубликованным данным, согласно которым в нормальных условиях происходит генерация 5 – 7 аксиальных мод [3].

В настоящее время нет общепринятой теории, которая бы учитывала влияние степени однородного уширения на спектр генерации лазерного излучения. Известно выражение [4] для полного числа аксиальных мод 2j + 1, стационарно возбуждаемых при параметре накачки A:

$$j = \left[\frac{3(A-1)}{8\Delta^2 A}\right]^{\frac{1}{3}},$$
 (1)

где  $\Delta$  — межмодовый интервал, задаваемый длиной резонатора.

Согласно выражению (1), при параметре накачки A = 10 и длине резонатора 30 мм ( $\Delta = 0,05$ ) должно генерироваться 11 аксиальных мод, а при 120 мм ( $\Delta = 0,0125$ ) – 26 таких мод, но это не соответствует данным, приводимым в литературе [3].

При анализе спектра генерации YAGлазера для резонаторов произвольной длины необходимо учитывать фактор однородного уширения контура усиления, когда не все аксиальные моды, попадающие в контур усиления активной среды, могут участвовать в генерации лазерного излучения.

Данная статья посвящена решению системы уравнений, описывающих генерацию YAG-лазера с двух энергетических подуровней мультиплета  ${}^4F_{3/2}$ , имеющего три близких линии усиления, с учетом однородного уширения контура усиления среды, и сопоставлению полученных результатов с экспериментальными данными.

#### Теоретическая часть

Известно, что на спектр генерации YAG-лазера влияют три линии усиления с длинами волн 1064,15 нм (сечение перехода  $\sigma_1 = 7,1 \cdot 10^{-19} \text{ см}^2$ ), 1064,40 нм ( $\sigma_3 = 1,9 \times 10^{-19} \text{ см}^2$ ) и 1061,50 нм ( $\sigma_2 = 4,7 \cdot 10^{-19} \text{ см}^2$ ). При этом генерация YAG-лазера на длине волны 1064,15 нм идет с более высокого подуровня — 11507 см<sup>-1</sup>, чем генерация на длинах волн 1064,40 нм и 1061,50 нм — с подуровня 11423 см<sup>-1</sup> [3]. Поскольку сечение перехода  $\sigma_1$  на длине волны 1064,15 нм является максимальным, эту линию усиления называют сильным переходом.

Для описания многомодовой генерации YAG-лазера используем систему уравнений Танга – Статца – Демарса [4]:

$$\frac{dm_{k}}{d\tau} = Gm_{k} [L_{k}^{(1)}(n_{0} + n_{k}) + (L_{k}^{(2)} + L_{k}^{(3)})(n_{0}' + n_{k}') - 1 - \beta_{k}];$$

$$\frac{dn_{0}}{d\tau} = A - n_{0} \left(1 + \sum_{m=1}^{M} L_{m}^{(1)}m_{m}\right) - \sum_{m=1}^{M} L_{m}^{(1)}m_{m}n_{m};$$

$$\frac{dn_{k}}{d\tau} = -n_{k} \left(1 + \sum_{m=1}^{M} L_{m}^{(1)}m_{m}\right) - \frac{1}{2} L_{k}^{(1)}m_{k}n_{0};$$

$$\frac{dn_{0}'}{d\tau} = A' - n_{0}' \left(1 + \sum_{m=1}^{M} (L_{m}^{(2)} + L_{m}^{(3)})m_{m}\right) - (2)$$

$$-\sum_{m=1}^{M} (L_{m}^{(2)} + L_{m}^{(3)})m_{m}n_{m}';$$

$$\frac{dn_{k}'}{d\tau} = -n_{k}' \left(1 + \sum_{m=1}^{M} (L_{m}^{(2)} + L_{m}^{(3)})m_{m}\right) - (2)$$

$$-\frac{1}{2} (L_{k}^{(2)} + L_{m}^{(3)})m_{k}n_{0}';$$

где  $m_k$  — интенсивность генерируемых аксиальных мод;  $n_0, n_k$  — пространственнооднородная инверсия и ее решетки на переходе с верхним рабочим подуровнем 11507 см<sup>-1</sup>;  $n'_0, n'_k$  — то же для подуровня 11423 см<sup>-1</sup>; M — число аксиальных мод;  $G = 2k / \gamma_{\parallel}$ ;  $\tau = t / \gamma_{\parallel}$  ( $\gamma_{\parallel}$  — скорость релаксации инверсии населенности);  $\beta_k$  — потери k-й аксиальной моды; A, A' — параметры накачки на верхние рабочие подуровни А и В;  $L_k^{(i)}$  — лоренцевы формы линий усиления *i*-й компоненты, нормированные к сечению сильного перехода; они следуют выражениям

$$\begin{split} L_k^{(1)} &= [1 + ((p-k)\Delta_0 + \Delta)^2]^{-1};\\ L_k^{(2)} &= \frac{\sigma_2}{\sigma_1} [1 + ((p-k)\Delta_0 + \Delta_2)^2]^{-1};\\ L_k^{(3)} &= \frac{\sigma_3}{\sigma_1} [1 + ((p-k)\Delta_0 + \Delta_3)^2]^{-1};\\ \Delta_2 &= \frac{\omega_0^{(2)} - \omega_0^{(1)}}{\gamma_\perp}; \quad \Delta_3 = \frac{\omega_0^{(3)} - \omega_0^{(1)}}{\gamma_\perp}, \end{split}$$

где  $\omega_0^{(1)}$ ,  $\omega_0^{(2)}$ ,  $\omega_0^{(3)}$  — центры линий усиления на длинах волн 1064,15, 1061,50 и 1064,40 нм соответственно;  $\Delta_0$  — межмодовый интервал, задаваемый длиной резонатора;  $\gamma_{\perp}$  — скорость релаксации поляризации, равная полуширине однородной линии усиления.

Известно стационарное решение системы уравнений (2) [2]:

$$n_{0}' = \frac{1}{1+w} \left( A - (1+\beta_{k}) \sum_{m=1}^{M} m_{m} \right);$$

$$n_{0} = \frac{w}{1+w} \left( A - (1+\beta_{k}) \sum_{m=1}^{M} m_{m} \right);$$

$$n_{k}' = F_{1} \left( \frac{1+\beta_{k} - (L_{k}^{(2)} + L_{k}^{(3)})n_{0}'}{L_{k}^{(1)}} - n_{0} \right) \times$$

$$\times \left( F_{2} + F_{1} \frac{L_{k}^{(2)} + L_{k}^{(3)}}{L_{k}^{(1)}} \right)^{-1};$$

$$n_{k} = \frac{(1+\beta_{k}) - (L_{k}^{(2)} + L_{k}^{(3)})(n_{0}' + n_{k}')}{L_{k}^{(1)}} - n_{0};$$

$$m_{k} = \frac{n_{k} \left( 1 + \sum_{m=1}^{M} L_{m}^{(1)} m_{m} \right)}{-0, 5 L_{k}^{(1)} n_{0}};$$
(3)

где

$$F_{1} = n_{0}'(L_{k}^{(2)} + L_{k}^{(3)}) \left(1 + \sum_{m=1}^{M} L_{m}^{(1)} m_{m}^{(1)}\right);$$
  

$$F_{2} = n_{0} L_{k}^{(1)} \left(1 + \sum_{m=1}^{M} (L_{m}^{(2)} + L_{m}^{(3)})(m_{m}^{(2)} + m_{m}^{(3)})\right);$$
  

$$w = \frac{n_{0}}{n_{0}'} = \exp\left(\frac{E_{B} - E_{A}}{k_{B}T}\right),$$

 $E_{_{\!A}}, E_{_{\!B}}$  — энергии подуровней;  $k_{_{\!\rm B}}$  — постоянная Больцмана.

Известно, что при однородном уширении контура усиления происходит генерация на одной аксиальной моде, а при неоднородном уширении контура усиления осуществляется генерация на множестве аксиальных мод с межмодовым интервалом, задаваемым длиной резонатора. В связи с тем, что YAG-лазер обычно генерирует 5 - 7 мод, а не 26 (в соответствии с выражением (1)), возникает необходимость учитывать степень однородного уширения контура усиления, когда в процессе генерации участвуют не все аксиальные моды, задаваемые резонатором, а только те, между которыми нет корреляции по однородному уширению.

Система уравнений Танга — Статца — Демарса не предназначена для расчета лазерной генерации с множеством аксиальных мод при наличии однородного уширения контура усиления. Для расчета влияния степени однородного уширения на спектр генерации умножим лоренцевы контуры усиления  $L_k^{(i)}$  на функцию

$$f_k(n) = \prod_{m=1}^n \left| \cos\left(\frac{\pi}{2m} k\right) \right|, \qquad (4)$$

где величина n определяет количество расположенных рядом аксиальных мод, не участвующих в лазерной генерации; оно равно (2n - 1).

Нами проведены расчеты спектров генерации YAG-лазера на длине волны 1064,2 нм для двух значений длины резонатора (30 и 120 мм), причем сначала без учета влияния однородного уширения, когда межмодовый интервал аксиальных мод составляет 0,0500 и 0,0125 соответственно, а затем с его учетом. Если при расчетах для длины резонатора 30 мм положить n = 1, то для резонатора длиной 120 мм необходимо взять n = 4, чтобы сохранить одинаковый межмодовый интервал, определяемый степенью однородного уширения контура усиления.

На рис. 1 представлены результаты расчетов спектров генерации YAG-лазера на длине волны 1064,2 нм для двух значений длины резонатора: 30 и 120 мм; при n = 1 для длины резонатора 30 мм и при n = 4 для длины резонатора 120 мм; при n = 2 для длины резонатора 30 мм и при n = 8 для длины резонатора 120 мм. Неселективные потери приняты равными  $\beta_k = 0,15$ , температура кристалла – 300 K, параметр на-качки A = 10.

При длине резонатора 30 мм для удобства расчетов положим произвольным образом, что мода, соответствующая максимуму усиления на длине волны 1064,15 нм, имеет номер 70. Тогда мода, соответствующая максимуму усиления на длине волны 1064,40 нм, имеет номер 56, а мода, соответствующая максимуму усиления на длине волны 1061,50 нм, имеет номер 222.

При длине же резонатора 120 мм моды, соответствующие максимумам усиления на длинах волн 1064,15, 1064,40 и 1061,50 нм имеют номера 280, 224 и 888 соответственно.

С помощью расчетов, представленных на рис. 1, установлено, что в режиме генерации одной длины волны 1064,2 нм, при постоянной температуре, постоянной мощности накачки и постоянном уровне внутрирезонаторных потерь, для исследуемой системы характерны следующие свойства:

ширина спектра генерации увеличивается с ростом степени однородного уширения контура усиления, например,  $\Delta \lambda = 0,18$  нм (см. рис. 1, *a*),  $\Delta \lambda = 0,28$  нм (см. рис. 1, *в*). Поскольку в спектре генерации межмодовый интервал увеличивается с ростом степени однородного уширения контура усиления, то уменьшается дискриминация аксиальных мод;

если определяемый длиной резонатора частотный интервал между аксиальными модами меньше ширины однородной составляющей контура усиления, то количество генерируемых аксиальных мод не зависит от длины резонатора (см. рис. 1,  $\delta$ ,  $\partial$ и  $\varepsilon$ , e);

положение максимума спектра генерации не зависит от длины резонатора и степени однородного уширения контура усиления.

В связи с тем, что дискриминация аксиальных мод уменьшается с ростом однородного уширения контура усиления, следует ожидать изменения условий для обеспечения режима одновременной генерации двух длин волн 1064,2 и 1061,5 нм YAG-лазером [1, 2].

На рис. 2 представлены спектры одновременной генерации двух длин волн YAGлазером с длиной резонатора 30 мм, без учета однородного уширения; при n = 1(межмодовый интервал генерации равен 0,1); при n = 2 (межмодовый интервал генерации равен 0,2). При этом уровень потерь на длине волны 1061,5 нм  $\beta_k = 0,15$ , уровень потерь на длине волны 1064,2 нм



Рис. 1. Рассчитанные зависимости модового состава лазерного излучения (1064,2 нм) от степени однородного уширения контура усиления для различных значений длины резонатора lи величины n; l = 30 мм (a - e) и 120 мм (e - e); n = 0 (без учета однородного уширения) (a, e), n = 1 (b), 2 (e), 4 (d), 8 (e); T = 300 K;  $\beta_k = 0,15$ ; A = 10

 $\beta_k = 0,25$ , температура кристалла 300 К, параметр накачки A = 10.

Как видно из рис. 2, при увеличении степени однородного уширения контура усиления происходит уменьшение разницы внутрирезонаторных потерь, необходимой для осуществления режима одновременной генерации двух длин волн — 1064,2 и 1061,5 нм. Как известно, разница внутрирезонаторных потерь возникает на поляризующих элементах (окне Брюстера) за счет термонаведенного двулучепреломления в кристалле YAG [1, 2].

Расчетным путем установлено, что с ростом степени однородного уширения контура усиления изменяются условия возникновения одновременной генерации двух указанных длин волн. Так, в случае неоднородного уширения минимальное значение разности внутрирезонаторных потерь, при которых осуществляется одновременная генерация двух длин волн, составляет  $\Delta\beta_k = 0,05$ . В случае же влияния однородного уширения на контур усиления данные значения равны 0,04 и 0,03 при n = 1 и 2 соответственно.

Облегчение условий одновременной генерации двух длин волн с ростом степени однородного уширения контура усиления обусловлено уменьшением дискриминации



Рис. 2. Рассчитанные зависимости модового состава лазерного излучения на двух длинах волн  $\lambda$  от степени однородного уширения контура усиления для различных значений величины n при постоянном значении длины резонатора (l = 30 мм);  $\lambda = 1064,2$  нм (a - e) и 1061,5 нм (e - e); n = 0 (a, e), 1 (b, d), 2 (e, e); T = 300 K; A = 10

мод за счет роста межмодового интервала при увеличении степени однородного уширения.

#### Основные результаты работы

В проведенном исследовании показан метод расчета системы уравнений Танга – Статца – Демарса с учетом влияния степени однородного уширения контура усиления на спектр многомодовой генерации YAG-лазера.

Установлено, что если определяемый длиной резонатора частотный интервал

между аксиальными модами меньше ширины однородной составляющей контура усиления, то спектр генерации не зависит от длины резонатора.

Показано, что с ростом однородного уширения контура усиления происходит увеличение ширины спектра генерации лазерного излучения и уменьшается минимальное значение разности внутрирезонаторных потерь, при которых осуществляется одновременная генерация двух длин волн — 1064,2 и 1061,5 нм в нормальных условиях.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Головков О.Л., Купцова Г.А., Степанов В.А. Непрерывная генерация YAG:Nd-лазера на двух длинах волн 1064,15 и 1061,5 нм // Известия вузов. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2013. № 1. С. 113–121.

2. Головков О.Л., Купцова Г.А., Степанов В.А. Особенности спектра генерации YAG : Nd-лазера в режиме одновременной генерации

двух длин волн // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2013. № 2 (170). С. 110–114.

3. Зверев Г.М., Голяев Ю.Д., Шалаев Е.А., Шокин А.А. Лазеры на алюмоиттриевом гранате с неодимом. М.: Радио и связь, 1985. 144 с.

4. Ханин Я.И. Основы динамики лазеров. М.: Наука. Физматлит, 1999. 360 с.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГОЛОВКОВ Олег Леонидович — кандидат физико-математических наук, докторант кафедры общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина, начальник бюро ОАО «Государственный Рязанский приборный завод». 390000, Россия, г. Рязань, Семинарская ул., 32 golovkow@mail.ru

КУПЦОВА Галина Александровна — аспирантка кафедры общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина. 390000, Россия, г. Рязань, ул. Свободы, 46

СТЕПАНОВ Владимир Анатольевич — доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой общей и теоретической физики и методики преподавания физики Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина.

390000, Россия, г. Рязань, ул. Свободы, 46

# *Golovkov O.L., Kuptsova G.A., Stepanov V.A* INFLUENCE OF THE EXTENT OF UNIFORM BROADENING OF AN AMPLIFICATION LINE ON THE GENERATION SPECTRUM OF YAG : Nd LASER.

The theoretical investigation given in the paper is directed towards the elucidation of the influence of the extent of uniform broadening of an amplification line on the generation spectrum of YAG : Nd laser operating in the modes of the one-wavelength (1064,2 nm) and two-wavelength (1064,2 nm and 1061,5 nm) generations. The results obtained are compared with another ones presented in published literature.

WAVELENGTH, YAG : Nd LASER, GENERATION SPECTRUM, LASER MODE, UNIFORM BROADENING EXTENT, SET OF EQUATIONS OF TANG-STATZ-DEMARS.

#### REFERENCES

1. Golovkov O.L., Kuptsova G.A., Stepanov V.A. Nepreryvnaya generatsiya YAG:Nd-lazera na dvukh dlinakh voln 1064,15 i 1061,5 nm. *Izvestiya vuzov. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki*, 2013, No. 1, pp. 113–121. (rus)

2. Golovkov O.L., Kuptsova G.A., Stepanov V.A. Osobennosti spektra generatsii YAG : Nd-lazera v rezhime odnovremennoy generatsii dvukh dlin voln. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal:*  *Physics and Mathematics*, 2013, No. 2 (170), pp. 110–114. (rus)

3. Zverev G.M., Golyaev Yu.D., Shalaev E.A., Shokin A.A. Lazery na alyumoittrievom granate s neodimom. Moscow, Radio i svyaz', 1985, 144 p. (rus)

4. **Khanin Ya.I.** Osnovy dinamiki lazerov. Moscow, Nauka. Fizmatlit, 1999, 360 p. (rus)

#### THE AUTHORS

#### **GOLOVKOV Oleg L.**

Ryazan State University named for S.A. Yesenin 46 Svobody St., Ryazan, Russia, 390000 golovkow@mail.ru

#### **KUPTSOVA Galina A.**

Ryazan State University named for S.A. Yesenin 46 Svobody St., Ryazan, Russia, 390000

## **STEPANOV Vladimir A.**

Ryazan State University named for S.A. Yesenin 46 Svobody St., Ryazan, Russia, 390000 УДК 621.373.826

О.Л. Головков, Г.А. Купцова, В.А. Степанов

Рязанский государственный университет

# УЧЕТ СКОРОСТИ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ ПОДУРОВ-НЯМИ МУЛЬТИПЛЕТА В СПЕКТРЕ ГЕНЕРАЦИИ YAG:Nd-ЛАЗЕРА

В работе приведено два варианта записи системы уравнений Танга – Статца – Демарса. Рассчитаны спектры многомодовой генерации YAG:Nd<sup>+3</sup>-лазера для случая постоянного распределения Больцмана по подуровням мультиплета <sup>4</sup>*F*<sub>3/2</sub> и для случая определенной скорости кросс-релаксационных переходов между указанными подуровнями. Полученные результаты сопоставлены с экспериментальными данными.

YAG:Nd-ЛАЗЕР, РАСПРЕДЕЛЕНИЕ БОЛЬЦМАНА, СПЕКТР ГЕНЕРАЦИИ, СИСТЕМА УРАВНЕНИЙ ТАНГА – СТАТЦА–ДЕМАРСА, ПОДУРОВНИ МУЛЬТИПЛЕТА.

#### Введение

С целью исследования спектра генерации YAG:Nd<sup>+3</sup>-лазера авторы научной статьи [1] использовали систему уравнений Танга – Статца – Демарса (ТСД) и ввели параметры  $w_{AB}$  и  $w_{BA}$  – скорости релаксационных переходов между рабочими подуровнями А (11507 см<sup>-1</sup>) и В (11423 см<sup>-1</sup>) мультиплета  ${}^{4}F_{3/2}$ , причем для температуры 300 К приняли значения  $w_{AB} = \bar{0},3$  и  $w_{BA} = 0,2$  Отношение  $w_{BA}/w_{AB} = 0,66$  соответствует распределению Больцмана. Введение указанных параметров для однородной инверсии подуровней говорит о том, что при индуцированном излучении с одного подуровня через определенное время произойдет выравнивание населенностей подуровней в соответствии с распределением Больцмана. Введение же скоростей релаксационных переходов  $w_{AB}$  и  $w_{BA}$  для решеток инверсии не обосновано, так как эти решетки при генерации разных длин волн пространственно не совпадают.

В противоположность утверждению, сделанному в работе [1], в статье [2] высказано мнение о необоснованности введения скоростных параметров, так как «время жизни» мультиплета  ${}^{4}F_{3/2}$  (2,5 $\cdot$ 10<sup>-4</sup> с) намного превосходит время релаксационных переходов между его подуровнями (10<sup>-7</sup> с), а распределение населенностей подуровней всегда соответствует распределению Больцмана.

Цель настоящего исследования - со-

поставить два предложенных вида системы уравнений ТСД и развить высказанное ранее мнение; показать, что распределение однородной инверсии населенности между подуровнями мультиплета  ${}^4F_{3/2}$  всегда соответствует распределению Больцмана. Что же касается распределения населенности решеток инверсии населенности между подуровнями мультиплета  ${}^4F_{3/2}$ , то оно не подчиняется этому распределению.

#### Теоретическая часть

Известно, что на спектр генерации YAG:Nd<sup>+3</sup>-лазера (далее YAG-лазер) влияют три линии усиления:  $\lambda_1 = 1064,15$  нм (сечение перехода  $\sigma_1 = 7,1 \cdot 10^{-19}$  см<sup>2</sup>),  $\lambda_3 = 1064,40$  нм (сечение перехода  $\sigma_3 = 1,9 \times 10^{-19}$  см<sup>2</sup>) и  $\lambda_2 = 1061,50$  нм (сечение перехода  $\sigma_2 = 4,7 \cdot 10^{-19}$  см<sup>2</sup>). При этом генерация YAG-лазера на длине волны 1064,15 нм идет с более высокого подуровня (11507 см<sup>-1</sup>), чем генерация на длинах волн 1064,40 и 1061,50 нм — с подуровня 11423 см<sup>-1</sup> [4]. Так как сечение перехода  $\sigma_1$  на длине волны 1064,15 нм максимальное, то эту линию усиления называют сильным переходом.

Как уже указывалось, для описания многомодовой генерации YAG-лазера обычно используют систему уравнений TCД [3].

Запишем систему уравнений, как в это было сделано в работе [1], исправив явные неточности и преобразовав использованные авторами переменные к общепринятым [3]:

$$\frac{dm_{k}}{d\tau} = Gm_{k} [L_{k}^{(1)}(n_{0} + n_{k}) + (L_{k}^{(2)} + L_{k}^{(3)})(n_{0}' + n_{k}') - 1 - \beta_{k}];$$

$$\frac{dn_{0}}{d\tau} = A - n_{0} \left(1 + \sum_{m=1}^{M} L_{m}^{(1)}m_{m}\right) - \sum_{m=1}^{M} L_{m}^{(1)}m_{m}n_{m} - w_{AB}n_{0} + w_{BA}n_{0}';$$

$$\frac{dn_{k}}{d\tau} = -n_{k} \left(1 + \sum_{m=1}^{M} L_{m}^{(1)}m_{m}\right) - \sum_{m=1}^{M} L_{k}^{(1)}m_{k}n_{0} - w_{AB}n_{k} + w_{BA}n_{k}';$$

$$\frac{dn_{0}'}{d\tau} = A' - n_{0}' \left(1 + \sum_{m=1}^{M} (L_{m}^{(2)} + L_{m}^{(3)})m_{m}\right) - \sum_{m=1}^{M} (L_{m}^{(2)} + L_{m}^{(3)})m_{m}'\right) - \sum_{m=1}^{M} (L_{m}^{(2)} + L_{m}^{(3)})m_{m}n_{m}' + w_{AB}n_{0} - w_{BA}n_{0}';$$

$$\frac{dn_{k}'}{d\tau} = -n_{k}' \left(1 + \sum_{m=1}^{M} (L_{m}^{(2)} + L_{m}^{(3)})m_{m}'\right) - \sum_{m=1}^{M} (L_{k}^{(2)} + L_{m}^{(3)})m_{k}n_{0}' + w_{AB}n_{k} - w_{BA}n_{k}',$$

1....

где *m<sub>k</sub>* – интенсивность генерируемых аксиальных мод;  $n_0$ ,  $n_k$  – пространственнооднородная инверсия и ее решетки на переходе с верхним рабочим подуровнем А (11507 см<sup>-1</sup>);  $n'_0$ ,  $n'_k$  – то же для верхнего рабочего подуровня В (11423 см<sup>-1</sup>); M — число аксиальных мод;  $G = 2k / \gamma_{\parallel}$ ,  $\tau = t / \gamma_{\parallel} (\gamma_{\parallel} - \text{скорость релаксации инвер-}$ сии насёленности);  $\beta_k$  – потери k-й аксиальной моды; А, А' – параметры накачки на верхние рабочие подуровни A и B;  $w_{4R}$ , *w*<sub>ва</sub> – скорости релаксационных переходов между рабочими подуровнями А и В мультиплета  ${}^{4}F_{3/2}; L_{k}^{(i)}$  – лоренцевы формы линий усиления і-й компоненты, нормированные к сечению сильного перехода (1064,15 нм), которые выражаются как

$$\begin{split} L_k^{(1)} &= [1 + ((p-k)\Delta_0)^2]^{-1};\\ L_k^{(2)} &= \frac{\sigma_2}{\sigma_1} [1 + ((p-k)\Delta_0 + \Delta_2)^2]^{-1};\\ L_k^{(3)} &= \frac{\sigma_3}{\sigma_1} [1 + ((p-k)\Delta_0 + \Delta_3)^2]^{-1};\\ \Delta_2 &= \frac{\omega_0^{(2)} - \omega_0^{(1)}}{\gamma_\perp}; \ \Delta_3 &= \frac{\omega_0^{(3)} - \omega_0^{(1)}}{\gamma_\perp}, \end{split}$$

где  $\omega_0^{(1)}$ ,  $\omega_0^{(2)}$ ,  $\omega_0^{(3)}$  — центры линий усиления на длинах волн  $\lambda = 1064,15$ , 1061,50 и 1064,4 нм;  $\Delta_0$  — межмодовый интервал, задаваемый длиной резонатора;  $\gamma_{\perp}$  — скорость релаксации поляризации, равная полуширине однородной линии усиления.

Для стационарной генерации  $d/d\tau = 0$ . При условии  $\tau \to \infty$  распределение населенностей подуровней мультиплета  ${}^4F_{3/2}$  соответствует распределению Больцмана. Тогда, в результате преобразования системы уравнений (1), получаются следующие выражения:

$$n_0 + n'_0 = A + A' - (1 + \beta_k) \sum_{m=1}^M m_m;$$
 (2)

$$n_{0}' = \frac{1}{1+w} \left( A + A' - (1+\beta_{k}) \sum_{m=1}^{M} m_{m} \right) - (3a)$$
$$-w_{BA} n_{0}' + w_{AB} n_{0};$$
$$n_{0} = \frac{w}{1+w} \left( A + A' - (1+\beta_{k}) \sum_{m=1}^{M} m_{m} \right) - (36)$$
$$-w_{AB} n_{0} + w_{BA} n_{0}',$$

где

$$w = \frac{n_0}{n_0'} = \exp\left(\frac{E_B - E_A}{k_{\rm B}T}\right);$$

 $E_{A}, E_{B}$  — энергии подуровней;  $k_{B}$  — постоянная Больцмана.

В результате преобразований выражений (3) получаем равенства:

$$n'_{0} = \frac{F_{1}}{(1+w)(1+w_{BA})F_{2}} \left(1 + \frac{w_{AB}w}{1+w_{AB}}\right); \quad (4a)$$

$$n_0 = \frac{F_1}{(1+w)(1+w_{AB})F_2} \left(w + \frac{w_{BA}}{1+w_{BA}}\right), (46)$$

где

$$F_{1} = A + A' - (1 + \beta_{k}) \sum_{m=1}^{M} m_{m};$$
$$F_{2} = \left[ 1 - \frac{w_{AB} w_{BA}}{(1 + w_{BA})(1 + w_{AB})} \right].$$

Проведенный анализ показал, что уравнения (4а) и (4б) тождественны выражениям, впервые представленным в статье [2] и полученным из условия, что однородные населенности подуровней мультиплета  ${}^{4}F_{3/2}$ в любой момент времени подчиняются распределению Больцмана, независимо от условий лазерной генерации. Они имеют вид

$$n'_{0} = \frac{1}{1+w} \left( A + A' - (1+\beta_{k}) \sum_{m=1}^{M} m_{m} \right); \quad (5a)$$

$$n_0 = \frac{w}{1+w} \left( A + A' - (1+\beta_k) \sum_{m=1}^M m_m \right).$$
 (56)

Дальнейшее преобразование системы уравнений (1) позволило получить выражения:

$$n'_{k} = \frac{n_{k}F_{3}n'_{0} - w_{BA}n'_{k}(L^{(2)}_{k} + L^{(3)}_{m})n'_{0}}{L^{(1)}_{k}n_{0}F_{4} - w_{AB}L^{(1)}_{k}n_{0}n_{k}}; \quad (6a)$$

$$n_{k} = \frac{(1 + \beta_{k}) - (L_{k}^{(2)} + L_{k}^{(3)})(n'_{0} + n'_{k})}{L_{k}^{(1)}} - n_{0};$$
(66)

$$m_{k} = \frac{n_{k} \left(1 + \sum_{m=1}^{M} L_{m}^{(1)} m_{m}\right) + w_{AB} n_{k} - w_{BA} n_{k}'}{0, 5 L_{k}^{(1)} n_{0}}, (6B)$$

где

$$F_{3} = \left(1 + \sum_{m=1}^{M} L_{m}^{(1)}m_{m} + w_{AB}\right) (L_{k}^{(2)} + L_{m}^{(3)});$$
  
$$F_{4} = \left(1 + \sum_{m=1}^{M} (L_{m}^{(2)} + L_{m}^{(3)})m_{m} + w_{BA}n_{k}'\right).$$

Выражение (ба) не имеет аналитического решения, поэтому для его решения использовался метод последовательных приближений.

На рис. 1, *а* приведены результаты расчетов с использованием уравнений (5) и (6), описывающие спектр генерации YAGлазера при следующих условиях: температура 300 К,  $w_{AB} = 0,3$ ,  $w_{BA} = 0,2$  (как это было принято в работе [1]); параметр накачки A = 10; внутрирезонаторные потери  $\beta_{L} = 0,15$ .

С учетом межмодового интервала  $\Delta_0 = 0,05$  присвоим произвольным образом номер 70 моде, соответствующей максимуму усиления на длине волны 1064,15 нм. Тогда мода, соответствующая максимуму усиления на длине волны 1064,4 нм, получит номер 56, а мода, соответствующая максимуму усиления на длине волны 1061,5 нм, — номер 222. Согласно расчетам, генерация на длине волны 1061,5 нм отсутствует, поэтому графически модовый состав спектра не показан.

На рис. 1, б приведены расчетные данные для спектра генерации YAG-лазера в соответствии с полученными в работе [2] (300 K) и условиях: населенности подуровней мультиплета  ${}^{4}F_{3/2}$  в любой момент времени подчиняются распределению Больцмана ( $w_{AB} = w_{BA} = 0$ , w = 0,66), параметр накачки A = 10, внутрирезонаторные потери  $\beta_{k} = 0,15$ . Согласно расчетам, и в этом случае генерация на длине волны 1061,5 нм отсутствует, поэтому графически модовый состав спектра также не показан.

При сравнении рис. 1, *а* и  $\delta$  видно, что при температуре 300 К генерация на длине волны 1064,2 нм возникает в обоих случаях, но при этом максимумы спектров излучения не совпадают (на рис. 1, *а* k = 67, а на рис. 1,  $\delta k = 66$ ).

На рис. 2, *а*, *б* приведен результат расчета спектра генерации YAG-лазера по





Рис. 1. Результаты расчета модового состава генерации YAG-лазера для длины волны 1064,2 нм при параметрах, использованных в работе [1] (*a*) и работе [2] (*б*); *T* = 300 K. В обоих случаях, согласно расчетам, генерация на длине волны 1061,5 нм отсутствует



Рис. 2. Результаты расчета модового состава генерации YAG-лазера для длин волн 1064,2 нм (*a*, *e*) и 1061,5 нм (*б*, *e*) при условиях, принятых в работе [1] (*a*, *б*) и в работе [2] (*b*, *e*); *T* = 200 K

уравнениям (5) и (6), выполненный при условиях: T = 200 K,  $w_{AB} = 0,4$  и  $w_{BA} = 0,2$  (w = 0,5), параметр накачки A = 10, внутрирезонаторные потери  $\beta_k = 0,15$ .

На рис. 2, *в*, *е* приведен расчет спектра генерации YAG-лазера в соответствии с [2] при 200 К и условиях: населенности подуровней мультиплета  ${}^{4}F_{3/2}$  в любой момент времени подчиняются распределению Больцмана ( $w_{AB} = w_{BA} = 0, w = 0,5$ ), параметр накачки A = 10, внутрирезонаторные потери  $\beta_{k} = 0,15$ .

При сравнении рис. 2, *а*, *б* с рис. 2, *в*, *г* очевидно, что при 200 К рассчитанные спектры генераций значительно различаются. Так, если производить расчет в соответствии со статьей [1], то при 200 К должна возникнуть генерация только на одной длине волны 1064,2 нм, но важно заметить, что при этом происходит значительный сдвиг максимума спектра генерации ввиду усиленного влияния на спектр линии 1064,4 нм. Если же проводить расчет в соответствии с работой [2], то при 200 К осуществляется генерация на двух длинах волн (1064,2 и 1061,5 нм), а это согласуется с данными, приведенными в литературе [5].

#### Выводы

Проведенный анализ расчетных результатов для спектров генерации YAG:Nd<sup>+3</sup>лазера (расчеты выполнены при варьировании условий), привел к следующим заключениям:

распределение однородной инверсии населенности между подуровнями мультиплета  ${}^{4}F_{_{3/2}}$  всегда соответствует распределению Больцмана, даже при наличии лазерной генерации;

распределение населенности решеток инверсии населенности между указанными подуровнями не подчиняется статистике Больцмана, следовательно, при использовании системы уравнений Танга – Статца – Демарса не должны учитываться скорости релаксационных переходов  $w_{AB}$  и  $w_{BA}$  для решеток инверсии.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Иевлев И.В., Корюкин И.В., Лебедева Ю.С., Хандохин П.А. Непрерывная двухволновая генерация в микрочип-Nd:YAG-лазерах // Квантовая электроника. 2011. Т. 41. № 8. С. 715 – 721.

2. Головков О.Л., Купцова Г.А., Степанов В.А. Особенности спектра генерации YAG:Ndлазера в режиме генерации двух длин волн // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2013. № 2(170). С. 110–114.

3. Ханин Я.И. Основы динамики лазеров. М.: Наука. Физматлит.1999. 360с.

4. Зверев Г.М., Голяев Ю.Д., Шалаев Е.А., Шокин А.А. Лазеры на алюмоиттриевом гранате с неодимом. М.: Радио и связь, 1985. 144 с.

5. **Каминский А.А.** Лазерные кристаллы. М.: Наука, 1975. 256 с.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ГОЛОВКОВ Олег Леонидович — докторант кафедры общей и теоретической физики Рязанского государственного университета им. С.А. Есенина. 390000, Россия, Рязань, ул. Свободы, 46

golovkow@mail.ru

КУПЦОВА Галина Александровна — аспирантка кафедры общей и теоретической физики Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина. 390000, Россия, г. Рязань, ул. Свободы, 46

СТЕПАНОВ Владимир Александрович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей и теоретической физики Рязанского государственного университета имени С.А. Есенина. 390000, Россия, г. Рязань, ул. Свободы, 46

# *Golovkov O.L., Kuptsova G.A., Stepanov V.A.* THE RATE CONSIDERATION OF RELAXATION TRANSITIONS BETWEEN SUBLEVELS OF A MULTIPLET IN THE GENERATION SPECTRUM OF YAG:Nd-LASER.

The two alternative forms of the Tang – Statz – DeMars system of equations are presented in the paper. The spectra of the multimode generation of YAG: Nd <sup>+3</sup>-laser are calculated assuming the Boltzmann distribution over the sublevels of the  ${}^{4}F_{_{3/2}}$  multiplet and a specific rate of cross-relaxation transitions between those sublevels. The results obtained are compared with experimental data.

YAG : Nd-LASER, BOLTZMANN DISTRIBUTION, GENERATION SPECTRUM, TANG-STATZ-DEMARS SYSTEM OF EQUATIONS, MULTIPLET SUBLEVELS.

#### REFERENCES

1. Ievlev I.V., Koryukin I.V., Lebedeva Yu.S. Khandokhin P.A. Nepreryvnaya dvukhvolnovaya generatsiya v mikrochip-Nd:YAG-lazerakh. *Kvantovaya elektronika*, 2011, Vol. 41, No.8, pp. 715-721. (rus)

2. Golovkov O.L., Kuptsova G.A., Stepanov V.A. Osobennosti spektra generatsii YAG:Nd-lazera v rezhime generatsii dvukh dlin voln. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and* 

Mathematics, 2013, No. 2(170), pp. 110-114. (rus)

3. Khanin Ya.I. Osnovy dinamiki lazerov. Moscow, Nauka. Fizmatlit, 1999. 360 p. (rus)

4. Zverev G.M., Golyaev Yu.D., Shalaev E.A., Shokin A.A. Lazery na alyumoittrievom granate s neodimom. Moscow, Radio i svyaz', 1985. 144 p. (rus)

5. **Kaminskiy A.A.** Lazernye kristally. Moscow, Nauka, 1975. 256 p. (rus)

#### THE AUTHORS

#### **GOLOVKOV Oleg L.**

Ryazan State University named for S.A. Yesenin 46 Svobody St., Ryazan, Russia, 390000 golovkow@mail.ru

#### **KUPTSOVA Galina A.**

Ryazan State University named for S.A. Yesenin 46 Svobody St., Ryazan, Russia, 390000

## **STEPANOV Vladimir A.**

Ryazan State University named for S.A. Yesenin 46 Svobody St., Ryazan, Russia, 390000 UDC 535.41.111

V.M. Petrov<sup>1</sup>, A.V. Khomenko<sup>2</sup>, Ya.A. Krinitsky<sup>1</sup>, A.M. Garcia<sup>2</sup>

<sup>1</sup> St. Petersburg State Polytechnical University.

<sup>2</sup>Ensenada Center for Scientific Research and Higher Education.

# LIGHT PRESSURE DETECTION BY TWO-WAVE MIXING IN THE PHOTOREFRACTIVE BaTIO<sub>3</sub>: Co CRYSTAL

The paper studies the high-sensitive detection of light radiation pressure using an adaptive interferometer based on photorefractive  $45^{\circ}$ -cut BaTiO<sub>3</sub>: Co crystal. For small phase modulation measurement the authors employed a polarization filtering, which ensured the linear regime of signal detection in the photorefractive crystal with nonlocal response. It was demonstrated that the proposed method of light pressure measurement could be used as a broadband photodetector. It was experimentally found that the sensitivity was 2  $\mu$ W in the wavelength range from 488 to 1600 nm.

ADAPTIVE HOLOGRAFIC INTERFEROMETER, LIGHT PRESSURE, TWO-WAVE MIXING, PHOTOREFRACTIVE CRYSTAL, HIGH-SENSITIVE DETECTION, BROADBAND PHOTODETECTOR.

#### Introduction

It is well known that light exerts pressure on an illuminated object that is a result of the momentum transfer from photons to the object, which reflects, absorbs, or refracts the light [1]. Even though light pressure is negligible in common practice, nowadays it has numerous applications ranging from manipulation on biological particles and nanotechnology up to cooling and trapping atoms [1-3].

In this paper we consider a highsensitive detection of light pressure using an adaptive holographic interferometer based on photorefractive  $45^{\circ}$ -cut BaTiO<sub>3</sub>: Co crystal. In our experiment, the light pressure causes a displacement of a reflecting membrane, and this response is measured by the adaptive interferometer. We demonstrate that the device based on light pressure measurement can be used as a broadband achromatic photodetector with linear response.

# Adaptive Interferometer with Linear Phase Demodulation

In our experiments we measured the increased vibrations of a reflecting membrane caused by the pressure of light being amplitude-modulated. An adaptive interferometer with photorefractive crystal is well known as a simple and efficient configuration for measuring small vibrations [4]. In most industrial applications

the fast response time of the photorefractive crystal is needed and many efforts were made to develop the setups with photorefractive semiconductors and sillenite crystals, which have the fastest response time. However, these crystals have low electro-optic coefficients, which results in weak two-beam coupling even with external field enhancement of the photorefractive effect. In our experiments with highly reflective membrane the major factor leading to the loss of light should be the weak coupling, or, in the other words, the low reflectivity of the photorefractive grating. Thus to achieve high light efficiency and as a result maximum sensitivity we have to choose a crystal with high reflectivity even at the expense of response time. For our experiments we selected 45°-cut BaTiO<sub>3</sub>, which provides one of the strongest grating reflectivity without resorting to an externally applied electric field [5, 6]. While the absence of the electric field is an appreciable advantage in itself, in this case the diffusion mechanism of the photorefractive grating recording is dominant. As a consequence the photorefractive grating is  $\pi/2$ -phase shifted with respect to the interference pattern. The signal and the reference waves are in phase in the exit of the crystal, and it results in the weak quadratic detection of the signal wave phase modulation. To provide high-sensitive linear detection we employed a photorefractive interferometer with different polarizations of



Fig. 1. Experimental setup: I - Nd: YAG laser ( $\lambda = 532 \text{ nm}$ ), 2 - beam splitter,  $3 - \text{BaTiO}_3$ : Co crystal, 4 - polarizer,  $5 - \lambda/4$  retarder, 6 - vacuum chamber with reflective membrane, 7 - intensity modulator, 8 - laser ( $\lambda = 488$ , 632, 1600 nm), 9 - function generator, 10 - lock-in amplifier; R, S - the reference and the signal beams, respectively

the interfering waves and polarization filtering [7, 8].

The scheme of the holographic interferometer, which provides counter-propagating two-wave mixing in the photorefractive crystal, is shown in Fig. 1. The photorefractive crystal,  $BaTiO_3$ : Co, has cobalt concentration of approximately 0.01 mol. % and the length of 4 mm along the grating wave vector. The angle between the interfering beams was 170°. A frequency-doubled Nd : YAG laser  $(\lambda = 532 \text{ nm})$  was used as a light source for the interferometer. The reference beam Rhas horizontal polarization, while the signal beam S is elliptically polarized. The quarterwave retarder, which controls the signal beam polarization, introduces a phase shift between vertical and horizontal polarization components. The photorefractive grating is recorded by the interference pattern of the horizontal component of the signal beam and the reference beam. Only light with extraordinary polarization is reflected by the grating due to the great difference between effective electrooptic coefficients for ordinary and extraordinary waves [6]. In our experimental setup the light with vertical polarization is reflected, and therefore the reference beam passes the crystal without reflection by the grating, and this feature increases the interferometer efficiency.

The complex vectorial amplitudes of the

62

signal and reference waves, which enter the crystal through the opposite facets, are given by

$$S = S_0 \begin{bmatrix} (1-i)\sin\theta\cos\theta\\\sin^2\theta + i\cos^2\theta \end{bmatrix} e^{i\phi(t)},$$
$$R = R_0 \begin{bmatrix} 0\\1 \end{bmatrix},$$
(1)

where  $S_0$  and  $R_0$  are the scalar amplitudes of the signal and reference, respectively;  $\theta$  is the angular position of the quarter-wave retarder;  $\varphi(t)$  is the phase modulation of the signal wave caused by the reflective membrane vibration.

The reference wave has vertical polarization; therefore the horizontal x component of the signal wave does not take part in the photorefractive grating build-up process. The grating recorded by the *y* component reflects the horizontal x component of the signal wave. The quarter wave plate changes the phase between the x and y components of the signal wave that allows the adjustment of the phase difference between the reflected signal wave and the reference one. Eq. (1) shows that the reference wave transmitted through the crystal is in phase with the reflected wave when the angular position of the retarder  $\theta = 45^{\circ}$ . In this case the configuration shown in Fig. 1 provides high-sensitive linear detection of the fast phase modulation of the signal wave. The polarization





analyzer in front of the photodetector mixes the vertically polarized reference wave and the reflected signal one, which has horizontal polarization. The light intensity behind the polarization analyzer is

$$I(t) = PS_0^2 \sin^2 \alpha + TR_0 \cos^2 \alpha + + \frac{1}{4} \sqrt{PT} S_0 R_0 \sin 2\alpha \sin \varphi(t),$$
(2)

where *P* is intensity reflectance of the photorefractive grating, *T* is transmittance of the crystal, and  $\alpha$  is an angle that transmission axis of the polarization analyzer makes with the *x* axis.

Obviously, the interferometer has the highest sensitivity when  $\alpha = 45^{\circ}$  and the amplitude of the intensity modulation is

$$\Delta I(t) = \frac{1}{4} \sqrt{PT} S_0 R_0 \sin \varphi(t).$$
 (3)

Our experiments have confirmed that the proposed configuration of the interferometer allows linear detection of the phase modulation. We observed only the first harmonic of the signal when the quarter-wave plate was installed and aligned in the optimal position. Without the phase retarder, when the signal and reference wave had the same polarization, only the second harmonic was observed and the output signal dependence on the phase modulation amplitude was quadratic. The results of those experiments (see Fig. 2) reveal a significant advantage in output signal of the «linearized» interferometer when a small phase modulation is detected. In that experiment the vacuum chamber with reflective membrane was replaced by a piezo-driven mirror. We used this result as an interferometer calibration to determine the membrane displacement in the measurements of light pressure.

We found experimentally the optimal positions of the quarter wave plate and the polarization analyzer, and that measure yielded the maximum sensitivity of the interferometer. The result obtained differs from the 45°-position predicted theoretically by approximately 20°. The measurements of the grating reflectance as a function of the polarization angle show that maximum value is also observed with our crystal sample when the polarization differs from the vertical one by 20°. Apparently, these discrepancies we can explain by the difference between the considered 45° crystal cut and the crystallographic orientation of our BaTiO<sub>3</sub>: Co sample, which has been cut close to 30°.

#### An Achromatic Photodetector Based on Light Pressure Measurement

As a detector of light pressure we used a thin flexible highly reflective membrane placed in a vacuum chamber. The air pressure in the chamber was about 5  $N/m^2$ . The membrane



Fig. 3. An amplitude of the output signal as a function of the incident light power for three different wavelengths  $\lambda$ : I - 488 nm, 2 - 633 nm, 3 - 1600 nm

was composed of a 5 µm-thick nitrocellulose substrate coated with an 0.12 µm-thick The measured aluminum reflective layer. reflectivity of the membrane was 85-95 % in the wavelength range of  $0.4-1.6 \mu m$ . The membrane was illuminated through the rightside windows of the vacuum chamber by the green CW light (see Fig. 1) that made possible to detect fast membrane displacement interferometrically. The laser beam causing this displacement entered the chamber from the left. It showed a periodical intensity modulation that resulted in increased vibrations of the membrane with amplitude depending linearly on the incident light intensity. As a source of the incident light we used lasers of three different wavelengths: 488, 633, and 1600 nm. The experimental results are presented in Fig. 3, where we show the photodetector amplitude as a function of the incident light intensity. The response of the photodetector is highly linear and achromatic. The measured signal-to-noise ratio at the incident light power of 20  $\mu$ W was about 10. Thus we estimated the sensitivity of the photodetector as 2  $\mu$ W taking it as a noise-equivalent power. It is of note that in the experiments with the vacuum chamber the noise level was nearly 30 times as high as that in the experiments with the calibration using piezo-driven mirror. Apparently, the increase in noise is associated with membrane

1. Ashkin A. History of optical trapping and manipulation of small-neutral particle, atoms, and molecules, *IEEE J. Selected Topics in Quantum Electronics*, 2000, Vol. 6, pp. 841-56.

2. Neuman K.C., Block S.M. Optical trapping, *Rev. Sci. Instrum.* 2004, Vol. 75, pp. 2787-809.

3. Petrov V.M., Hahn J., Petter J., Petrov M.P., Tschudi T. Precise subnanometer control of the position of a macro-object by light pressure, *Opt. Lett.*, 2005, Vol. 30, pp. 3138-40.

4. Stepanov S.I. Application of photorefractive crystals, *Rep. Prog. Phys.*, 1994, Vol. 57, pp. 39-116.

5. Garrett M.H., Chang J.Y., Jenssen H.P., Warde C. Self-pumped phase conjugation and four-

imperfections that scatter the signal wave. Therefore, the improvement of the membrane quality should allow reaching the sensitivities in excess of 1  $\mu$ W.

#### Conclusion

In order to measure the light pressure we propose a new configuration of the adaptive photorefractive interferometer with highly efficient  $45^{\circ}$ -cut BaTiO<sub>3</sub> : Co crystal. In this setup the two orthogonal linear polarization components of the signal wave play different roles. One of them builds up the photorefractive grating interfering with the reference wave inside the crystal but does not contribute to the output signal of the interferometer. The other component is reflected by the photorefractive grating and is mixed with the reference wave by the polarizer, which yields the output signal. The phase shift between two polarization components is controlled by the phase retarder that allows the linear phase demodulation using the crystal with nonlocal, local or mixed photorefractive response. We have applied this interferometer for measurements of light pressure. It was experimentally found that the sensitivity was 2  $\mu$ W over a wide spectral range. Our experimental results make possible to suggest a new type of the photodetectors based on the interferometric measurement of the light pressure.

#### REFERENCES

wave mixing in  $0^{\circ}$ - and  $45^{\circ}$ -cut *n*-type BaTiO<sub>3</sub>:Co, *Opt. Lett.* 1993, Vol. 15, pp. 405-7.

6. Garrett M.H., Chang J.Y., Jenssen H.P., Warde C., High photorefractive sensitivity in an *n*-type  $45^{\circ}$ -cut BaTiO<sub>3</sub> crystal, *Opt. Lett.* 1992, Vol. 17, pp. 103-5.

7. Ing R.K., Monchalin J.-P. Broadband optical detection of ultrasound by two-wave mixing in a photorefractive crystal, *Appl. Phys. Lett.*, 1991, Vol. 59, pp. 3233-5.

8. Paivasaari K., Kamshilin A.A., Prokofiev V.V., Sturman B.I., Calvo G.F., Carrascosa M., Agullo-Lopez F. Linear phase demodulation in photorefractive crystals with nonlocal response, *J. Appl. Phys.*, 2001, Vol. 90, pp. 3135-41.

#### THE AUTHORS

PETROV Victor M.

St. Petersburg State Polytechnical University,

29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.

#### KHOMENKO Anatoliy V.

Ensenada Center for Scientific Research and Higher Education, Carretera Ensensds-Tijuana 3918, Zona Playitas, 22860, Ensenada, Baja Clifornia, Mexico.

#### KRINITSKY Yakov A.

St. Petersburg State Polytechnical University,29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia.

#### GARCIA Alexandro M.

*Ensenada Center for Scientific Research and Higher Education,* Carretera Ensensds-Tijuana 3918, Zona Playitas, 22860, Ensenada, Baja Clifornia, Mexico.

# Петров В.М., Хоменко А.В., Криницкий Я.А., Гарсиа А.М. ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ДАВЛЕНИЯ СВЕТА ПОСРЕДСТВОМ ДВУХВОЛНОВОГО СМЕШЕНИЯ В ФОТОРЕФ-РАКТИВНОМ КРИСТАЛЛЕ BaTiO<sub>3</sub>: Co.

Сообщается о высокочувствительном детектировании давления светового излучения с использованием адаптивного интерферометра на основе фоторефрактивного кристалла BaTiO<sub>3</sub>:Со со срезом 45°. Для измерений с небольшой фазовой модуляцией была использована поляризационная фильтрация, которая обеспечивает линейный режим детектирования сигнала в фоторефрактивном кристалле с нелокальным откликом. Показано, что разработанный инструмент для измерения давления света можно использовать в качестве широкополосного фотодетектора. Экспериментально установлено, что чувствительность составляет 2 мкВт в диапазоне длин волн 488 – 1600 нм.

АДАПТИВНЫЙ ГОЛОГРАФИЧЕСКИЙ ИНТЕРФЕРОМЕТР, ДАВЛЕНИЕ СВЕТА, ДВУХВОЛНОВОЕ СМЕШЕНИЕ, ФОТОРЕФРАКТИВНЫЙ КРИСТАЛЛ, ВЫСОКОЧУВСТВИТЕЛЬНОЕ ДЕТЕКТИРОВАНИЕ, ШИРОКОПОЛОСНЫЙ ФО-ТОДЕТЕКТОР.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ashkin A. History of optical trapping and manipulation of small-neutral particle, atoms, and molecules// IEEE J. Selected Topics in Quantum Electronics. 2000. Vol. 6. P. 841-856.

2. Neuman K.C., Block S.M. Optical trapping// Rev. Sci.. Instrum. 2004. Vol. 75. P. 2787-2809.

3. Petrov V.M., Hahn J., Petter J., Petrov M.P., Tschudi T. Precise subnanometer control of the position of a macro-object by light pressure// Opt. Lett. 2005. Vol. 30. P. 3138-3140.

4. **Stepanov S.I.** Application of photorefractive crystals// Rep. Prog. Phys. 1994. Vol. 57. P. 39-116.

5. Garrett M.H., Chang J.Y., Jenssen H.P., Warde C. Self-pumped phase conjugation and four-

wave mixing in  $0^{\circ}$ - and  $45^{\circ}$ -cut *n*-type BaTiO<sub>3</sub>:Co// Opt. Lett. 1993. Vol. 15. P. 405-407.

6. Garrett M.H., Chang J.Y., Jenssen H.P., Warde C. High photorefractive sensitivity in an n-type 45°-cut BaTiO<sub>3</sub> crystal // Opt. Lett. 1992. Vol. 17. P. 103-105.

7. **Ing R.K., Monchalin J.-P.** Broadband optical detection of ultrasound by two-wave mixing in a photorefractive crysta // Appl. Phys. Lett. 1991. Vol. 59. P. 3233-3235.

8. Paivasaari K., Kamshilin A.A., Prokofiev V.V., Sturman B.I., Calvo G.F., Carrascosa M., Agullo-Lopez F. Linear phase demodulation in photorefractive crystals with nonlocal response // J. Appl. Phys. 2001. Vol. 90. P. 3135-3141.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ПЕТРОВ Виктор Михайлович — доктор физико-математических наук, профессор кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. 195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 vikpetroff@mail.ru

**ХОМЕНКО Анатолий Васильевич** — научный сотрудник департамента прикладной оптики университета г. Энсенада, Мексика.

Carretera Ensenada-Tijuana 3918, Zona Playitas, 22860, Ensenada, Baja California, Mexico

**КРИНИЦКИЙ Яков Андреевич** — аспирант кафедры квантовой электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 jackobian@inbox.ru

**ГАРСИЯ Алехандро Мария** — аспирант департамента прикладной оптики университета г. Энсенада, Мексика.

Carretera Ensenada-Tijuana 3918, Zona Playitas, 22860, Ensenada, Baja California, Mexic

# ФИЗИЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРОНИКА

UDC 537.533.9

#### A.N. Andronov

St. Petersburg State Polytechnical University

## SECONDARY ELECTRON EMISSION AT VERY LOW ELECTRON ENERGY

A detailed review of experimental and theoretical studies of secondary electron emission (SEE) at low electron energies performed in the past has been given in this paper. It is shown that some present-day authors' statement on increase of the SEE yield up to unity while the primary electron energy tends to zero does not have sufficient theoretical justification and is inconsistent with the numerous experimental data obtained for various materials.

SECONDARY ELECTRON EMISSION, THERMIONIC EMISSION, LOW PRIMARY ENER-GIES, ELECTRON REFLECTION FROM POTENTIAL BARRIER, CONTACT POTENTIAL DIF-FERENCE.

#### I. Introduction

Secondary electron emission (SEE) from solids plays an important role in many areas of science and technology [1]. In the last few years, there has been a substantial renewed interest in the experimental and theoretical studies of SEE. A recent study proposed that the reflectivity of very low energy electrons from solid surface approaches unity in the limit of zero electron energy [2 - 4]. If this were the case indeed, this effect would have a profound impact on the formation of electron clouds in particle accelerators, plasma measurements with electrostatic Langmuir probes, and operation of Hall plasma thrusters for spacecraft propulsion [5, 6]. It turns out that the proposed high electron reflectivity at low electron energies is inconsistent with numerous previous experimental data obtained for secondary electron emission [7].

The goal of this article is to discuss possible causes of these contradictions.

#### II. Theoretical Description of Secondary Electron Emission in the Limit of Low Energy

#### A. Electron Reflection from the Surface Potential Barrier

According to quantum-mechanical laws,

certain electrons falling on the vacuum-solid interface are reflected from it without penetration into the solid. Strict calculation of the reflection coefficient taking into account the atomistic potential field, the electrons' interaction with each other and inelastic interactions with the crystal lattice is impossible in principle in the framework of quantum mechanics. In this connection all known theories of electron reflection use a one-dimensional model of the real potential (Fig. 1), and consider only the part of the electron kinetic energy that is associated with the velocity component normal to the surface:  $E_k = mv_x^2/2$ .

In recent years several articles have been published where authors propose to describe the effective potential in the form of an abrupt potential step of height  $V_i$  at the interface (see potential *I* in Fig. 1) [1, 2]. Quantum reflectivity *R* at such a barrier is described by the simple expression

$$R = \left[\frac{E_k^{\frac{1}{2}} - E_s^{\frac{1}{2}}}{E_k^{\frac{1}{2}} + E_s^{\frac{1}{2}}}\right]^2,$$
 (1)

where  $E_s = E_k + eV_i$  ( $V_i$  – internal potential). The results of relevant calculations are

The results of relevant calculations are shown in Fig. 2.

Authors of Refs. [2-4] proposed an un-

VL  $E_{k}$   $e\phi$   $E_{i}$   $E_{i}$ 

Fig. 1. One-dimensional approximation for the effective potential acting on the electron crossing the metal surface: sharp step barrier (1); barrier of the image force (2); Bloch model (3);  $E_k$ ,  $E_s$  – kinetic energies of the electron in vacuum and inside the metal, respectively;  $E_F$  – Fermi energy;  $V_i$  – internal potential;  $\varphi$  – work function; VL, FL – vacuum and Fermi levels, respectively; BCB – the bottom of the conduction band

realistically high value for internal potential (150 eV) to obtain agreement with their own experimental data (Fig. 2, curve 1). J. Cazaux [1] used the same model with a more realistic value  $V_i$  (12.1 V for Cu), and adoption of those values led to a more rapid decrease in R with increasing energy (Fig. 2, curve 2). But in any case R tends to unity as energy approaches zero for a sharp step barrier model.

Yet, nearly 100 years ago, W. Schottky [7] proved that electron interaction with the real surface of a solid target could not be described by a potential barrier with a sharp step. This allowed him to calculate the dependence of thermionic emission current on the external electric field, and this result was very well confirmed by experiment (the socalled Schottky effect). A similar approach was used later in a one-dimensional model of the effective potential near the surface of metal, and this one is now considered to be the best approximation to the real conditions.

According to this model an electron experiences an image force at distances x more

than interatomic one in solids when the metal surface can be considered as perfectly smooth and perfectly conducting. At shorter distances the metal surface cannot be considered as perfectly smooth, and the work function is determined by the dipole moments of surface atoms, preventing the exit of electrons into vacuum. In this region the potential is nearly constant and equal to the inner potential  $V_i$  of the solid which depends on material (see barrier 2 in Fig. 1). In that case the dependence of the effective potential V in vacuum on the distance x to the surface in absence of an external electric field is written as

$$V(x) = \begin{cases} -e^2/4x & \text{at } x \ge x_1; \\ -V_i = -e^2/4x_1 & \text{at } x \le x_1. \end{cases}$$
(2)

Quantum-mechanical reflectivity R of slow electrons at the barrier of such a form is taken into account in the Richardson law for the thermionic emission current density J [9]:





Step Potential (1, 2) at  $V_i = 150$  V (1) [2 - 4]and at  $V_i = 12.1$  V (2) [1]; Image Force (3, 4)using WKB at  $V_i = 12.0$  V (3) [10] and numerical solution (4) [13]

$$J = A_0 T^2 D \exp(-e\varphi/kT), \qquad (3)$$

where  $A_0$  is the Sommerfeld constant,  $A_0 = 120.4$  A/cm<sup>2</sup>K<sup>2</sup>; *D* is the average transparency of the barrier, D = 1 - R;  $\varphi$  is a local work function of the sample, *k* is the Boltzmann constant, and *T* is an absolute temperature.

The Richardson law has been tested experimentally a lot of times and data obtained indicated that the average reflection coefficient of thermal electrons (energy in vacuum is less than 0.1 eV) did not exceed 10 %.

In the quantum-mechanical methods for the calculation of the barrier transparency the wave function inside the solid is always described by a plane wave. Outside the solid various approaches are possible and then both wave functions are cross-linked at interface.

So in the works [10, 11], the semiclassical Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) approximate solution of the wave equation was applied to problems of the transmission of electrons through potential barriers (Fig. 2, curve 3). In this case, the reflection coefficient can be described [10] by the expression

$$R = \frac{(eV_i)^4}{16(E_k + eV_i)^3 + (eV_i)^4}.$$
 (4)

Here all the energies are in electron-volts.

In a more accurate calculation the wave function outside the solid is described by degenerate hypergeometric functions, and the solution is obtained using numerical methods [12, 13] (Fig. 2, curve 4).

Thus the results of the most accurate estimations show that the quantum-mechanical coefficient of reflection at the surface potential barrier when  $E_k = 0$  is a few percent (< 4.5 % for Cu), but other than unity.

### B. Diffraction of Electrons at the Surface Potential Barrier

The Bragg reflection is often cited as the probable cause of the high reflection coefficient of the electrons incident on the surface [22]. This effect is possible if the electron with a certain energy and a direction has no allowed energy states within the solid. In this case, the electron cannot move inside and is to be reflected with a coefficient R = 1.

Theoretical description of such reflection in a one-dimensional model needs to take into

account the periodicity of potential within the solid and the condition that the potential box with a flat bottom (see barrier 2 in Fig. 1) is replaced with a box (see barrier 3, ibid.) whose bottom is profiled with the same periodicity (the Bloch theorem) [14]. Theoretical calculations for tungsten performed by this means [15] brought out that Bragg reflection should not take place at any crystallographic orientation of the sample surface. Many other researchers have also found that Bragg reflection could not play a significant role for low-energy electrons due to interference of Bloch waves in solids [22].

One more proof of the small value of the reflection coefficient at low energies is another diffraction effect, namely, periodic deviations from the Schottky law at high primary energies [16, 17]. The cause of this is that the electron waves are scattered both by the solid surface and by the maximum potential in vacuum. The distance between that maximum and that surface depends on the external electric field value and is responsible for resulting interference of these two waves scattered [18]. A detailed theory of this phenomenon [19–21] vielded good agreement with experiment, and in particular showed [22, 19] that the low-energy reflection coefficient is small and of the same order as the data of Ref. [13] (see curve 4 in Fig. 2).

Thus, the diffraction effects discussed above should not lead to a noticeable increase in the reflectivity of primary electrons at very low energies.

### C. The Reflection from the Heterogeneous Surface (Fields of Patches)

The actual technological materials are, as a rule, polycrystalline (sometimes amorphous) and also their surface is always covered by adsorbate. This condition can cause the appearance of the surface areas with different work functions, and the contact potential difference arises between them. In certain situations, these contact fields (so-called «fields of patches») can lead to a substantial increase of electron reflection from inhomogeneous surface. This matter was discussed in detail by C. Herring and M.H. Nichols [22] who discovered that in the worst case, the maximum reflectivity at low energies did not exceed 60 %.

#### D. Backscattering in Volume of Solids

Additional contribution to the elastic reflection is caused by electrons scattered inside a solid target. Incident primary electrons are accelerated by the surface potential barrier to the value

$$E_{\rm s} = E_{\rm k} + E_{\rm F} + e\varphi = E_{\rm k} + eV_{\rm i}$$

(see Fig. 1) and then they penetrate the solid target as deep as 50 - 100 Å [23, 24]. Electrons lose their energy in that act, produce secondary electrons, and are also elastically scattered by atoms of the solid. This scattering can be described as a spherical electron wave, which is usually expanded in series of spherical functions (Legendre polynomials)  $P_i$  (l = 0, 1, 2, ...) [25]. Each term of this series describes the partial wave with angular momentum

$$h/_{2\pi}\sqrt{l(l+1)},$$

where h is the Planck constant.

At  $E_k < 10$  eV the wavelength  $\lambda$  of the electron is much greater than the interatomic distance  $r_{eff}$ :

$$\frac{\lambda}{2\pi} = \frac{h}{2\pi p} >> r_{eff}, \qquad (5)$$

where *p* is an electron momentum.

It means that the product of momentum and effective radius that determines the angular momentum should be subject to the inequality

$$\hbar >> pr_{eff} = \hbar [l(l+1)]^{1/2},$$
 (6)

that could be satisfied only when l = 0.

Thus, only one zero term remains in the series expansion (so-called s-scattering). It is an isotropic one, its cross-section is determined by the atomic number of scattering atoms and does not depend on energy. Then only a half of electrons elastically scattered are scattered by an angle of more than  $\pi/2$  (back-scattered electrons). These electrons also undergo the elastic and inelastic scattering on their way back to the surface, and only their small fraction reaches the surface with an initial energy  $E_{s} \geq eV_{i}$ . When an electron passes through the surface potential barrier in vacuum, only the electron momentum component normal to the surface changes whereas the parallel one does not. Therefore, if an electron has small kinetic energy  $E_k$  in vacuum, this electron cannot overcome the potential barrier after scattering on atoms unless it scattered exactly backward by 180°. In the limit  $E_k \rightarrow 0$ , the contribution of these back-scattered electrons to the total elastic reflection tends to zero (not to unity). Thus, this process also does not increase the elastic reflection up to a full 100 percent reflection with the kinetic energy of the electrons in vacuum decreasing to zero.

#### E. True Secondary Electron Emission

It is commonly accepted [7] that the total secondary electron yield  $\sigma$  is only a sum of true secondary emission coefficient  $\delta$  and the coefficient R of elastic reflection when the primary electrons energy is less than 50 eV (electrons back-scattered inelastically are ignored). The penetration depth of primary electrons with very low energies  $E_k$  into a solid is much smaller than the escape depth of secondary electrons excited inside, and because of this fact all such electrons can escape into vacuum with some probability P depending on the properties of the target material. Then

$$\delta = P \frac{E_{\kappa} + eV_i}{\Delta E} \text{ at } E_{\kappa} = E_s - eV_i \ge 0, \quad (7)$$

where  $\Delta E$  is an average energy needed to excite one secondary electron.

Thus  $\delta \to 0$  at  $E_k \to 0$ , and total secondary yield is determined by reflection coefficient only.

In summary, the correct theoretical description of the secondary electron emission in the limit of very low energy reveals that the total secondary electron yield does not exceed 60 % and its value is much less in most cases.

#### III. Experimental Considerations of the Secondary Electron Emission Yield at Very Low Energy

#### A. Specific Features and Challenges of Secondary Emission Measurements

Experimental measurements at low incident electron energy, below 1 eV, are extremely challenging. It is very difficult (if at all possible in the present day) to produce a collimated aligned electron beam at such low energy. Another problem is that a monochromatic electron beam is required to obtain the correct experimental data at these energies. In the current state of the art a technique of obtaining electron beams with the energy spread about 10 meV is being developed; it is used in High-Resolution Electron-Energy-Loss Spectroscopy (HREELS) [26 - 28], but at higher energies of primary electrons (a few electron-volts). In addition, this method allows making only relative, not absolute estimates of the number of secondary electrons.

For this reason, electron thermionic guns without a monochromator are commonly used in experiments to determine SEE yield at very low energies [1]. These guns have a rather broad electron energy spread (a full-width at half maximum (FWHM) is of 0.5 eV at best) which is not negligible with respect to electron energy. This calls into question the experimental data obtained at lower energies. In addition the true energy of primary electrons arriving at the surface of the sample is determined not only by the potential difference between the cathode of the gun and the surface but also by the contact potential difference between them.

Two basic approaches to such measurements have been developed. The first one (hereafter referred to as method 1) is to create an electron-optical system for the electron gun to be stable at energies of 2-5 eV with the proper neutralization effect of parasitic electric and magnetic fields [7]. In another approach (method 2), the accelerating voltage of the electron gun is kept constant (30 V in Ref. [3]) and the incident energy is decreased by an increase of the negative bias of the sample instead of a decrease of the nominal beam energy. Such a bias leads to constant potential surfaces in the vacuum gap on which the incident electrons may be totally reflected and then collected without any contact with the sample surface [1]. It may be wrongly interpreted as an increase of the reflection coefficient from the solid to unity whereas the energy of primary electrons tends to zero.

A similar experimental setup is commonly used to measure a contact potential difference between a cathode and a target with the help of an electron beam (so-called «the Anderson method» [29–31]). In this case it is very important that the primary electrons moving to the target in the nonuniform retarding electric field have to cross its field lines strictly normal to them all along their way. If this condition is not satisfied electrons deviate from the initial trajectory and acquire a velocity component  $v_{tang}$ parallel to the sample surface. Correspondingly, the normal component  $v_x$  should be reduced as well. As a result, the initial part of the dependence of the measured secondary emission current from retarding voltage (socalled «retarding curve») could expand up to several electron-volts because of the spread of  $v_x$  in the primary electron beam.

It is difficult to say anything with certainty without knowing the details of the experimental adjustment position of the electron beam at the sample surface in Ref. [3], but the effect mentioned above might well be one of the probable causes of the increase of the electron reflection to unity and a rather broad initial part of the curve 1 in Fig. 3. For comparison, this figure shows the results (obtained earlier by method 1) for the copper film deposited and heated in vacuum [32] (see curve 2 in Fig. 3).

It is evident from Fig. 3 that there is sufficiently good agreement between two



Fig. 3. Experimental total secondary electron emission yield of Cu as a function of low primary electron energy  $E_k$ , obtained by methods 1 (1) [32] and 2 (2) [3];

samples were heated in vacuum, room temperature (*I*); were fully scrubbed, T = 10 K (2) data sets for  $E_k > 10$  eV, but there are drastic differences for  $E_k < 10$  eV. However, the data of Ref. [3] were taken for a cryogenically cooled target whereas data of Ref. [32] were taken at normal conditions. But we do not know now any convincing arguments why this might lead to such a significant difference in the results.

To conclude this brief overview of the experimental challenges of measuring secondary emission at very low energies we should once again remind that method 2, which is used in most of the works of our time, is very sensitive to all kinds of inaccuracies in the tuning of the experimental equipment. For this reason, there is a very large discrepancy in the experimental data of different researchers. For example, making use of such approach authors of Ref. [33] reported a reflection coefficient of 40 % whereas authors of Ref. [34] reported a reflection coefficient of 100 %.

Therefore, to compare theory with experi-

mental data, it is preferable to use the results obtained without the deceleration of electrons on the way from the gun to the sample (method 1). Some of the similar results will be presented in the next section as an example.

#### **B.** Experimental Data on the SEE Yield of Some Materials at Low Primary Energies

Most measurements of secondary emission of various materials using low-voltage electron guns (method 1,  $E_k > 2 \text{ eV}$ ) were made in the middle of the last century in the former Soviet Union (e. g. [7, 35–38 and others]). A very large part of these measurements (though not all of them) was made by the research team of Professor I.M. Bronstein, who was then known as the "Mendeleev of secondary emission" [39].

For illustration the measurement results for secondary emission properties of some materials at low primary energies are given in Fig. 4.



Fig. 4. Experimental data on total SEE yield (a) and reflectivity (b) as a function of low primary energies for MgO (1) [38], Au (2), Ag (3), Al (5), Ni (6) [32, 35] and Ta (4) [36] samples, subjected to thermal cleaning in vacuum

Similar results were also obtained for


Fig. 5. SEE of tantalum samples as a function of low primary energies at various stages of their thermal cleaning in vacuum [36]: untreated (1), T = 1300 °C for 2 h (2), T = 2000 °C for 5 min (3), T = 2300 °C for 10 h (4)

other materials such as Mo [36], Pt and single crystals of Cu [40] and Ge [40, 41], number of refractory metals and alloys [42], different faces of a W single crystal [43, 44], some oxides [45] and alkali-halide compounds [46–48], and that is not a complete list of earlier publications.

Nevertheless, no one received then any reliable experimental evidence that SEE yield tends to increase up to unity at  $E_{\nu} < 2$  eV.

Another problem seeing a rebirth of interest nowadays [1, 2 - 4, 49] is the influence of surface contamination, adsorbates and previous pre-treatment of the sample surface on secondary emission at low energies.

This question was also highlighted in the past when it was shown that the surface cleanliness was a key factor of correct SEE yield measurement at low energies and that all untreated metals were characterized by their very similar dependences on primary energy [7].

Experimental results dealing with the change of secondary emission properties of tantalum in

the process of thermal cleaning in vacuum are presented as an example in Fig. 5.

At the same time the SEE yield of contaminated surfaces is always less than unity when primary energies are low although its value is usually significantly higher than that of the samples subjected to vacuum cleaning.

Thus a lot of experimental data do not support the hypothesis that the total SEE yield should tend to unity when the energy tends to zero.

#### **IV.** Conclusion

In summary, we have presented an analysis of some theoretical and instrumental problems which arise when the energy of primary electrons striking the sample is very low. It has been demonstrated that the theoretical model in Refs. [1, 3] is too simplified and leads to an incorrect conclusion about increasing secondary emission yield up to unity in the limit of very low-energy primary electrons. This conclusion is supported by numerous previous experimental studies of secondary emission properties of various materials at low electron energies which have shown that in most cases the value of this coefficient should not exceed a few percent at energies below 1 eV. Therefore we do not see satisfactory arguments in favour of the statement that closeness to unity of secondary emission coefficient at low energies is the main origin of electron clouds in different plasma systems.

Unfortunately, a lot of present-day physicists are not very familiar with the theoretical and experimental results obtained at the beginning of the last century. This publication is trying to remind everyone these results and recall that we should not once again "reinvent the wheel", since it does not always lead to the desired results. "The new is well-forgotten old".

#### Acknowledgment

I am deeply grateful to A.S. Smirnov, a professor of St. Petersburg State Polytechnical University, and I. Kaganovich and Y. Raitses, key employees of Plasma Physics Laboratory at Princeton University (PPPL), for suggesting this problem and for extremely useful discussions.

#### REFERENCES

1. **Cazaux J.** Reflectivity of very low energy electrons (< 10 eV) from solid surfaces: Physical and instrumental aspects. *J. Appl. Phys.*, 2012, Vol. 111, pp. 064903 (1-10).

2. **Cimino R., Collins I.R.** Vacuum chamber surface electronic properties influencing electron cloud phenomena. *Applied Surface Science*, 2004, Vol. 235, pp. 231-235.

3. Cimino R., Collins I.R., Furman M.A., Pivi M., Ruggiero F., Rumolo G., Zimmermann F. Can low-energy electrons affect high-energy physics accelerators? *Phys. Rev. Lett.*, 2004, Vol. 93, pp. 014801 (4 p.).

4. Cimino R. Surface related properties as an essential ingredient to *e*-cloud simulations. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research* A, 2006, Vol. 561, pp. 272-275.

5. Tondu T., Belhaj M., Inguimbert V. Electronemission yield under electron impact of ceramics used as channel materials in Hall-effect thrusters. *J. Appl. Phys.*, 2011, Vol. 110, pp. 09330 (1-14).

6. Raitses Y., Kaganovich I.D., Khrabrov A., Sydorenko D., Fisch N.J., Smolyakov A. Effect of secondary electron emission on electron cross-field current in  $E \times B$  discharges. *IEEE Transactions on Plasma Science*, 2011, Vol. 39, pp. 995-1006.

7. Bronshtein I.M., Fraiman B.S. Secondary electron emission (monograph). Moscow, Russia: Atomizdat, 1969, 408 p. (rus)

8. Schottky W. Influence of structure-action especially the Thomson constructive force, on the electron emission of metals. *Physik. Zeitschr.*, 1914, Vol. 15, p. 872.

9. Dushman S. Thermionic emission. *Rev. Mod. Phys.* 1930, Vol. 2, pp. 381-476.

10. Frank N.H., Young L.A. Transmission of electrons through potential barriers. *Phys. Rev. Lett.* A., 1938, Vol. 38, Iss. 1, pp. 80-86.

11. Sommerfeld A., Bethe H. Electron theory of metals. Handbook of Physics. Berlin, Springer, 1933.

12. Nordheim L.W. The effect of the image force on the emission and reflexion of electrons by metals. *Proc. R. Soc. Lond.* A, 1928, Vol. 121, pp. 626-639.

13. MacColl L.A. Numerical calculations of the reflection of electrons by metals. *Phys. Rev.*, 1939, Vol. 56, Iss. 7, pp. 699-702.

14. **Bloch F.** Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. Zeitschrift für Physik. A. Hadrons and Nuclei, Springer, 1929.

15. Manning M.F., Chodorow M.I. Electronic energy bands in metallic tungsten. *Phys. Rev.*, 1939,

Vol. 56, pp. 787-798.

16. Seifert R.L.E., Phipps T.E. Evidence of a periodic deviation from the Schottky line. *Phys. Rev.*, 1939, Vol. 56, pp. 652-663.

17. **Turnbull D., Phipps T.E.** Evidence of a periodic deviation from the Schottky line. *Phys. Rev.*, 1939, Vol. 56, pp. 663-667.

18. Mott-Smith H.M. The periodic deviation from the Schottky line. *Phys. Rev.*, 1939, Vol. 56, No. 7, pp. 668-669.

19. Guth E., Mullin C.J. Electron emission of metals in electric fields. I. Explanation of the periodic deviations from the Schottky line. *Phys. Rev.*, 1941, Vol. 59, No. 7, pp. 575-584.

20. Guth E., Mullin C.J. Electron emission of metals in electric fields II. Field dependence of the surface photo-effect. *Phys. Rev.* 59, 1941, Vol. 59, No. 11, pp. 867-873.

21. Guth E., Mullin C.J. Electron emission of metals in electric fields III. The transition from thermionic to cold-emission. *Phys. Rev.*, 1942, Vol. 61, No. 5-6, pp. 339-348.

22. Herring C., Nichols M.H. Thermionic emission. *Reviews of Modern Physics*, 1949, Vol. 21, No. 2, pp. 185-270.

23. Seah M.P., Dench W.A. Compilation of experimental data determined with various electron energies for a large variety of materials. *Surf. Inter-face Anal.* 1979, Vol. 1, p. 2.

24. Ziaja B., London R.A., Hajdu J. Ionization by impact electrons in solids: Electron mean free path fitted over a wide energy range. *J. Appl. Phys.*, 2006, Vol. 99, pp. 033514 (1-9).

25. Landau L.D., Lifshitz E.M. Quantum mechanics, non-relativistic theory: Vol. 3 of Course of Theoretical Physics, JB Sykes, JS Bell, ME Rose, Physics Today, 1958.

26. Willis R.F. Vibrational spectroscopy of adsorbates. Springer Series in Chemical Physics, 1980, Vol. 15, p. 180.

27. **Ibach H., Mills D.L.** Electron energy loss spectroscopy and surface vibrations. San Diego; Toronto: Academic Press., 1982, 366 p.

28. Liehr M., Thiry P.A., Pireaux J.J., Caudano R. Characterization of insulators by high-resolution electron-energy-loss spectroscopy: Application of a surface-potential stabilization technique. *Phys. Rev.* B, 1986, Vol. 33, Iss. 8, p. 5682-97.

29. Anderson P.A. A Direct comparison of the Kelvin and electron beam methods of contact potential measurement. *Phys. Rev.*, 1952, Vol. 88, pp. 655-658.

30. Fritz J.H., Hague C.A. Measurement of work function change in a display-Type LEED-Auger apparatus. *Rev. Sci. Instrum.*, 1973, Vol. 44, p. 394 (2 p.).

31. **Haas G.A.** Surface analysis using complementary electronic and chemical measurements. *J. Vac. Sci. and Technol.*, 1976, Vol. 13, pp. 479-486.

32. Bronshtein I.M., Roshchin V.V. Reflection of electrons and secondary electron emission from some metal surfaces at low primary electron energy. *Sov. J. Tech.-Phys.*, 1958, No. 3, p. 2271.

33. **Zollweg R.J.** Electron reflection from tungsten crystals, clean and with adsorbed Cs and CO. *Surface Sci.*, 1964, No. 2, pp. 409-417.

34. Niedermayer R., Hölzl J. Reflection of very slow electrons on metal surfaces. *Phys. Stat. Solidi*, 1965, Vol. 11, pp. 651-656.

35. Bronstein I.M., Roschin V.V. Electron reflection and secondary emission from metal surfaces at low energies of primary electrons. *Technical Physics. The Russian Journal of Applied Physics*, 1958, Vol. 28, No. 10, p. 2200, No. 11, p. 2476. (rus)

36. **Bronstein I.M.** Electron reflection and secondary emission from metal surfaces at low energies of primary electrons. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics* (Izvestiya RAN. Seriya fizicheskaya), 1958, Vol. 22, No. 4, p. 441. (rus)

37. Gorodetskiy D.A. The reflection of slow electrons from the surface of some metals and semiconductors. *Journal of Communications Technology and Electronics (Radiotekhnika i elektronika*), 1958, Vol. 3, No. 3, p. 345. (rus)

38. Borisov V.L., Khlystov V.D. Secondary emission of the MgO films at low electron energies. *Journal of Communications Technology and Electronics* (*Radiotekhnika i elektronika*), 1963, Vol. 8, No. 9, p. 1626. (rus)

39. Bronstein I.M., Fraiman B.S. Secondaryemission properties of metals and semiconductors, and the periodic system of elements. *Physics of the Solid State (Fizika Tverdogo Tela)*, 3, No 10, 1961, pp. 3220. (rus)

40. Fowler H.A., Farnsworth H.E. Reflection of very slow electrons. *Phys. Rev.* 1958, Vol.111, No. 1, pp. 103-112.

41. Shulman A.R., Ganichev D.A. SEE and elastically scattered electrons from a single crystal of germanium at low electron energies. *Physics of the Solid State (Fizika Tverdogo Tela)*, 1960, Vol. 2, No. 3, p. 530. (rus)

42. Bronstein I.M., Karasik B.S., Ignatov V.S. Elastically scattering of electrons and secondary electron emission of metals and alloys of refractory metals at low energies of primary electrons. XXIII Herzen's reading on physical and semiconductor electronics V.S., Leningrad Herzen Institute, 1970, pp. 22-25 (rus)

43. **Kisliuk P.** Reflection of slow electrons from tungsten single crystals. Clean and with adsorbed monolayers. *Phys. Rev.*, 1961, Vol. 122, No. 2, pp. 405-411.

44. Shulman A.R., Ganichev D.A. SEE and elastic reflection of slow electrons from different faces of a single crystal of tungsten. *Physics of the Solid State (Fizika Tverdogo Tela)*,1962, Vol. 4, p. 745. (rus)

45. Bazhanova N.P., Belevsky V.P., Fridrikhov S.A. SEE oxides of barium and yttrium at low primary electron energies (1-100) eV. *Physics of the Solid State (Fizika Tverdogo Tela)*, 1961, Vol. 3, No. 9, p. 2610. (rus)

46. Fridrikhov S.A., Goryacheva C.N. SEE of alkali halide crystals compounds at low primary electron energies. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences. Physics (Izvestiya RAN. Seriya fizicheskaya*), 1958, Vol. 22, No. 5, p. 486. (rus)

47. Schulman A.R., Fridrikhov S.A. Study of secondary emission of alkali halide crystals at low primary electron energies. *Physics of the Solid State (Fizika Tverdogo Tela)*, 1959, Vol. 1, No. 8, p. 1268. (rus)

48. Fridrikhov S.A. The SEE and elastic reflection of low-energy electrons from a single crystal NaCl. *Physics of the Solid State (Fizika Tverdogo Tela*), 1960, Vol. 2, No. 1, p. 171. (rus)

49. Larciprete R., Grosso D.R., Commisso M., Flammini R., Cimino R. Secondary electron yield of Cu technical surfaces: Dependence on electron irradiation. *Phys. Rev.*, Special topics. Accelerators and beams, 2013, No. 16,2013, pp. 011002 (1-9).

#### THE AUTHORS

ANDRONOV Alexander N.
St. Petersburg State Polytechnical University
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia andronov@rphf.spbstu.ru

## Андронов А.Н. ВТОРИЧНАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ ЭМИССИЯ ПРИ ОЧЕНЬ НИЗКИХ ЭНЕРГИЯХ ЭЛЕКТРОНОВ.

Приведен подробный обзор выполненных в прошлые годы экспериментальных и теоретических работ по вторичной электронной эмиссии (ВЭЭ) при низких энергиях электронов. Показано, что утверждение ряда современных авторов о возрастании до единицы коэффициента ВЭЭ, когда энергия первичных электронов приближается к нулю, не имеет достаточного теоретического обоснования и противоречит многочисленным экспериментальным данным для различных материалов.

ВТОРИЧНАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ ЭМИССИЯ, ТЕРМОЭЛЕКТРОННАЯ ЭМИССИЯ, НИЗКИЕ ЭНЕРГИИ ПЕРВИЧНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ, ОТРАЖЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ОТ ПОТЕНЦИАЛЬНОГО БАРЬЕРА, КОНТАКТНАЯ РАЗНОСТЬ ПОТЕН-ЦИАЛОВ

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Cazaux J.** Reflectivity of very low energy electrons (< 10 eV) from solid surfaces: Physical and instrumental aspects// J. Appl. Phys. 2012. Vol. 111, pp. 064903 (1-10).

2. **Cimino R., Collins I.R.** Vacuum chamber surface electronic properties influencing electron cloud phenomena // Applied Surface Science. 2004. Vol. 235, pp. 231-235.

3. Cimino R., Collins I.R., Furman M.A., Pivi M., Ruggiero F., Rumolo G., Zimmermann F. Can low-energy electrons affect high-energy physics accelerators? // Phys. Rev. Lett. 2004. Vol. 93, pp. 014801 (4 p.).

4. **Cimino R.** Surface related properties as an essential ingredient to *e*-cloud simulations// Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. A. 2006. Vol. 561, pp. 272-275.

5. Tondu T., Belhaj M., Inguimbert V. Electronemission yield under electron impact of ceramics used as channel materials in Hall-effect thrusters// J. Appl. Phys. 2011. Vol. 110, pp. 09330 (1-14).

6. Raitses Y., Kaganovich I.D., Khrabrov A., Sydorenko D., Fisch N.J., Smolyakov A. Effect of secondary electron emission on electron cross-field current in  $E \times B$  discharges// IEEE Transactions on Plasma Science. 2011. Vol. 39, pp. 995-1006.

7. Бронштейн И.М., Фрайман Б.С Вторичная электронная эмиссия. Монография. М.: Атомиздат, 1969. 408 с.

8. Schottky W. Influence of structure-action especially the Thomson constructive force, on the electron emission of metals// Physik. Zeitschr. 1914. Vol. 15, p. 872.

9. Dushman S. Thermionic emission // Rev. Mod. Phys. 1930. Vol. 2, pp. 381-476.

10. Frank N.H., Young L.A. Transmission of electrons through potential barriers// Phys. Rev. Lett. A. 1938. Vol. 38. Iss. 1, pp. 80-86.

11. Sommerfeld A., Bethe H. Electron theory of metals. Handbook of Physics. Berlin: Springer, 1933.

12. Nordheim L.W. The effect of the image force on the emission and reflexion of electrons by metals// Proc. R. Soc. Lond. A. 1928. Vol. 121, pp. 626-639.

13. **MacColl L.A.** Numerical calculations of the reflection of electrons by metals// Phys. Rev. 1939. Vol. 56. Iss. 7, pp. 699-702.

14. **Bloch F.** Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. Zeitschrift für Physik. A. Hadrons and Nuclei. Berlin: Springer, 1929.

15. Manning M.F., Chodorow M.I. Electronic energy bands in metallic tungsten // Phys. Rev. 1939. Vol. 56, pp. 787-798.

16. Seifert R.L.E., Phipps T.E. Evidence of a periodic deviation from the Schottky line // Phys. Rev. 1939. Vol. 56, pp. 652-663.

17. **Turnbull D., Phipps T.E.** Evidence of a periodic deviation from the Schottky line // Phys. Rev. 1939. Vol. 56, pp. 663-667.

18. **Mott-Smith H.M.** The periodic deviation from the Schottky line // Phys. Rev. 1939. Vol. 56. No. 7, pp. 668-669.

19. **Guth E., Mullin C.J.** Electron emission of metals in electric fields. I. Explanation of the periodic deviations from the Schottky line // Phys. Rev. 1941. Vol. 59. No. 7,pp. 575-584.

20. **Guth E., Mullin C.J.** Electron emission of metals in electric fields II. Field dependence of the surface photo-effect // Phys. Rev. 1941. Vol. 59. No. 11, pp. 867-873.

21. Guth E., Mullin C.J. Electron emission of metals in electric fields III. The transition from thermionic to cold-emission // Phys. Rev. 1942. Vol. 61. No. 5-6, pp. 339-348.

22. Herring C., Nichols M.H. Thermionic emission // Reviews of Modern Physics. 1949. Vol. 21. No. 2, pp. 185-270.

23. Seah M.P., Dench W.A. Compilation of experimental data determined with various electron energies for a large variety of materials // Surf. Interface Anal. 1979. Vol. 1. p. 2.

24. Ziaja B., London R.A., Hajdu J. Ionization by impact electrons in solids: Electron mean free path fitted over a wide energy range // J. Appl. Phys. 2006. Vol. 99. pp. 033514 (1-9).

25. Landau L.D., Lifshitz E.M. Quantum mechanics, non-relativistic theory: Vol. 3 of Course of Theoretical Physics, JB Sykes, JS Bell, ME Rose, Physics Today, 1958.

26. Willis R.F. Vibrational spectroscopy of adsorbates // Springer Series in Chemical Physics, 1980. Vol. 15. p. 180.

27. **Ibach H., Mills D.L.** Electron energy loss spectroscopy and surface vibrations. San Diego, Toronto: Academic Press, 1982. 366 p.

28. Liehr M., Thiry P.A., Pireaux J.J., Caudano R. Characterization of insulators by high-resolution electron-energy-loss spectroscopy: Application of a surface-potential stabilization technique // Phys. Rev. B. 1986. Vol. 33. Iss. 8. p. 5682-97.

29. Anderson P.A. A Direct comparison of the Kelvin and electron beam methods of contact potential measurement // Phys. Rev. 1952. Vol. 88. pp. 655-658.

30. Fritz J.H., Hague C.A. Measurement of work function change in a display-Type LEED-Auger apparatus // Rev. Sci. Instrum. 1973. Vol. 44. P. 394 (2 p.).

31. **Haas G.A.** Surface analysis using complementary electronic and chemical measurements // J. Vac. Sci. and Technol. 1976. Vol. 13, pp. 479-486.

32. Bronshtein I.M., Roshchin V.V. Reflection of electrons and secondary electron emission from some metal surfaces at low primary electron energy // Sov. J. Tech.-Phys. 1958. No. 3, p. 2271.

33. **Zollweg R.J.** Electron reflection from tungsten crystals, clean and with adsorbed Cs and CO // Surface Sci. 1964. No. 2, pp. 409-417.

34. Niedermayer R., Hölzl J. Reflection of very slow electrons on metal surfaces // Phys. Stat. So-lidi. 1965. Vol. 11, pp. 651-656.

35. Бронштейн И.М., Рощин В.В. Отражение электронов и ВЭ от металлических поверхностей в области малых энергий первичных электронов, I и II // ЖТФ. 1958. Т. 28. № 10. С. 2200; № 11. С. 2476.

36. **Бронштейн И.М.** Отражение электронов и ВЭ от металлических поверхностей в области малых энергий первичных электронов // Изв. АН СССР. Сер. Физическая. 1958. Т. 22. № 4. С. 441.

37. Городецкий Д.А. Отражение медленных электронов от поверхности некоторых металлов и полупроводников //Радиотехника и электро-

ника. 1958. Т. З. № З. С. 345.

38. Борисов В.Л., Хлыстов В.Д. ВЭ пленок MgO при малых энергиях электронов // Радиотехника и электроника. 1963. Т. 8. № 9. С. 1626.

39. **Бронштейн И.М., Фрайман Б.С.** Вторичноэмиссионные свойства металлов и полупроводников и периодическая система элементов // ФТТ. 1961. Т. 3. № 10. С. 3220.

40. Fowler H.A., Farnsworth H.E. Reflection of very slow electrons // Phys. Rev. 1958. Vol. 111. No. 1, pp. 103-112.

41. Шульман А.Р., Ганичев Д.А. ВЭ и упругое отражение электронов от монокристаллов германия при малых энергиях электронов // ФТТ. 1960. Т. 2. № 3. С. 530.

42. Бронштейн И.М., Карасик Б.С., Игнатов В.С. Упругое рассеяние электронов и вторичная электронная эмиссия металлов и сплавов переходной группы при низких энергиях первичных электронов // XXIII Герценовские чтения по физической и полупроводниковой электронике. Ленинградский педагогический ин-т им. А.И. Герцена, Л.: 1970. С. 22-25.

43. **Kisliuk P.** Reflection of slow electrons from tungsten single crystals. Clean and with adsorbed monolayers // Phys. Rev. 1961. Vol. 122. No. 2, pp. 405-411.

44. Шульман А.Р., Ганичев Д.А. ВЭ и упругое отражение медленных электронов от различных граней монокристалла вольфрама // ФТТ. 1962. Т. 4. № 3. С. 745.

45. Бажанова Н.П., Белевский В.П., Фридрихов С.А. ВЭ окисей бария и иттрия при малых энергиях первичных электронов (1 – 100 эВ) // ФТТ. 1961. Т. 3. № 9. С. 2610.

46. Фридрихов С.А., Горячева С.Н. ВЭ монокристаллов щелочно-галоидных соединений при малых энергиях первичных электронов // Изв. АН СССР. Сер. физическая. 1958. Т. 22. № 5. С. 486.

47. Фридрихов С.А., Шульман А.Р. Исследование ВЭ щелочно-галоидных монокристаллов при малых энергиях первичных электронов // ФТТ. 1959. Т. 1. № 8. С. 1268.

48. Фридрихов С.А. О ВЭ и упругом отражении медленных электронов от монокристалла NaCl // ФТТ. 1960. Т. 2. № 1. С. 171.

49. Larciprete R., Grosso D.R., Commisso M., Flammini R., Cimino R. Secondary electron yield of Cu technical surfaces: Dependence on electron irradiation // Phys. Rev. Special topics. Accelerators and beams. 2013. No. 16. P. 011002 (1-9).

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

АНДРОНОВ Александр Николаевич — кандидат физико-математических наук, профессор кафедры физической электроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. 195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 andronov@rphf.spbstu.ru

# БИОФИЗИКА И МЕДИЦИНСКАЯ ФИЗИКА

УДК 612.82

## Е.А. Попугаева, О.Л. Власова, И.Б. Безпрозванный

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

## РОЛЬ ВНУТРИКЛЕТОЧНОГО КАЛЬЦИЯ В РАЗВИТИИ ПАТОГЕНЕЗА БОЛЕЗНИ АЛЬЦГЕЙМЕРА

Данная статья является обзорной и содержит краткое описание современного состояния исследований в области изучения болезни Альцгеймера (БА). Особое внимание уделяется кальциевой гипотезе развития БА, которая набирает все больше сторонников и является альтернативной по отношению к доминирующей амилоидной гипотезе. На основании опубликованных и предварительных данных выносится предположение о возможном патологическом пути, имеющем место при БА.

БОЛЕЗНЬ АЛЬЦГЕЙМЕРА, КАЛЬЦИЙ, ДЕНДРИТНЫЙ ШИПИК, СИНАПС, ДВУХФО-ТОННАЯ МИКРОСКОПИЯ.

#### Введение

Болезнь Альцгеймера (БА) является наиболее распространенной формой прогрессирующей деменции у людей пожилого возраста. В настоящее время в странах Евросоюза деменция наблюдается более чем у шести миллионов человек, при этом БА встречается у каждого двадцатого европейца в возрасте старше 65 лет. На фоне растущего во всем мире числа людей, страдающих БА, растет и объем средств, выделяемых на борьбу с ней (более 604 млрд. дол. США в год (данные ВОЗ за 2012 год) тратится во всем мире). По мнению исследователей, к 2040 году эти показатели вдвое увеличатся в странах Западной Европы и втрое в странах Восточной. При этом истинное количество людей, которых коснулось заболевание, значительно превышает приведенные статистические данные.

Согласно исследованиям, проведенным Центром психического здоровья Российской академии медицинских наук, распространенность БА в нашей стране примерно такая же, как на Западе. После 70 лет старческим слабоумием страдают 4,6 % людей, после 80 лет – 16 – 18 %. Если учитывать, что поколение, рожденное в конце 40-х — начале 50-х годов XX века (поколение «бэби-бума») интенсивно стареет, то нетрудно предсказать, что БА продолжит разрушать жизнь многих людей. В этой связи разработка эффективной терапии БА становится приоритетом номер один современной фарминдустрии.

Однако невозможно разработать лекарство, не понимая фундаментальных механизмов, приводящих к тем или иным нарушениям при различных нейродегенеративных заболеваниях. Несмотря на то, что БА изучают уже более ста лет, до сих пор неизвестны причины возникновения данной патологии. Кроме того, изучение болезни Альцгеймера осложняется наличием двух ее форм: первая (95 % и более случаев) спорадическая (СБА), для возникновения которой основным фактором риска является преклонный возраст (старше 70 лет); вторая (1 - 2 % случаев) — наследственная, или генетическая форма (НБА), вызываемая миссенс-мутациями в белках-пресенилинах (ПС) и белке-предшественнике амилоида (АРР). Белки-пресенилины входят в состав протеазного комплекса, выполняющего функцию гамма-секретазы. Нарушение указанной функции вызывает неправильное расщепление АРР и образование коротких фрагментов бета-амилоидного (Ab) белка, входящих в состав патогенных бляшек, образующихся при БА.

#### Доминирующие гипотезы возникновения и развития БА

Существуют две доминирующие гипотезы возникновения и развития БА.

Первая - «амилоидная» утверждает, что повышенная экспрессия амилоидогенной формы пептида Ab42 (другими словами, повышенное отношение Ab42/Ab40) является основной причиной смерти нейронов и синаптической потери при БА [1]. Данная гипотеза подтверждается следующими наблюдениями: в образцах головного мозга пациентов с БА происходит аккумуляция амилоидных бляшек, основным компонентом которых является Ab42; причинами НБА являются миссенс-мутации в белкепредшественнике амилоида (АРР), а также мутации в белках-пресенилинах, которые образуют каталитическую субъединицу гамма-секретазы (фермента, разрезающего APP).

К сожалению, все попытки по использованию антиамилоидной терапии для лечения пациентов с БА не увенчались успехом. Таким образом, становится очевидной необходимость поиска эффективных методов лечения этой болезни, выходящих за рамки Ab-гипотезы [2].

Вторая гипотеза — «кальциевый дисгомеостаз БА» — которой, как попутно отметим, придерживается наша лаборатория, указывает на нарушенную кальциевую (Ca<sup>2+</sup>) сигнализацию в эндоплазматическом ретикулуме (ЭР), особенно, когда в этот дисгомеостаз вовлечены мутации в белкахпресенилинах (ПС) [3, 4]. Сохранение внутриклеточного гомеостаза Ca<sup>2+</sup> имеет важное значение для функции нейронов, их выживания и является основным компонентом синаптической передачи [5].

Связь между патогенезом БА и Са<sup>2+</sup> была выявлена в работе Н. Ариспе с сотрудниками, где было обнаружено, что Аb-олигомеры способны встраиваться в мембрану клетки,

образуя Ca<sup>2+</sup>-пропускающие каналы [6]. Было показано, что в условиях недостатка энергии, в клетках происходит экспозиция фосфатидилсерина на их поверхностях, что, в свою очередь, увеличивает способность Аb связываться с клеточной мембраной [7]. Возрастные изменения в митохондрии могут приводить к увеличению мембранных фосфатидилсеринов в нейронах, пораженных БА, и способствовать образованию Аb-содержащих пор, входу Ca<sup>2+</sup> в клетки и смерти нейронов. В частности, нейроны с дефицитом в цитозольном АТР и большим количеством мембранных фосфатидилсеринов проявляют повышенную чувствительность к токсичности бета-амилоидного белка [8]. Способность Аb-олигомеров образовывать Ca<sup>2+</sup>-пропускающие каналы согласуется с недавними исследованиями по регистрации Ca<sup>2+</sup> in vivo в APP-трансгенных мышах [9]. Данные исследования показали, что концентрация Ca<sup>2+</sup> в состоянии покоя повышена в 35 % нейритов, находящихся в непосредственной близости от Аb-бляшек. В нейритах с повышенным содержанием внутриклеточного Ca<sup>2+</sup> количество шипиков снижено, а также нарушена их морфология [9]. Помимо прямого воздействия Ab на Ca<sup>2+</sup>- пропускную активность плазматической мембраны, Аb-олигомеры также оказывают существенное влияние на нейроный Са<sup>2+</sup>-гомеостаз посредством изменения активности NMDA-рецепторов [10, 11], АМРА- рецепторов [12] и потенциалзависимых каналов  $Ca^{2+}$  типа P/Q [13].

Другая потенциальная связь между Са<sup>2+</sup>-сигналингом и БА прослеживается при анализе наблюдаемых фактов: многие НБА-ассоциированные мутации в белкахпресенилинах вызывают нарушения в Са<sup>2+</sup>гомеостазе нейронов. Связь между пресенилинами и Ca<sup>2+</sup>-сигналингом впервые была обнаружена в фибробластах пациентов с НБА. Было показано, что фибробласты этих пациентов выделяют огромное количество Са<sup>2+</sup> в ответ на воздействие инозитолтрифосфатом (IP<sub>3</sub>) [14]. Аналогичные данные были получены в экспериментах с использованием клеток, экспрессирующих пресенилины с НБА-ассоциированными мутациями [15], и с использованием кортикальных нейро-

нов от трансгенных мышей со встроенными в определенный локус генома (knock in) НБА-мутантными пресенилинами [16, 17]. Для объяснения наблюдаемых результатов было сделано предположение, что мутантные пресенилины либо нарушают работу депо-управляемого входа Ca<sup>2+</sup> [18, 19], увеличивают активность и/или экспрессию внутриклеточных Ca<sup>2+</sup>-высвобождающих каналов, таких как рианодиновые рецепторы (RyanR) [17, 20, 21] и ІР<sub>2</sub>-рецепторы [22, 23], либо влияют на функцию саркоплазматической и эндоплазматической кальциевой АТФазы (SERCA) (помпы, накачивающей ЭР Са<sup>2+</sup>) [24].

Работа нашей лаборатории была до сих пор сконцентрирована на собственном открытии, согласно которому пресенилины, в дополнение к классической гаммасекретазной функции, проявляют функцию каналов утечки Ca<sup>2+</sup> из ЭР [25]. В серии из пяти недавних публикаций мы представили экспериментальные подтверждения нашей гипотезы; было установлено, что пресенилины выполняют роль пассивных каналов утечки кальция из ЭР, а некоторые НБАассоциированные мутации нарушают данную функцию пресенилинов, вызывая тем самым переполнение ЭР Ca<sup>2+</sup> [25–29].

Наша гипотеза была незамедлительно оспорена, в частности американской группой, возглавляемой профессором Университета Пенсильвании Фоскетом (Kevin Foskett). Они утверждали, что пресенилины не способны образовывать поры и не могут выступать в качестве ионных каналов [23, 30]. Мы обнаружили несколько довольно грубых экспериментальных и технических ошибок, допущенных авторами при выполнении работы, о чем незамедлительно сообщили [31] в ответе на данную публикацию. Независимые экспериментальные подтверждения функции пресенелинов в качестве каналов утечки Ca<sup>2+</sup> начали набирать свою силу [32], и недавняя беспристрастная работа по изучению модуляторов внутриклеточного Ca<sup>2+</sup>-гомеостаза показала ключевую роль пресенилинов в осуществлении выхода Ca<sup>2+</sup> из ЭР [33]. Самое главное открытие - существование большого отверстия, проходящего сквозь всю структуру белка, - было обнаружено совсем недавно в кристаллической структуре высокого разрешения гомолога пресенилина PSH1 v архей [34]. Авторы отметили, что данное отверстие обладает размером, достаточным для пропускания небольших ионов [34]. Эти результаты обеспечивают сильное и независимое подтверждение гипотезы пресенилинов как каналов утечки. Мы надеемся, что существующее расхождение во мнениях с коллегами вскоре будет преодолено. Тем не менее, требуется сделать еще многое для того, чтобы окончательно подтвердить роль пресенилинов как каналов утечки Са<sup>2+</sup> из ЭР. Однако наша работа не фокусируется на дальнейшем исследовании пресенилинов как каналов утечки, а направлена на изучение физиологической и патофизиологической ролей нарушенного нейронного Са<sup>2+</sup>-сигналинга в ЭР, возникающего при болезни Альцгеймера.

Известно, что на ранних стадиях болезни, еще до появления токсичных амилоидных бляшек, происходит потеря синапсов в нейронах пациентов с БА. Синапс – это ключевое звено для осуществления нейротрансмиссии или передачи электрохимических сигналов от пресинаптического партнера к постсинаптическому участнику. Основными функциями нейрона являются передача, обработка, анализ и хранение информации. Для осуществления перечисленных функций нейрону необходимо «общаться» с окружающими его другими нервными клетками. Таким образом, нейрон с нарушенной системой контактов не способен выполнять свое предназначение и в конечном итоге погибает. Так называемое «общение нейронов» происходит посредством синапсов, поэтому глубокое понимание механизмов, регулирующих формирование, стабильность и потерю синапсов, составляет фундаментальную проблему нейробиологии. В настоящее время мы ищем ответ на вопрос, каким образом нарушенный кальциевый сигналинг при БА вызывает потерю синапсов. Мы полагаем, что изменения происходят в постсинаптической терминали синапса - дендритном шипике нейрона. В частности, снижается депо-управляемый вход кальция в нейроны, который необходим для поддержания стабильности шипиков и соответственно синапсов. Мы считаем, что восстановление депо-управляемого входа кальция (например, с помощью искусственного введения недостающего белка в клетки с помощью адено- или лентивирусов) поможет восстановить стабильность шипиков и поможет улучшить когнитивные нарушения в животных моделях БА.

#### Гипотеза специфичной элиминации грибовидных шипиков с поверхности дендритов при БА

Синаптическая пластичность, или, другими словами, молекулярные и структурные изменения, приводящие к усилению или ослаблению нейротрансмиссии в ответ на нейронную активность, играет важную роль в формировании и сохранении памяти. Дендритные шипики считаются структурной основой для формирования процессов обучения и памяти [35, 36]. Кальциевый сигналинг в шипиковых структурах происходит относительно обособленно от Са<sup>2+</sup>сигналинга, происходящего в дендритах и теле нейрона; поэтому считается, что каждый шипик функционирует как отдельный узел сигналинга [35, 37, 38]. Основываясь на соотношении размеров головки шипика и его шейки, морфологически выделяют

три группы шипиков: грибовидные, тонкие и пеньковые. Грибовидные обладают большой головкой и тонкой шейкой, тонкие имеют маленькую головку и узкую шейку, пеньковые же шипики не имеют очевидных различий между размерами головок и соединениями с дендритными стеблями [35, 36] (рис. 1). Анализ морфологии шипиков осуществляется нами с помощью программы NeuronStudio (NIH) при следующих значениях параметров программы: соотношение ширины и высоты головки для тонких шипиков не превышает 2,5 (AR thin(crit) = 2,5); отношение диаметра головки шипика к диаметру шейки для грибовидных шипиков должно быть более 1.3 (HNR(crit) = 1.3); диметр головки для грибовидных шипиков должен быть более 0,15 MKM (HD(crit) = 0,15) [39].

Было показано, что дендритные шипики имеют свойство стабилизировать свою структуру в процессе взросления [40], тем не менее их небольшая доля продолжает изменяться во взрослом мозге [40–42]. Кроме того, было обнаружено, что неустойчивыми являются тонкие шипики, которые появляются и исчезают в течение нескольких дней; тогда как грибовидные могут оставаться стабильными на протяжении месяцев [40, 41]. Грибовидные шипики обладают большей постсинаптической



Рис. 1. Морфология дендритных шипиков нейрона в гиппокампе трансгенной мыши линии *M* (JaxLab # 007788): *a*, *б* – микрофотография нейрона и ее увеличенный фрагмент; 1, 2, 3 – представители соответственно грибовидной, тонкой и пеньковой групп шипиков; 1-1, 1-2 – головка и шейка грибовидного шипика. Увеличение в 2000 (*a*) и 6000 (*б*) раз

плотностью, которая удерживает большее число АМРА-глутаматных рецепторов, тем самым делая такие синапсы функционально сильнее [43-46]. Они же чаше, чем тонкие шипики, содержат эндоплазматический ретикулум, который способен локально регулировать концентрацию Ca<sup>2+</sup> [47]. Кроме того, шипики, обладающие большими синапсами, чаще содержат полирибосомы, необходимые для локального белкового синтеза [48]. Более того, для больших, но не маленьких, шипиков характерен перисинаптический астроглиальный процесс, который способен обеспечить синаптическую стабильность, а также регулировать уровень глутамата и других нейротрансмиттеров [49, 50]. Эти отличительные свойства грибовидных шипиков наводят на мысль, что они являются устойчивыми структурами, ответственными за хранение информации, т. е. за память [35]. В противоположность грибовидным, тонкие шипики образуются или исчезают сравнительно быстро в ответ на различный уровень синаптической активности [51, 52]. Они имеют меньшую постсинаптическую плотность, которая содержит NMDA-рецепторы, но значительно меньшее число АМРА-рецепторов, делая их готовыми к увеличению синаптической передачи только после добавления порции АМРА-рецепторов [43-46]. Тонкие шипики представляют собой гибкие структуры, способные как увеличиваться в размерах и становиться стабильными, так и сокращаться в размерах и исчезать, в зависимости от того сигнала, возбуждающего либо ингибирующего, который они получат [35, 40, 41]. Таким образом, с учетом описанных свойств тонких шипиков, мы предположили, что эти структуры принимают участие в процессе обучения и являются физическими субстратами для «записи новой информации», т. е. для формирования новой памяти [35, 53]. Принимая во внимание важную роль шипиков в записи и хранении информации, т. е. в формировании и

нении информации, т. е. в формировании и сохранении памяти, некоторые исследователи провели соответствующие изыскания и обнаружили значительные отклонения в количестве шипиков и их морфологии у пациентов, страдающих теми или иными



Рис. 2. Схематическое представление кальциевой гипотезы развития болезни
Альцгеймера: а — грибовидный шипик в норме, б — он же, уменьшенный при старении организма либо наследственной болезни;
в — элиминация шипика с поверхности дендрита в заключительной стадии заболевания.
Стрелки указывают пути входа (выхода) ионов кальция; 1 — депо-управляемый вход Са<sup>2+</sup>,
2 — рианодиновый рецептор, 3 — саркоплазматическая и эндоплазматическая кальциевая АТФаза,
4 — пресенилины, 5 — цитозоль, 6 — эндоплазамати-

 пресенилины, 5 – цитозоль, 6 – эндоплазаматический ретикулум Са<sup>2+</sup> неврологическими и психическими заболеваниями [54], а также у лиц преклонного возраста [55]. На основе опубликованных данных и научных результатов, полученных в нашей лаборатории, мы (и другие группы исследователей) предположили, что грибовидные шипики претерпевают максимальные изменения в течение патогенеза БА и в конечном итоге исчезают с поверхности дендритов, а этим и объясняется потеря памяти у лиц, страдающих болезнью Альцгеймера [56–58].

Итак, приводим краткую формулировку предлагаемой гипотезы (рис. 2).

Увеличение концентрации ионов Ca<sup>2+</sup> в эндоплазматическом ретикулуме нейрона, вызванное мутациями в белкахпресенилинах и/или возрастными изменениями, снижают стабильность грибовидных шипиков, вызывая когнитивные расстройства, наблюдаемые при болезни Альцгеймера.

Если формулировать развитие патологического процесса более подробно, то следует подчеркнуть, что у здоровых людей все кальциевые каналы грибовидного шипика присутствуют и обеспечивают поддержание внутриклеточного кальциевого гомеостаза. У больных, страдающих болез-

1. **Hardy J., Selkoe D.J.** The amyloid hypothesis of Alzheimer's disease: progress and problems on the road to therapeutics// Science. 2002. Vol. 297. No. 5580, pp. 353-6.

2. Seabrook G.R., Ray W.J., Shearman M., Hutton M. Beyond amyloid: the next generation of Alzheimer's disease therapeutics// Mol. Interv. 2007. Vol. 7. No. 5, pp. 261-70.

3. **Bezprozvanny I., Mattson M.P.** Neuronal calcium mishandling and the pathogenesis of Alzheimer's disease// Trends Neurosci. 2008. Vol. 31. No. 9, pp. 454-63.

4. **Stutzmann G.E.** The pathogenesis of Alzheimers disease is it a lifelong «calciumopathy»?// Neuroscientist. 2007. Vol. 13. No. 5, pp. 546-59.

5. **Berridge M.J.** Neuronal calcium signaling// Neuron. 1998. Vol. 21. No. 1, pp. 13-26.

6. Arispe N., Rojas E., Pollard H.B. Alzheimer disease amyloid beta protein forms calcium channels in bilayer membranes: blockade by tromethamine and aluminum// Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 1993.

нью Альцгеймера, шипики претерпевают изменения. НБА-ассоциированные мутации в пресенилинах нарушают функцию пресенилинов как каналов утечки  $Ca^{2+}$  из эндоплазматического ретикулума. Это приводит к переполнению  $Ca^{2+}$  в ЭР (рис. 2,  $\delta$ ). В качестве компенсаторного механизма клетки увеличивают экспрессию рианодиновых рецепторов и снижают активность депо-управляемого входа  $Ca^{2+}$ . Такие изменения вызывают при болезни Альцгеймера сужение головки шипика и постепенно приводят к его элиминации с поверхности дендрита в головном мозге (рис. 2,  $\epsilon$ ).

Гипотезу специфичной элиминации грибовидных шипиков с поверхности дендритов при БА мы подробно опубликовали в нашем недавнем обзоре [56].

Работа выполнена при поддержке гранта Правительства Российской Федерации для государственной поддержки научных исследований, проводимых под руководством ведущих ученых в российских образовательных учреждениях высшего профессионального образования — договор № 11.G34.31.0056, гранта ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы» — 2012-1.1-12-000-1002-1101, а также гранта для молодых биологов Фонда «Династия» № ДП-Б-11/13.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Vol. 90. No. 2, pp. 567-71.

7. Lee G., Pollard H.B., Arispe N. Annexin 5 and apolipoprotein E2 protect against Alzheimer's amyloid-beta-peptide cytotoxicity by competitive inhibition at a common phosphatidylserine interaction site// Peptides. 2002. Vol. 23. No. 7, pp. 1249-63.

8. **Simakova O., Arispe N.J.** The cell-selective neurotoxicity of the Alzheimer's Abeta peptide is determined by surface phosphatidylserine and cytosolic ATP levels. Membrane binding is required for Abeta toxicity// J. Neurosci. 2007. Vol. 27. No. 50, pp. 13719-29.

9. Kuchibhotla K.V., Goldman S.T., Lattarulo C.R., Wu H.Y. Abeta plaques lead to aberrant regulation of calcium homeostasis in vivo resulting in structural and functional disruption of neuronal networks// Neuron. 2008. Vol. 59. No. 2, pp. 214-25.

10. De Felice F.G., Velasco P.T., Lambert M.P., Viola K. Abeta oligomers induce neuronal oxidative stress through an N-methyl-D-aspartate

Биофизика и медицинская физика

receptor-dependent mechanism that is blocked by the Alzheimer drug memantine// J. Biol. Chem. 2007. Vol. 282. No. 15, pp. 11590-601.

11. Shankar G.M., Bloodgood B.L., Townsend M., Walsh D.M. Natural oligomers of the Alzheimer amyloid-beta protein induce reversible synapse loss by modulating an NMDA-type glutamate receptor-dependent signaling pathway// J. Neurosci. 2007. Vol. 27. No. 11, pp. 2866-75.

12. Hsieh H., Boehm J., Sato C., Iwatsubo T. AMPAR removal underlies Abeta-induced synaptic depression and dendritic spine loss// Neuron. 2006. Vol. 52. No. 5, pp. 831-43.

13. Nimmrich V., Grimm C., Draguhn A., Barghorn S. Amyloid beta oligomers (A beta(1-42) globulomer) suppress spontaneous synaptic activity by inhibition of P/Q-type calcium currents// J. Neurosci. 2008. Vol. 28. No. 4, pp. 788-97.

14. Ito E., Oka K., Etcheberrigaray R., Nelson T.J. Internal Ca2+ mobilization is altered in fibroblasts from patients with Alzheimer disease// Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 1994. Vol. 91. No. 2, pp. 534-8.

15. Leissring M.A., Paul B.A., Parker I., Cotman C.W. Alzheimer's presenilin-1 mutation potentiates inositol 1,4,5-trisphosphate-mediated calcium signaling in Xenopus oocytes// J. Neurochem. 1999. Vol. 72. No. 3, pp. 1061-8.

16. Stutzmann G.E., Caccamo A., LaFerla F.M., Parker I. Dysregulated IP<sub>3</sub> signaling in cortical neurons of knock-in mice expressing an Alzheimer's-linked mutation in presenilin1 results in exaggerated Ca2+ signals and altered membrane excitability// J. Neurosci. 2004. Vol. 24. No. 2, pp. 508-13.

17. Stutzmann G.E., Smith I., Caccamo A., Oddo S. Enhanced ryanodine receptor recruitment contributes to Ca2+ disruptions in young, adult, and aged Alzheimer's disease mice// J. Neurosci. 2006. Vol. 26. No. 19, pp. 5180-9.

18. Leissring M.A., Akbari Y., Fanger C.M., Cahalan M.D. Capacitative calcium entry deficits and elevated luminal calcium content in mutant presenilin-1 knockin mice// J. Cell. Biol. 2000. Vol. 149. No. 4, pp. 793-8.

19. Yoo A.S., Cheng I., Chung S., Grenfell T.Z. Presenilin-mediated modulation of capacitative calcium entry// Neuron. 2000. Vol. 27. No. 3, pp. 561-72.

20. Chan S.L., Mayne M., Holden C.P., Geiger J.D. Presenilin-1 mutations increase levels of ryanodine receptors and calcium release in PC12 cells and cortical neurons// J. Biol. Chem. 2000. Vol. 275. No. 24, pp. 18195-200.

21. Rybalchenko V., Hwang S.Y., Rybalchenko

**N., Koulen P.** The cytosolic N-terminus of presenilin-1 potentiates mouse ryanodine receptor single channel activity// Int. J. Biochem. Cell Biol. 2008. Vol. 40. No. 1, pp. 84-97.

22. Cai C., Lin P., Cheung K.H., Li N. The presenilin-2 loop peptide perturbs intracellular Ca2+ homeostasis and accelerates apoptosis// J. Biol. Chem. 2006. Vol. 281. No. 24, pp. 16649-55.

23. Cheung K.H., Shineman D., Muller M., Cardenas C. Mechanism of Ca2+ disruption in Alzheimer's disease by presenilin regulation of InsP(3) receptor channel gating// Neuron. 2008. Vol. 58. No. 6, pp. 871-83.

24. Green K.N., Demuro A., Akbari Y., Hitt B.D. SERCA pump activity is physiologically regulated by presenilin and regulates amyloid beta production// J. Cell. Biol. 2008. Vol. 181. No. 7, pp. 1107-16.

25. Tu H., Nelson O., Bezprozvanny A., Wang Z. Presenilins form ER calcium leak channels, a function disrupted by mutations linked to familial Alzheimer's disease// Cell. 2006. Vol. 126, pp. 981-993.

26. Nelson O., Tu H., Lei T., Bentahir M. Familial Alzheimer disease-linked mutations specifically disrupt Ca<sup>2+</sup> leak function of presenilin 1// J. Clin. Invest. 2007. Vol. 117. No. 5, pp. 1230-9.

27. Nelson O., Supnet C., Liu H., Bezprozvanny I. Familial Alzheimer's disease mutations in presenilins: effects on endoplasmic reticulum calcium homeostasis and correlation with clinical phenotypes// J. Alzheimers Dis. 2010. Vol. 21. No. 3, pp. 781-93.

28. Zhang H., Sun S., Herreman A., De Strooper B. Role of presenilins in neuronal calcium homeostasis// J. Neurosci. 2010. Vol. 30. No. 25, pp. 8566-80.

29. Nelson O., Supnet C., Tolia A., Horre K. Mutagenesis mapping of the presenilin 1 calcium leak conductance pore// J. Biol. Chem. 2011. Vol. 286. No. 25, pp. 22339-47.

30. Shilling D., Mak D.O., Kang D.E., Foskett J.K. Lack of evidence for presenilins as endoplasmic reticulum Ca2+ leak channels// J. Biol. Chem. 2012. Vol. 287, pp. 10933-10944.

31. **Bezprozvanny I., Supnet C., Sun S., Zhang H.** Response to Shilling et al. (10.1074/jbc. M111.300491)// J. Biol. Chem. 2012. Vol. 287. No. 24, pp. 20469; author reply 20470.

32. Das H.K., Tchedre K., Mueller B. Repression of transcription of presenilin-1 inhibits gamma-secretase independent ER Ca(2)(+) leak that is impaired by FAD mutations// J. Neurochem. 2012. Vol. 122. No. 3, pp. 487–500.

33. Bandara S., Meyer T. Deconvolution of sig-

naling function from single-cell time course data// Science Signaling. 2013. Vol. in press.

34. Li X., Dang S., Yan C., Gong X. Structure of a presenilin family intramembrane aspartate protease// Nature. 2013. Vol. 493. No. 7430, pp. 56-61.

35. Kasai H., Matsuzaki M., Noguchi J., Yasumatsu N. Structure-stability-function relationships of dendritic spines// Trends Neurosci. 2003. Vol. 26. No. 7, pp. 360-8.

36. **Bourne J.N., Harris K.M.** Balancing structure and function at hippocampal dendritic spines// Annu. Rev. Neurosci. 2008. Vol. 31, pp. 47-67.

37. **Higley M.J., Sabatini B.L.** Calcium signaling in dendritic spines// Cold Spring Harb. Perspect. Biol. 2012. Vol. 4. No. 4.

38. **Yasuda R., Sabatini B.L., Svoboda K.** Plasticity of calcium channels in dendritic spines// Nat. Neurosci. 2003. Vol. 6. No. 9, pp. 948-55.

39. Rodriguez A., Ehlenberger D.B., Dickstein D.L., Hof P.R. Automated three-dimensional detection and shape classification of dendritic spines from fluorescence microscopy images// PLoS One. 2008. Vol. 3. No. 4, pp. e1997.

40. Honarnejad K., Jung C.K., Lammich S., Arzberger T. Involvement of presenilin holoprotein upregulation in calcium dyshomeostasis of Alzheimer's disease// J. Cell Mol. Med. 2013. Vol. 17. No. 2, pp. 293-302.

41. Doody R.S., Raman R., Farlow M., Iwatsubo T. A phase 3 trial of semagacestat for treatment of Alzheimer's disease// N. Engl. J. Med. 2013. Vol. 369. No. 4, pp. 341-50.

42. Lowry W.E., Richter L., Yachechko R., Pyle A.D. Generation of human induced pluripotent stem cells from dermal fibroblasts// Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 2008. Vol. 105. No. 8, pp. 2883-8.

43. Vierbuchen T., Ostermeier A., Pang Z.P., Kokubu Y. Direct conversion of fibroblasts to functional neurons by defined factors// Nature. 2010. Vol. 463. No. 7284, pp. 1035-41.

44. Lambert M.P., Barlow A.K., Chromy B.A., Edwards C. Diffusible, nonfibrillar ligands derived from Abeta1-42 are potent central nervous system neurotoxins// Proc. Natl. Acad. Sci. U S A. 1998. Vol. 95. No. 11, pp. 6448-53.

45. Dahlgren K.N., Manelli A.M., Stine W.B., Jr., Baker L.K. Oligomeric and fibrillar species of amyloid-beta peptides differentially affect neuronal viability// J. Biol. Chem. 2002. Vol. 277. No. 35, pp. 32046-53.

46. Li H.M., Zheng Y.F., Zhi X.L., Li C.Y. Comparison of activated carbon and ultrafiltration technique in the production process of huoxue ton-gluo injection// Zhong Yao Cai. 2012. Vol. 35. No.

12, pp. 2012-5.

47. **Spacek J., Harris K.M.** Three-dimensional organization of smooth endoplasmic reticulum in hippocampal CA1 dendrites and dendritic spines of the immature and mature rat// J. Neurosci. 1997. Vol. 17. No. 1, pp. 190-203.

48. Jia P., Wang S., Meng X., Lan W. Effects of ionic liquid and nanogold particles on high-performance liquid chromatography-electrochemical detection and their application in highly efficient separation and sensitive analysis of five phenolic acids in Xuebijing injection// Talanta. 2013. Vol. 107, pp. 103-10.

49. Liu M.Y., Jiao L.H., Xie Y.M., Wang G.W. Interpretation and analysis of traditional Chinese medicine injection instructions// Zhongguo Zhong Yao Za. Zhi. 2012. Vol. 37. No. 18, pp. 2707-9.

50. Kang J.S., Zheng Z., Choi M.J., Lee S.H. The effect of CD34+ cell-containing autologous platelet-rich plasma injection on pattern hair loss: a preliminary study// J. Eur. Acad. Dermatol. Venereol. 2014. Vol. 28. No. 1, pp. 72-9.

51. Zhang L., Zheng J., Mai H.M., Zhu L. Efficacy of pingyangmycin injection for the treatment of cervical epidermoid cysts// Int. J. Clin. Exp. Med. 2013. Vol. 6. No. 1, pp. 81-3.

52. Zidek K., Zheng K., Abdellah M., Lenngren N. Ultrafast dynamics of multiple exciton harvesting in the CdSe-ZnO system: electron injection versus Auger recombination// Nano Lett. 2012. Vol. 12. No. 12, pp. 6393-9.

53. **Bourne J., Harris K.M.** Do thin spines learn to be mushroom spines that remember?// Curr. Opin. Neurobiol. 2007. Vol. 17. No. 3, pp. 381-6.

54. Penzes P., Cahill M.E., Jones K.A., VanLeeuwen J.E. Dendritic spine pathology in neuropsychiatric disorders// Nat. Neurosci. 2011. Vol. 14. No. 3, pp. 285-93.

55. Dickstein D.L., Weaver C.M., Luebke J.I., Hof P.R. Dendritic spine changes associated with normal aging// Neuroscience. 2012.

56. **Popugaeva E., Supnet C., Bezprozvanny I.** Presenilins, deranged calcium homeostasis, synaptic loss and dysfunction in Alzheimer's disease// Messenger. 2012. Vol. 1, pp. 53-62.

57. Luebke J.I., Weaver C.M., Rocher A.B., Rodriguez A. Dendritic vulnerability in neurodegenerative disease: insights from analyses of cortical pyramidal neurons in transgenic mouse models// Brain Struct. Funct. 2010. Vol. 214. No. 2-3, pp. 181-99.

58. Tackenberg C., Ghori A., Brandt R. Thin, stubby or mushroom: spine pathology in Alzheimer's disease// Curr. Alzheimer Res. 2009. Vol. 6. No. 3, pp. 261-8.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ПОПУГАЕВА Елена Александровна** — кандидат биологических наук, научный сотрудник лаборатории молекулярной нейродегенерации, доцент кафедры медицинской физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 lena.popugaeva@gmail.com

ВЛАСОВА Ольга Леонардовна — доктор физико-математических наук, профессор кафедры медицинской физики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. 195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

olvlasova@yandex.ru

**БЕЗПРОЗВАННЫЙ Илья Борисович** — доктор биологических наук, именной профессор физиологии, заведующий лабораторией молекулярной нейродегенерации Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 mnlabspb@gmail.com

# *Popugaeva E.A., Vlasova O.L., Bezprozvanny I.B.* THE ROLE OF INTRACELLULAR CALCIUM IN THE DEVELOPMENT OF ALZHEIMER DISEASE PATHOGENESIS.

This article is a review and contains a brief description of the current state of research in the field of AD. The special attention is paid to the calcium hypothesis of AD, which is getting more popular and is an alternative hypothesis in relation to the dominant amyloid hypothesis of AD. The assumption of possible pathological pathway that takes place in AD is made basing on published and preliminary data.

ALZHEIMER DISEASE, CALCIUM, DENDRITIC SPINE, SYNAPSE, TWO-PHOTON MICROSCOPY.

#### REFERENCES

1. **Hardy J., Selkoe D.J.** The amyloid hypothesis of Alzheimer's disease: progress and problems on the road to therapeutics, *Science*, 2002, Vol. 297, No. 5580, pp. 353-6.

2. Seabrook G.R., Ray W.J., Shearman M., Hutton M. Beyond amyloid: the next generation of Alzheimer's disease therapeutics, *Mol. Interv.*, 2007, Vol. 7, No. 5, pp. 261-70.

3. **Bezprozvanny I., Mattson M.P.** Neuronal calcium mishandling and the pathogenesis of Alzheimer's disease, *Trends Neurosci.*, 2008, Vol. 31, No. 9, pp. 454-63.

4. **Stutzmann G.E.** The pathogenesis of Alzheimers disease is it a lifelong «calciumopathy»? *Neuroscientist*, 2007, Vol. 13, No. 5, pp. 546-59.

5. Berridge M.J. Neuronal calcium signaling, *Neuron*, 1998, Vol. 21, No. 1, pp. 13-26.

6. Arispe N., Rojas E., Pollard H.B. Alzheimer disease amyloid beta protein forms calcium channels in bilayer membranes: blockade by tromethamine and aluminum, *Proc. Natl., Acad. Sci. USA*, 1993, Vol. 90, No. 2, pp. 567-71.

7. Lee G., Pollard H.B., Arispe N. Annexin 5 and apolipoprotein E2 protect against Alzheimer's

amyloid-beta-peptide cytotoxicity by competitive inhibition at a common phosphatidylserine interaction site, *Peptides*, 2002, Vol. 23, No. 7, pp. 1249-63.

8. Simakova O., Arispe N.J. The cell-selective neurotoxicity of the Alzheimer's Abeta peptide is determined by surface phosphatidylserine and cytosolic ATP levels. Membrane binding is required for Abeta toxicity, *J. Neurosci.*, 2007, Vol. 27, No. 50, pp. 13719-29.

9. Kuchibhotla K.V., Goldman S.T., Lattarulo C.R., Wu H.Y. Abeta plaques lead to aberrant regulation of calcium homeostasis in vivo resulting in structural and functional disruption of neuronal networks, *Neuron*, 2008, Vol. 59, No. 2, pp. 214-25.

10. De Felice F.G., Velasco P.T., Lambert M.P., Viola K. Abeta oligomers induce neuronal oxidative stress through an N-methyl-D-aspartate receptor-dependent mechanism that is blocked by the Alzheimer drug memantine, *J. Biol. Chem.*, 2007, Vol. 282, No. 15, pp. 11590-601.

11. Shankar G.M., Bloodgood B.L., Townsend M., Walsh D.M. Natural oligomers of the Alzheimer

amyloid-beta protein induce reversible synapse loss by modulating an NMDA-type glutamate receptordependent signaling pathway, *J. Neurosci.*, 2007, Vol. 27, No. 11, pp. 2866-75.

12. Hsieh H., Boehm J., Sato C., Iwatsubo T. AMPAR removal underlies Abeta-induced synaptic depression and dendritic spine loss, *Neuron*, 2006, Vol. 52, No. 5, pp. 831-43.

13. Nimmrich V., Grimm C., Draguhn A., Barghorn S. Amyloid beta oligomers (A beta(1-42) globulomer) suppress spontaneous synaptic activity by inhibition of P/Q-type calcium currents, *J. Neurosci.*, 2008, Vol. 28, No. 4, pp. 788-97.

14. Ito E., Oka K., Etcheberrigaray R., Nelson T.J. Internal Ca2+ mobilization is altered in fibroblasts from patients with Alzheimer disease, *Proc. Natl. Acad. Sci. U S A*, 1994, Vol. 91, No. 2, pp. 534-8.

15. Leissring M.A., Paul B.A., Parker I., Cotman C.W. Alzheimer's presenilin-1 mutation potentiates inositol 1,4,5-trisphosphate-mediated calcium signaling in Xenopus oocytes, *J. Neurochem.*, 1999, Vol. 72, No. 3, pp. 1061-8.

16. Stutzmann G.E., Caccamo A., LaFerla F.M., Parker I. Dysregulated IP3 signaling in cortical neurons of knock-in mice expressing an Alzheimer's-linked mutation in presenilin1 results in exaggerated Ca2+ signals and altered membrane excitability, *J. Neurosci.*, 2004, Vol. 24, No. 2, pp. 508-13.

17. Stutzmann G.E., Smith I., Caccamo A., Oddo S. Enhanced ryanodine receptor recruitment contributes to Ca2+ disruptions in young, adult, and aged Alzheimer's disease mice, *J. Neurosci.*, 2006, Vol. 26, No. 19, pp. 5180-9.

18. Leissring M.A., Akbari Y., Fanger C.M., Cahalan M.D. Capacitative calcium entry deficits and elevated luminal calcium content in mutant presenilin-1 knockin mice, *J. Cell. Biol.*, 2000, Vol. 149, No. 4, pp. 793-8.

19. Yoo A.S., Cheng I., Chung S., Grenfell T.Z. Presenilin-mediated modulation of capacitative calcium entry, *Neuron*, 2000, Vol. 27, No. 3, pp. 561-72.

20. Chan S.L., Mayne M., Holden C.P., Geiger J.D. Presenilin-1 mutations increase levels of ryanodine receptors and calcium release in PC12 cells and cortical neurons, *J. Biol. Chem.*, 2000, Vol. 275, No. 24, pp. 18195-200.

21. **Rybalchenko V., Hwang S.Y., Rybalchenko N., Koulen P.** The cytosolic N-terminus of presenilin-1 potentiates mouse ryanodine receptor single channel activity, *Int. J. Biochem. Cell Biol.*, 2008, Vol. 40, No. 1, pp. 84-97. 22. Cai C., Lin P., Cheung K.H., Li N. The presenilin-2 loop peptide perturbs intracellular Ca2+ homeostasis and accelerates apoptosis, *J. Biol. Chem*, 2006, Vol. 281, No. 24, pp. 16649-55.

23. Cheung K.H., Shineman D., Muller M., Cardenas C. Mechanism of Ca2+ disruption in Alzheimer's disease by presenilin regulation of InsP(3) receptor channel gating, *Neuron*, 2008, Vol. 58, No. 6, pp. 871-83.

24. Green K.N., Demuro A., Akbari Y., Hitt B.D. SERCA pump activity is physiologically regulated by presenilin and regulates amyloid beta production, *J. Cell. Biol.*, 2008, Vol. 181, No. 7, pp. 1107-16.

25. Tu H., Nelson O., Bezprozvanny A., Wang Z. Presenilins form ER calcium leak channels, a function disrupted by mutations linked to familial Alzheimer's disease, *Cell*, 2006, Vol. 126, pp. 981-993.

26. Nelson O., Tu H., Lei T., Bentahir M. Familial Alzheimer disease-linked mutations specifically disrupt Ca2+ leak function of presenilin 1, *J. Clin. Invest.* 2007, Vol. 117, No. 5, pp. 1230-9.

27. Nelson O., Supnet C., Liu H., Bezprozvanny I. Familial Alzheimer's disease mutations in presenilins: effects on endoplasmic reticulum calcium homeostasis and correlation with clinical phenotypes, *J. Alzheimer's Dis.*, 2010, Vol. 21, No. 3, pp. 781-93.

28. Zhang H., Sun S., Herreman A., De Strooper B. Role of presenilins in neuronal calcium homeostasis, *J. Neurosci.*, 2010, Vol. 30, No. 25, pp. 8566-80.

29. Nelson O., Supnet C., Tolia A., Horre K. Mutagenesis mapping of the presenilin 1 calcium leak conductance pore, *J. Biol. Chem.*, 2011, Vol. 286, No. 25, pp. 22339-47.

30. Shilling D., Mak D.O., Kang D.E., Foskett J.K. Lack of evidence for presenilins as endoplasmic reticulum Ca2+ leak channels, *J. Biol. Chem.*, 2012, Vol. 287, pp. 10933-10944.

31. Bezprozvanny I., Supnet C., Sun S., Zhang H. Response to Shilling et al. (10.1074/ jbc.M111.300491), *J. Biol. Chem.*, 2012, Vol. 287, No. 24, pp. 20469; author reply 20470.

32. Das H.K., Tchedre K., Mueller B. Repression of transcription of presenilin-1 inhibits gamma-secretase independent ER Ca(2)(+) leak that is impaired by FAD mutations, *J. Neurochem.*, 2012, Vol. 122, No. 3, pp. 487-500.

33. **Bandara S., Meyer T.** Deconvolution of signaling function from single-cell time course data, *Science Signaling*, 2013, Vol. (in press).

34. Li X., Dang S., Yan C., Gong X. Structure of a presenilin family intramembrane aspartate

protease, *Nature*, 2013, Vol. 493, No. 7430, pp. 56-61.

35. Kasai H., Matsuzaki M., Noguchi J., Yasumatsu N. Structure-stability-function relationships of dendritic spines, *Trends Neurosci.*, 2003, Vol. 26, No. 7, pp. 360-8.

36. **Bourne J.N., Harris K.M.** Balancing structure and function at hippocampal dendritic spines, *Annu. Rev. Neurosci.*, 2008, Vol. 31, pp. 47-67.

37. **Higley M.J., Sabatini B.L.** Calcium signaling in dendritic spines, *Cold Spring Harb. Perspect. Biol.*, 2012, Vol. 4, No. 4.

38. Yasuda R., Sabatini B.L., Svoboda K. Plasticity of calcium channels in dendritic spines, *Nat. Neurosci.*, 2003, Vol. 6, No. 9, pp. 948-55.

39. Rodriguez A., Ehlenberger D.B., Dickstein D.L., Hof P.R. Automated three-dimensional detection and shape classification of dendritic spines from fluorescence microscopy images, *PLoS One*, 2008, Vol. 3, No. 4, pp. e1997.

40. Honarnejad K., Jung C.K., Lammich S., Arzberger T. Involvement of presenilin holoprotein upregulation in calcium dyshomeostasis of Alzheimer's disease, *J. Cell Mol. Med.*, 2013, Vol. 17, No. 2, pp. 293-302.

41. Doody R.S., Raman R., Farlow M., Iwatsubo T. A phase 3 trial of semagacestat for treatment of Alzheimer's disease, *N. Engl. J. Med.*, 2013, Vol. 369, No. 4, pp. 341-50.

42. Lowry W.E., Richter L., Yachechko R., Pyle A.D. Generation of human induced pluripotent stem cells from dermal fibroblasts, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 2008, Vol. 105, No. 8, pp. 2883-8.

43. Vierbuchen T., Ostermeier A., Pang Z.P., Kokubu Y. Direct conversion of fibroblasts to functional neurons by defined factors, *Nature*, 2010, Vol. 463, No. 7284, pp. 1035-41.

44. Lambert M.P., Barlow A.K., Chromy B.A., Edwards C. Diffusible, nonfibrillar ligands derived from Abeta1-42 are potent central nervous system neurotoxins, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 1998, Vol. 95, No. 11, pp. 6448-53.

45. Dahlgren K.N., Manelli A.M., Stine W.B., Jr., Baker L.K. Oligomeric and fibrillar species of amyloid-beta peptides differentially affect neuronal viability, *J. Biol. Chem.*, 2002, Vol. 277, No. 35, pp. 32046-53.

46. Li H.M., Zheng Y.F., Zhi X.L., Li C.Y. Comparison of activated carbon and ultrafiltration technique in the production process of huoxue tongluo injection, *Zhong Yao Cai.*, 2012, Vol. 35, No. 12, pp. 2012-5.

47. Spacek J., Harris K.M. Three-dimensional

organization of smooth endoplasmic reticulum in hippocampal CA1 dendrites and dendritic spines of the immature and mature rat, *J. Neurosci.*, 1997, Vol. 17, No. 1, pp. 190-203.

48. Jia P., Wang S., Meng X., Lan W. Effects of ionic liquid and nanogold particles on high-performance liquid chromatography-electrochemical detection and their application in highly efficient separation and sensitive analysis of five phenolic acids in Xuebijing injection, *Talanta*, 2013, Vol. 107, pp. 103-10.

49. Liu M.Y., Jiao L.H., Xie Y.M., Wang G.W. Interpretation and analysis of traditional Chinese medicine injection instructions, *Zhongguo Zhong Yao Za. Zhi.*,2012, Vol. 37, No. 18, pp. 2707-9.

50. Kang J.S., Zheng Z., Choi M.J., Lee S.H. The effect of CD34+ cell-containing autologous platelet-rich plasma injection on pattern hair loss: a preliminary study, *J. Eur. Acad. Dermatol. Venereol.*, 2014, Vol. 28, No. 1, pp. 72-9.

51. Zhang L., Zheng J., Mai H.M., Zhu L. Efficacy of pingyangmycin injection for the treatment of cervical epidermoid cysts, *Int. J. Clin. Exp. Med.*, 2013, Vol. 6, No. 1, pp. 81-3.

52. Zidek K., Zheng K., Abdellah M., Lenngren N. Ultrafast dynamics of multiple exciton harvesting in the CdSe-ZnO system: electron injection versus Auger recombination, *Nano Lett.*, 2012, Vol. 12, No. 12, pp. 6393-9.

53. Bourne J., Harris K.M. Do thin spines learn to be mushroom spines that remember? *Curr. Opin. Neurobiol.*, 2007, Vol. 17, No. 3, pp. 381-6.

54. Penzes P., Cahill M.E., Jones K.A., VanLeeuwen J.E. Dendritic spine pathology in neuropsychiatric disorders, *Nat. Neurosci.*, 2011, Vol. 14, No. 3, pp. 285-93.

55. Dickstein D.L., Weaver C.M., Luebke J.I., Hof P.R. Dendritic spine changes associated with normal aging, *Neuroscience*, 2012.

56. **Popugaeva E., Supnet C., Bezprozvanny I.** Presenilins, deranged calcium homeostasis, synaptic loss and dysfunction in Alzheimer's disease, *Messenger*, 2012, Vol. 1, pp. 53-62.

57. Luebke J.I., Weaver C.M., Rocher A.B., Rodriguez A. Dendritic vulnerability in neurodegenerative disease: insights from analyses of cortical pyramidal neurons in transgenic mouse models, *Brain Struct. Funct.*, 2010, Vol. 214, No. 2-3, pp. 181-99.

58. Tackenberg C., Ghori A., Brandt R. Thin, stubby or mushroom: spine pathology in Alzheimer's disease, *Curr. Alzheimer Res.*, 2009, Vol. 6, No. 3, pp. 261-8.

#### THE AUTHORS

#### **POPUGAEVA Elena A.**

St. Petersburg State Polytechnical University, 29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia lena.popugaeva@gmail.com

#### VLASOVA Ol'ga L.

St. Petersburg State Polytechnical University,29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia olvlasova@yandex.ru

#### BEZPROZVANNYY II'ya B.

St. Petersburg State Polytechnical University,29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia mnlabspb@gmail.com

УДК 545.3;577.112.7

О.Л. Власова, П.В. Плотникова, А.Г. Безрукова

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

# АЛГОРИТМ РЕАЛИЗАЦИИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-ПАРАМЕТРИЧЕСКИХ ОПТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ АНАЛИЗА СОСТОЯНИЙ БИОДИСПЕРСИЙ

Статья посвящена разработке и практической апробации экспериментальнопараметрических оптических методов определения и сравнения состояния жидких биологических дисперсных систем на базе многопараметрического оптического анализа.

МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ, ОПТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ, БИОЛОГИЧЕСКИЕ ДИСПЕРСИИ.

#### Постановка задачи

В данной статье представлен обзор наших последних результатов разработки и практической апробации экспериментальнопараметрических оптических методов определения и сравнения состояния жидких биологических дисперсных систем на базе многопараметрического оптического анализа [1–17]. Такой подход можно реализовать с помощью универсальной установки, содержащей соответствующие лазеры в качестве источников излучения.

Излучение лазера (независимо от типа и конкретных технических данных) является в той или иной степени монохроматическим, когерентным, поляризованным и направленным (коллимированным), а также, что очень важно, вариабельным по мощности и интенсивности воздействия. Это и определило чрезвычайно широкое применение лазеров в самых различных областях деятельности человека. Вышеперечисленные свойства лазерного луча особенно существенны для использования в биомедицинской диагностике и терапии, если рассматривать различные варианты соотношений оптических свойств биообъектов и контролируемых особенностей лазерного луча. Между тем следует отметить, что описываемые в данной работе подходы можно применять в установках или датчиках, использующих не только лазеры, но и некогерентные источники излучений. Это может быть оправдано с технической точки зрения, но способно усложнить решение обратной оптической задачи с применением регуляризации.

Водные биологические дисперсные системы, или биодисперсии (БДС), — это биообъекты, широко распространенные в природе. К ним относятся все биологические жидкости человека и животных, а также многочисленные природные среды. Обобщенно химический состав и дисперсную структуру таких систем можно определить термином «состояние», а совокупность качественных и количественных показателей, его характеризующих, — термином «параметры состояния».

К характерным особенностям водных биологических дисперсий следует отнести многочисленность параметров их состояния, нестабильность состояния во времени и при изменении физико-химических условий. В оптике дисперсных сред такие системы принято классифицировать как «плохо определенные»; для них затруднены расчеты характеристик с помощью точной теории Ми, применение подходов с регуляризацией, что связано с неопределенностью размеров, формы, числа частиц и их относительного показателя преломления и т. п.

Сложность и изменчивость структуры БДС влекут за собой необходимость как контроля в режиме реального времени (online), так и регулирования их состояния по принципу обратной связи. При этом на практике чаще всего не так важно знание абсолютных значений параметров состояния, например размеров частиц и их ассоциатов, как определение состояния системы в целом, а именно стабильности или динамики его изменения. Перечисленные задачи должны решаться с помощью простых, надежных, неразрушающих, доступных, но при этом высокоинформативных методов анализа. К их числу можно отнести спектральные методы, реализуемые в оптическом диапазоне длин волн.

# Экспериментально-параметрические методы решения задачи

Показано [1-3], что водные биологические дисперсии представляют собой, как правило, полидисперсные полимодальные поликомпонентные системы. Значения параметров состояния, характеризующих каждую моду, могут быть различными. Например, на рис. 1 схематично продемонстрирована бикомпонентная тримодальная полидисперсная система, две моды которой характеризуют два вида частиц (например, клетки и сорбент), а третья - частицы смешанного типа. Каждая мода имеет соответствующие средние значения: эффективного диаметра  $d_{_{3\phi\phi}}$ , числа частиц N, показателя преломления (при наличии поглощения величина *m* – комплексная), удельной мутности g, коэффициента рассеяния К и т. д. В условиях априорной неопределенности достаточно сложно интерпретировать данную систему подбором адекватной математической модели.







Полномпонентной диспереной системы,  $N_{\text{отн.}}$  – относительное число частиц, нормированное на максимальное по всем модам среднее значение числа частиц;  $d_{a\phi\phi}$  – эффективный диаметр частицы. Каждый максимум (1, 2, 3) характеризуется набором

параметров:  $d_{3\phi\phi i}$ ,  $N_i$ ,  $m_i$ ,  $g_i$ ,  $K_i$ , где i = 1, 2, 3

Norн. 1 0,8 0,6 0,4 0,2 0 2 4 6 8 10 12 2b, мкм

Рис. 2. Пример экспериментально полученного распределения частиц по размерам для дисперсии клеток *E.coli* в экспоненциальной фазе роста; 2*b* – размер большой оси эллипсоида [4]; *N*<sub>отн.</sub> – относительное число частиц, нормированное на максимальное значение (см. подпись под рис. 1)

Модельные эксперименты по решению прямых и обратных оптических задач были выполнены с водными дисперсиями анизодиаметрических частиц, причем были отобраны как однокомпонентные, так и бикомпонентные, так и бикомпонентные экземпляры. В первом случае это были клетки *E.coli* (вытянутые эллипсоиды, фактор формы – 3) и частицы природного сорбента каолинита (сплюснутые эллипсоиды, фактор формы – 7), а во втором – смесь клеток с каолинитом.

Сложность структуры и состава данных модельных систем была подтверждена экспериментально. Для дисперсии клеток *E.coli* в питательной среде, находящихся в экспоненциальной фазе роста (рис. 2), было получено бимодальное распределение частиц дисперсной фазы по размерам (методика приведена в авторском свидетельстве [4]).

Распределения частиц дисперсной фазы по размерам, полученные по данным разных методов для водных дисперсий каолинита, представлены на рис. 3. Анализ результатов показал, что, в силу присущих каждому методу ограничений, сложно получить одинаковые по виду распределения частиц по размерам (данные различных методов лишь дополняют друг друга). Хорошее совпадение кривых наблюдалось при обработке данных метода спектротурбидиметрии [18] в сочетании с седиментацией и метода динамического светорассеяния.  $M_i/M$ max



Рис. 3. Распределения частиц по размерам, полученные по данным различных методов [7]: *I* – сочетание спектротурбидиметрии и седиментации [4]; *2* – динамическое рассеяние света, *3* – седиментационный анализ, *4* – световая микроскопия, *5* – счетчик Коултера, *M<sub>i</sub>* – масса частиц со средним диаметром *d<sub>i</sub>*, *M<sub>max</sub>* – максимальная масса частиц из всех частиц со средним диаметром *d<sub>i</sub>* 

Рис. 4 демонстрирует бимодальное распределение частиц по электрофоретической подвижности (данные микроэлектрофореза) в бикомпонентных системах.

Использование при решении обратных задач светорассеяния априорной модели (независимые рассеиватели) в случае взаимодействия частиц в бикомпонентных системах (клетки + каолинит) приводило к расхождению экспериментальных данных с результатами расчетов (см., например, рис. 5), что может свидетельствовать о взаимодействии частиц (как и данные микроэлектрофореза на рис. 4).

Анализ результатов экспериментов с модельными водными биологическими дисперсиями позволил сделать следующие заключения:

разные методы анализа, в том числе «невозмущающие» оптические, дают различную взаимодополняющую информацию, но ни один из них не является абсолютным;

решение прямых и обратных оптических задач с регуляризацией может приводить к расхождению расчетных данных с экспериментальными;

многопараметрический подход, включающий измерения интегрального ослабления света, спектров флуоресценции при разных длинах волн возбуждения, дифференциального статического и динамического светорассеяния для набора углов и т. п., применим как один из путей повышения информативности оптических методов для экспресс-диагностики сложных дисперсных систем (аналогией может служить известный в математике принцип соответствия числа уравнений числу неизвестных). При таком подходе (с использованием оптиче-



Рис. 4. Распределение частиц дисперсных систем по электрофоретической подвижности

(данные микроэлектрофореза) [8]: *1* – водная дисперсия каолинита, *2* – дисперсия клеток *E.coli* (штамм AB 1157), *3* – смешанная дисперсия в исходных концентрациях, *N<sub>i</sub>* – число частиц с подвижностью *U<sub>i</sub>*, *N<sub>max</sub>* – максимальное число частиц из всех частиц с подвижностью *U<sub>i</sub>* 



Рис. 5. Сравнение экспериментальных данных (1) с расчетными (2) в приближении независимых рассеивателей для смешанных дисперсных систем клеток кишечной палочки

*E.coli*, штамм 803-8 (*3*) и каолинита (*4*) в случае, когда между частицами сорбента и клетками есть взаимодействие; *n*(500) волновой экспонент [18], *P<sub>r</sub>* — вероятность распределения признака, в данном случае параметра второго класса — *n*(500) ских параметров второго класса) полидисперсность и полимодальность не являются препятствием для решения задач классификации состояния дисперсных систем;

для анализа состояния БДС, рассеивающих свет, информативными могут быть, в частности, такие параметры, как волновой экспонент для разных спектральных интервалов  $n(\lambda_{cp})$ , определенный при разных углах апертуры фотоприемника  $\gamma$  (спектроскопия интегрального ослабления света); различные параметры диссимметрии индикатрисы при разных углах рассеяния  $I(\Theta_1) / I(\Theta_2)$  и при разной поляризации падающего света (спектроскопия дифференциального светорассеяния).

На базе перечисленных результатов предлагаются методы исследования, описанные в следующем разделе.

#### Экспериментально-параметрические оптические методы определения состояния водных БДС

Указанные методы основаны на получении параметров двух классов.

Первый класс параметров. К нему следует отнести параметры, измеряемые в экспериментах (например, оптическая плотность, интенсивность светорассеяния, интенсивность флуоресценции).

Параметры для биодисперсий с определенным состоянием

$$S_i(c_i, d_{abb,i}, N_i, g_i, K_i, \tilde{m}_i), \ S_i \in S,$$

где  $c_i$  — концентрация,  $d_{i} = i$  эффективный диаметр,  $N_i$  — число частиц,  $g_i$  — удельная мутность,  $K_i$  — коэффициент рассеяния,  $\tilde{m}_i$  — показатель преломления; i = 1, 2, ..., k, можно выразить как

$$p_{i,Si} = f(c_i, d_{\flat \varphi \varphi, i}, N_i, g_i, K_i, \tilde{m}_i), \quad p_{i,Si} \in p,$$

где i = 1, 2, ..., k.

Для каждого состояния *S<sub>i</sub>* имеется свой набор параметров первого класса:

$$p_{1,S1}, p_{2,S1}, p_{3S1}, \dots, p_{kS1};$$

$$p_{1,S2}, p_{2,S2}, p_{3S2}, \dots, p_{kS2};$$

$$p_{1,S3}, p_{2,S3}, p_{3S3}, \dots, p_{kS3};$$

$$\dots, \dots, \dots, \dots, \dots, p_{1,Sk}, p_{2,Sk}, p_{3Sk}, \dots, p_{kSk}.$$

Первый класс параметров не может быть использован для сравнительного анализа состояния биодисперсий, поскольку абсолютная величина параметров, как правило, зависит от концентрации и имеет размерность.

Второй класс параметров. К нему относятся расчетные параметры, полученные с помощью анализа и математической обработки результатов измерений. При этом возможны методы двух типов:

«безрегуляризационный» (без какойлибо предварительной информации о характеристиках дисперсной фазы); примерами могут служить расчет волнового экспонента  $n(\lambda_{cp})$ , диссимметрии индикатрисы рассеяния, квантового выхода флуоресценции и др., комбинированных параметров из разных оптических методов анализа; то же в буквенных обозначениях можно представить как

$$p_{i,Si} = f(d_{\mathfrak{s} \phi \phi, i}, N_i, g_i, K_i, \tilde{m}_i), \quad p_{i,Si} \in p$$

где *i* = 1, 2, ..., *k*.

Для каждого состояния *S<sub>i</sub>* рассчитывается свой набор таких параметров второго класса:

с «регуляризацией» (использующий в расчетах определенную модель), например, решение обратной оптической задачи — на-хождение распределения частиц дисперсной фазы по размерам,  $d_{{}_{{}_{9}{}_{0}{}_{0}{}_{.i}}}$ ,  $N_i$ ,  $\tilde{m}_i$ .

Набор параметров второго класса, полученный без предварительной регуляризации, для каждой системы является уникальным и отражает в неявном виде ее состояние (параметры состояния), а именно функцию распределения частиц по размерам, показатель преломления, форму и внутреннюю структуру частиц, согласно выражению

$$P_{1,S1} = f_{1,1}(d_{\Im \varphi \varphi 1}, N_1, K_1, \tilde{m}_1);$$

$$\begin{split} P_{2,S1} &= f_{2,1}(d_{\Im \varphi \varphi 1}, N_1, K_1, \tilde{m}_1); \\ P_{3,S1} &= f_{3,1}(d_{\Im \varphi \varphi 1}, N_1, K_1, \tilde{m}_1); \\ \dots & \dots & \vdots \\ P_{k,S1} &= f_{k,1}(d_{\Im \varphi \varphi 1}, N_1, K_1, \tilde{m}_1). \end{split}$$

Для успешной реализации экспериментально-параметрических оптических методов, направленных на определение состояний БДС с целью их сравнительного анализа в режиме реального времени, в каждом конкретном случае достаточно сложной и ответственной задачей является выбор дисперсии сравнения («реперной» дисперсии). Следующим шагом должен быть расчет набора параметров второго класса для «реперной» дисперсии и определение параметров, информативных для каждой конкретной задачи. Затем производится сравнение параметров последующих состояний системы с набором параметров «реперной». Если их различия недостоверны, то делается вывод о высокой вероятности стабильности состояния системы. Если же наборы параметров достоверно различаются (например, для малых выборок, согласно непараметрическому И-критерию Манна – Уитни), делается вывод об изменении состояния системы.

Дифференцировать (классифицировать) состояния систем можно различными методами, в том числе и с помощью формальных методов многомерной статистики. К ним относятся MVA – multivariate data analysis, PLSR – partial least squares regression, MCR – multivariate curve resolution, ALS – alternating least squares и другие статистические методы.

#### Использованные методы

В нашей работе использовалось три метода, а именно:

1. Статический — когда состояния БДС дифференцируют графически на плоскости параметров второго класса (параметрическое задание состояния):

$$\frac{\left[P_{i,Si}\right]_{\text{nc}}}{\left[P_{i,Si}\right]_{\text{np}}};\frac{\left[P_{j,Sj}\right]_{\text{nc}}}{\left[P_{j,Sj}\right]_{\text{np}}},$$
(1)

где нижние индексы «дс» относятся к дис-

персии сравнения, а «др» — к «реперной» дисперсии.

2. Динамический — предполагающий графическое построение

$$\frac{\left[P_{i,Si}\right]_{tac}}{\left[P_{i,Si}\right]_{tap}} = f(t), \qquad (2)$$

где нижние индексы «*t*дс» относятся к величинам изменения с течением времени параметров дисперсии сравнения, а «*t*др» к изменению с течением времени параметров «реперной» дисперсии.

3. Информационно-статистический, который предполагает определение соответствия дискретных качественных состояний состояниям, заданным по полученным экспериментальным данным; последние найдены по кусочно-непрерывным шкалам количественных значений параметров второго класса с использованием теоремы Бейеса [17, 19].

Следует отметить, что для характеристики каждого изменившегося состояния можно найти «коэффициент изменения» относительно исходного состояния, а также решить задачу с помощью регуляризационного подхода, например, методом спектротурбидиметрии (СТ) определить эффективный диаметр частиц [18].

#### Алгоритм экспериментальнопараметрического определения состояний

Для сравнительного анализа состояний БДС с возможной технической реализацией в он-лайн-режиме был разработан следующий алгоритм.

Шаг 1. Одновременное измерение интегральных и дифференциальных характеристик ослабления, флуоресценции света в анализируемых дисперсных системах. Получение множества  $p_{i,Si} \in p$ .

Шаг 2. Выбор набора информативных для конкретных БДС и конкретной задачи оптических параметров первого класса, таких как оптическая плотность  $D_{\lambda}$ , интенсивность  $I_{\lambda}$  светорассеяния, флуоресценции. Получение подмножества параметров  $p_1 \subset p$ .

Шаг 3. Расчет параметров второго класса, таких как волновой экспонент *n*, «вытянутость индикатрисы»  $I(\Theta_1)/I(\Theta_2)$ , отношение интенсивностей флуоресценции при разных длинах волн и т. п. Получение множества  $P_{i,Si} \in P$ .

Шаг 4. Анализ изменения параметров при изменении физико-химических условий. Выбор «реперной» дисперсии [S<sub>i</sub>]<sub>пр</sub>.

Шаг 5. Сортировка параметров второго класса:

$$\frac{\left[P_{1,Si}\right]_{\text{AC}}}{\left[P_{1,Si}\right]_{\text{AP}}} > 1, \quad \frac{\left[P_{2,Si}\right]_{\text{AC}}}{\left[P_{2,Si}\right]_{\text{AP}}} = 1,$$
$$\frac{\left[P_{3,Si}\right]_{\text{AC}}}{\left[P_{3,Si}\right]_{\text{AP}}} < 1, \quad \dots, \quad \frac{\left[P_{k,Si}\right]_{\text{AC}}}{\left[P_{k,Si}\right]_{\text{AP}}} \approx 1.$$

Выбор наиболее информативных с учетом погрешности (отличных от единицы, различающихся по знаку) и достоверности различий параметров. Получение подмножества  $P_1 \subset P$ . Дифференцирование (классификация) состояний БДС разными методами (статическим, динамическим, информационно-статистическим).

Разработанный алгоритм был использован и показал свою работоспособность при исследовании серии модельных и природных БДС с составом, различающимся по дисперсности, модальности и оптическим характеристикам.

# Полученные практические результаты и перспективы

В результате практического применения разработанного алгоритма были получены новые научные результаты, имеющие прикладное медико-биологическое значение.

1. Для дисперсий бычьего сывороточного альбумина (БСА) различной степени очистки от примесей произведена оценка возможной агрегации белков в процессе растворения лиофильно высушенных препаратов, что является важным условием контроля сохранения биологической активности белка в лекарственных препаратах [9, 10].

2. Показана принципиальная возможность использования новых синтетических полимеров на основе гомополимера метилсульфатной соли N, N, N, N-триметилметакрилоксиэтиламмония различной молекулярной массы и структурной

организации в качестве флокулянтов в модельных и используемых на практике системах.

Определены кинетика и условия взаимодействия частиц БСА с синтетическими полимерами при вариации концентрации, молекулярной массы, структурной организации, химического состава, содержания и типа ионогенных групп растворимых полимеров, а также pH среды;

На базе исследований, проведенных на модельных системах, определены оптимальные условия флокуляции примесных белков в культуральной жидкости противоопухолевого антрациклинового антибиотика рубомицина [11–14].

3. Определено, что в водном растворе фотосенсибилизатора (ФС) радахлорина (РХ) присутствуют в основном его ассоциаты (поглощение при  $\lambda_{max} = 650$  нм), а в спиртовом – мономеры ( $\lambda_{max} = 662$  нм). Установлено, что в плазме крови (при используемых в терапии концентрациях) ФС РХ присутствует в основном в виде мономеров ( $\lambda_{max} = 660 - 663$  нм), способных активно производить синглетный кислород;

Определено, что лимфосаркома насыщается ФС на порядок активнее здоровой мышечной ткани, причем в спектрах оптической плотности присутствуют максимумы поглощения, характерные как для свободных ассоциатов (650 нм), так и для связанных мономеров РХ (660 нм);

Результаты исследований с использованием РХ могут найти практическое применение при разработке методик определения концентрации его активных (мономерных) форм [15].

4. Определены оптические параметры второго класса для водных дисперсий клеток кишечной палочки различных штаммов, отражающие в неявном виде особенности состояний биодисперсий и позволяющие сравнить их с «реперным» состоянием, а также определить изменения состояний [16].

Основные преимущества разработанного алгоритма заключаются в том, что его можно применять к исследованию полидисперсных систем (большинство из встречающихся на практике), интерпретация оптических характеристик которых затруднена. Кроме того, он не предполагает проведения каких-либо манипуляций с исследуемыми дисперсиями. Другими словами, биообъекты могут изучаться непосредственно в тех условиях и в том микроокружении, в котором они находятся в настоящий момент (это очень важно для таких лабильных систем). Мониторинг можно проводить в режиме реального времени.

Для реализации данного алгоритма в конкретном техническом устройстве не требуется наличия какой-либо уникальной аппаратуры, это могут быть стандартные датчики и приемники оптического излучения.

Простые и доступные анализаторы, определяющие информативные параметры второго класса, могут разрабатываться для решения конкретных практических задач (что важно для коммерческой и ценовой составляющей их практического применения).

Все вышеизложенное подтверждает фундаментальную и практическую значимость предложенных экспериметальнопараметрических методов анализа и перспективность использования лазеров как источников излучения в ходе их практической реализации.

#### Заключение

Следует отметить, что в данной статье кратко описаны только результаты, связанные с формулировкой алгоритма реализаэкспериментально-параметрических ции оптических методов анализа состояний биодисперсий. Эта проблема представляется многодисциплинарной и перспективной в связи с развитием ряда областей науки: биомолекулярной инженерии, наномедицины, нанобиотехнологии, методов охраны окружающей среды и т. п. Важно также отметить, что в результате интенсивного развития теории информации, математической статистики и вычислительной техники определилось важное научное направление – информационно-статистическая теория и методы решения обратных задач, которые предлагают типовые приемы постановки и алгоритмизации задач, а также способы исследования качества решений (количественные критерии эффективности тех или иных методов оценки параметров исследуемой системы: устойчивость, стандартная ошибка калибровки, стандартная ошибка предсказаний, селективность, чувствительность и т. п.). Эти методы интерпретации оказываются применимыми практически в любой области науки.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Bezrukova A.G., Vlasova O.L.** Laser light scattering matrix elements for nanoparticle disperse systems // The Proceedings of the Petersburg Academy of Sciences on Stregth Problems. 2002. Vol. 6. P. 17-19.

2. Vlasova O.L., Bezrukova A.G. Laser control of natural nanoparticle disperse systems // Proceedings of SPIE (Society of Photo-optical Instrumentation Engineering). 2003. Vol. 5127. P. 154-158.

3. **Bezrukova A.G., Vlasova O.L.** Optical characterization of 3D disperse systems with nano- and micro-particles: polymodality of size distributions // Materials Physics and Mechanics. 2012. Vol. 13. No. 2. P. 162-174.

4. Власова О.Л., Безрукова А.Г., Коликов В.М., Симонова Г.М., Бетькенев В.А. Способ анализа дисперсных систем по размерам // А.с. № 1718043. 1992.

5. Власова О.Л., Безрукова А.Г., Коликов В.М. Экспресс-анализ состояния суспензии клеток кишечной палочки // В сб.: Передовой

производственный опыт в медицинской промышленности, рекомендованный для внедрения. 1991. № 2. С. 32–38.

6. Власова О.Л., Безрукова А.Г., Коликов В.М. Оптический анализ смешанной биоминеральной дисперсной системы // Научнотехнические ведомости СПбГПУ. 1998. № 2-3(12-13). С. 152 –156.

7. Власова О.Л., Безрукова А.Г., Мчедлишвили Б.В., Коликов В.М. Анализ распределения частиц каолиновой дисперсии по размерам // Коллоидный журнал. 1991. Т. 53. № 5. С. 826-829.

8. Bezrukova A., Vlasova O., Molodkina L. Optical and electrokinetic properties of biological and mineral disperse systems and their mixtures // Abstracts of International Symposium on Electrokinetic Phenomena (ELKIN) and IUPAC Workshop. Dresden. 2000. P. 40.

9. Власова О.Л. Многопараметрический подход к оптическому анализу модельных дис-

персий бычьего сывороточного альбумина // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2009. № 2 (77). С. 39–45.

10. **Bezrukova A.G., Vlasova O.L.** Aggregation of protein nanoparticles testing by optical spectroscopy // Materials Physics and Mechanics. 2010. Vol. 9. No. 3. P. 167-174.

11. Власова О.Л., Плотникова П.В., Писарев О.А., Панарин Е.Ф. Исследование процессов комплексообразования биологически активных веществ и синтетических полимеров методами оптической спектроскопии// Научнотехнические ведомости СПбГПУ. 2007. № 2 (50). С. 118–123.

12. Власова О.Л., Плотникова П.В., Писарев О.А., Панарин Е.Ф. Структурнофункциональные исследования процесса флокулообразования в модельных биосистемах // Научно-технические ведомости СПбГПУ. 2007. № 3(51). С. 176–180.

13. Плотникова П.В., Власова О.Л., Писарев О.А., Панарин Е.Ф., Грошикова А.Р. Влияние молекулярной массы и структурной организации катионных полиэлектролитов на флокуляцию белка // Журнал прикладной химии. 2008. Т. 81. № 9. С. 1533–1536.

1. № 9. С. 1533—1536. 14. Плотникова П.В., Власова О.Л., Гроши-

кова А.Р., Писарев О.А., Панарин Е.Ф. Взаимодействие бычьего сывороточного альбумина с катионными растворимыми полиэлектролитами// Сорбционные и хроматографические процессы. 2011. Т. 11. № 5. С. 717–721.

15. Власова О.Л. Оптические свойства радахлорина как фотосенсибилизатора в диагностике и медицине // Вестник Санкт-Петербургского университета. Серия 11. 2011. Вып. 1. С. 170–177.

16. Безрукова А.Г., Власова О.Л. Перспективы применения элементов матрицы светорассеяния для анализа состояния биомедицинских систем нано- и микрочастиц // Материалы XVII Международной научно-методической конференции «Высокие интеллектуальные технологии и инновации в образовании и науке». Т. 1. СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2010. Т. 1. С. 211–212.

17. Безрукова А.Г. Статистические подходы к решению обратной оптической задачи для биомедицинских и природных систем микро- и наночастиц // Научно-технические ведомости СПбГПУ. 2007. № 2(50). С. 114–117.

18. **Klenin V.J.** Thermodynamics of systems containing flexible-chain polymers. Elsevier, 1999. 850 p.

19. Гольцман Ф.М. Физический эксперимент и статистические выводы. Л: Изд-во ЛГУ, 1982. 192 с.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ВЛАСОВА Ольга Леонардовна — доктор физико-математических наук, профессор кафедры «Медицинская физика» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. 195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29

olvlasova@yandex.ru

ПЛОТНИКОВА Полина Владимировна — кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Лаборатории молекулярной нейродегенерации Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 plopolina@yandex.ru.

**БЕЗРУКОВА Александра Геннадиевна** — доктор физико-математических наук, профессор кафедры «Медицинская физика» Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. 195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 bezr@pb1097.spb.edu.

*Vlasova O.L., Plotnikova P.V., Bezrukova A.G.* ALGORITM OF REALIZATION OF THE EXPERIMENTAL OPTICAL PARAMETRIC METHODS FOR BIOLOGICAL DISPERSE SYSTEMS ANALYSIS.

The article is devoted to the development and practical testing of the experimental and parametric optical methods for determining and comparing of liquid biological disperse systems on the basis of multiparametric optical analysis.

MULTIPARAMETRIC ANALYSIS, OPTICAL METHODS, BIOLOGICAL DISPERSION.

### REFERENCES

1. Bezrukova A.G., Vlasova O.L. Laser light scattering matrix elements for nanoparticle disperse systems. *The Proceedings of the Petersburg Academy of Sciences on Stregth Problems*, 2002, Vol. 6, pp. 17-19.

2. Vlasova O.L., Bezrukova A.G. Laser control of natural nanoparticle disperse systems. *Proceedings* of SPIE (Society of Photo-optical Instrumentation Engineering), 2003, Vol. 5127, pp. 154-158.

3. **Bezrukova A.G., Vlasova O.L.** Optical characterization of 3D disperse systems with nano-and micro-particles: polymodality of size distributions. *Materials Physics and Mechanics*, 2012, Vol. 13, No. 2, pp. 162-174.

4. Vlasova O.L., Bezrukova A.G., Kolikov V.M., Simonova G.M., Bet'kenev V.A. Sposob analiza dispersnykh sistem po razmeram. A.s, No. 1718043, 1992.

5. Vlasova O.L., Bezrukova A.G., Kolikov V.M. Ekspress-analiz sostoyaniya suspenzii kletok kishechnoy palochki. V sb.: Peredovoy proizvod-stvennyy opyt v meditsinskoy promyshlennosti, rekomendovannyy dlya vnedreniya, 1991, No. 2, pp. 32-38. (rus)

6. Vlasova O.L., Bezrukova A.G., Kolikov V.M. Opticheskiy analiz smeshannoy biomineral'noy dispersnoy sistemy. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal*, 1998,  $\mathbb{N}_{2}$  2-3(12-13), pp. 152-156. (rus)

7. Vlasova O.L., Bezrukova A.G., Mchedlishvili B.V., Kolikov V.M. Analiz raspredeleniya chastits kaolinovoy dispersii po razmeram. *Kolloidnyy zhurnal*, 1991, Vol. 53, No. 5, pp. 826-829. (rus)

8. **Bezrukova A., Vlasova O., Molodkina L.** Optical and electrokinetic properties of biological and mineral disperse systems and their mixtures. Abstracts of International Symposium on Electrokinetic Phenomena (ELKIN) and IUPAC Workshop. Dresden, 2000, P. 40.

9. Vlasova O.L. Mnogoparametricheskiy podkhod k opticheskomu analizu model'nykh dispersiy bych'ego syvorotochnogo al'bumina. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics*, 2009, No. 2 (77), pp. 39-45. (rus)

10. Bezrukova A.G., Vlasova O.L. Aggregation of protein nanoparticles testing by optical spectroscopy. *Materials Physics and Mechanics*, 2010, Vol. 9, No. 3, pp. 167-174.

11. Vlasova O.L., Plotnikova P.V., Pisarev O.A., Panarin E.F. Issledovanie protsessov kompleksoobrazovaniya biologicheski aktivnykh veshchestv i sinteticheskikh polimerov metodami opticheskoy spektroskopii. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal*, 2007, No. 2(50), pp. 32-39. (rus)

12. Vlasova O.L., Plotnikova P.V., Pisarev O.A., Panarin E.F. Strukturno-funktsional'nye issledovaniya protsessa flokuloobrazovaniya v model'nykh biosistemakh. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal*, 2007, No. 3 (51), pp. 176-180. (rus)

13. Plotnikova P.V., Vlasova O.L., Pisarev O.A., Panarin E.F., Groshikova A.R. Vliyanie molekulyarnoy massy i strukturnoy organizatsii kationnykh polielektrolitov na flokulyatsiyu belka. *Zhurnal prikladnoy khimii*, 2008, Vol.. 81, No.9, pp. 1533-1536. (rus)

14. Plotnikova P.V., Vlasova O.L., Groshikova A.R., Pisarev O.A., Panarin E.F. Vzaimodeystvie bych'ego syvorotochnogo al'bumina s kationnymi rastvorimymi polielektrolitami. *Sorbtsionnye i khromatograficheskie protsessy*, 2011, Vol. 11, No. 5, pp. 717-721. (rus)

15. **Vlasova O.L.** Opticheskie svoystva radakhlorina kak fotosensibilizatora v diagnostike i meditsine. *Vestnik Sankt-Peterburgskogo universiteta. Seriya 11*, 2011, Iss. 1, pp. 170-177. (rus)

16. **Bezrukova A.G., Vlasova O.L.** Perspektivy primeneniya elementov matritsy svetorasseyaniya dlya analiza sostoyaniya biomeditsinskikh sistem nano- i mikrochastits. Materialy XVII Mezhdunarodnoy nauchno-metodicheskoy konferentsii «Vysokie intellektual'nye tekhnologii i innovatsii v obrazovanii i nauke». Vol.. 1. SPb.: Izd-vo SPbGPU, 2010, Vol. 1, pp. 211-212. (rus)

17. **Bezrukova A.G.** Statisticheskie podkhody k resheniyu obratnoy opticheskoy zadachi dlya biomeditsinskikh I prirodnykh sistem mikro- i nanochastits. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal*, 2007, No. 2(50), pp. 114-117. (rus)

18. **Klenin V.J.** Thermodynamics of systems containing flexible-chain polymers. Elsevier, 1999, 850 p.

19. Gol'tsman F.M. Fizicheskiy eksperiment i statisticheskie vyvody. L: Izd-vo LGU, 1982, 192 p. (rus)

#### THE AUTHORS

#### VLASOVA Ol'ga L.

St. Petersburg State Polytechnical University, 29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia olvlasova@yandex.ru

#### PLOTNIKOVA Polina V.

St. Petersburg State Polytechnical University,29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia plopolina@yandex.ru.

#### BEZRUKOVA Aleksandra G.

St. Petersburg State Polytechnical University,29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia bezr@pb1097.spb.edu.

УДК 577.322.7

А.В. Сабанцев<sup>1</sup>, С.О. Федечкин<sup>2</sup>, М.А. Ходорковский<sup>1</sup>, Г.Е. Побегалов<sup>1</sup>, А.Д. Ведяйкин<sup>1</sup>, С.Л. Смирнов<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный политехнический университет <sup>2</sup> Западный университет штата Вашингтон

# ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ КАЛЬЦИЙ-СВЯЗЫВАЮЩИХ СВОЙСТВ ДОМЕНА 6 ВИЛЛИНА

Методом спектроскопии собственной флуоресценции белка охарактеризованы кальций-связывающие свойства домена 6 актинрегулирующего белка виллина. Выдвинуто предположение о наличии в домене 6 виллина сайта связывания кальция, и получена оценка константы диссоциации для связывания данного домена с кальцием. Полученное значение  $K_d$  (32 мкМ) свидетельствует о том, что домен 6 виллина может отвечать за физиологически значимый переход этого белка от пучкования к диссоциации актиновых филаментов в ответ на рост концентрации внутриклеточного кальция.

ВИЛЛИН, СОБСТВЕННАЯ ФЛУОРЕСЦЕНЦИЯ БЕЛКОВ, ЦИТОСКЕЛЕТ, МОДУЛЬНЫЕ БЕЛКИ.

#### Введение

Виллин – модульный белок, состоящий из 826 аминокислотных остатков и относящийся к суперсемейству гельзолинподобных актинсвязывающих белков [1], куда также входят, помимо прочих, северин [2], гельзолин [1], супервиллин [3]и архвиллин [4]. Виллин участвует в поддержании микроворсинок в клетках эпителия кишечника и почек [5]. Аминокислотную последовательность этого белка можно разделить на две части: гельзолин-подобное ядро на *N*-конце и небольшой домен (headpiece – НР) на С-конце, который соединен с ядром неструктурированным линкером длиной 40 аминокислотных остатков [1, 6] (рис. 1, б). Ядро виллина примерно на 50 % идентично гельзолину по аминокислотной последовательности и состоит из шести гомологичных повторов  $V_1 - V_6$  (рис. 1,  $\delta$ ), последний из которых, Иб, соединен линкером с НРдоменом [1].

В регуляции активности виллина действует ряд факторов, в том числе уровень кальция [1], фосфорилирование [5] и другие. При физиологическом уровне кальция виллин способен пучковать (bundle) актиновые филламенты (*F*-актин), а в ответ на повышение уровня кальция [1] или фосфорилирование [7] — нуклеировать, разрезать или блокировать их рост. Гельзолин также обладает способностью разрезать актиновые филаменты в ответ на повышение уровня ионов кальция, для чего требуется их концентрация около 10 мкМ [8]. Способность виллина разрезать *F*-актин, в свою очередь, активируется при концентрации ионов кальция 100 – 200 мкМ [9]; такие высокие концентрации достигаются в клетке только при клеточном стрессе и апоптозе. Фосфорилирование ядра виллина, в том числе домена *V*6, делает возможным разрезание актиновых филаментов этим белком уже при наномолярных концентрациях кальция [5, 7].

Механизм активации кальцием гельзолина изучен достаточно хорошо [8]. При низких концентрациях кальция домен G6гельзолина формирует контакт с доменом G2, содержащим сайт связывания актина, что предотвращает связывание белка с F-актином. При связывании кальция с доменом G6 в последнем происходит конформационная перестройка, приводящая к потере контакта с доменом G2 и открытием сайта связывания F-актина. Белок при этом переходит из неактивной закрытой в активную раскрытую конформацию [8, 10].

Одним из ключевых при изучении виллина является вопрос о том, имеет ли



Рис. 1. Структура виллина и его домена 6 (*V*6): *a* – пространственная структура домена (определена методом ЯМР [11]), *б* – доменная структура виллина.

 V1-V6 – гельзолин-подобное ядро виллина, состоящее из шести гомологичных доменов; НР (headpiece) – домен виллина; гибкий линкер между НР и V6 обозначен волнистой линией

этот белок механизм активации кальцием открытой конформации, сходный с гельзолином. Исследования участка И6 – НР виллина курицы, содержащего домены Иб и НР, соединенные гибким линкером, показали, что этот участок находится в состоянии мономера и способен пучковать актиновые филаменты при высоких концентрациях кальция, но при отсутствии кальция теряет эту способность и агрегирует [6]. В то же время домен НР виллина нечувствителен к кальцию и способен при любых его концентрациях связываться с актиновыми филаментами [12-14]. В связи с этим было выдвинуто предположение о наличии в домене 1/6 сайта связывания кальция. Пространственная структура домена Иб, определенная методом ядерного магнитного резонанса (ЯМР), представлена на рис. 1, а. Аминокислотная последовательность домена:

PRLFECSNKTGRFLATEIVDFTQD DLDENDVYLLDTWDQIFFWIGKGANE SEKEAAAETAQEYLRSHPGSRDLDTPII VVKQGFEPPTFTGWFMAWDPLCWSDR KSY.

Целью данной работы являлось изучение кальций-связывающих свойств домена И виллина при помощи спектроскопии собственной флуоресценции белка.

#### Материалы и методы

Подготовка образца *V*6 домена виллина. Процедура экспрессии и выделения домена 6 виллина была подробно описана ранее [10]. Все же приведем ее краткое описание.

Домен *V*6 сверхэкспрессировался в клетках *E.coli* клеточной линии BL21(DE3) (Novagen), после чего клетки лизировались и лизат подвергался двум этапам хромато-графической очистки на колонках Sephadex G50 и GE Superdex 75 HP-SEC. Лизирование и хроматография осуществлялись в буфере A (150 мM NaCl, 5 мM CaCl<sub>2</sub>, 5 мM дитиотрейтол, 0,01% NaN<sub>3</sub>, 20 мM PIPES; pH = 7,0).

Для перевода белка в буфер без кальция осуществлялся обмен буфера с использованием мембранных концентраторов Millipore (порог отсечения 3 кДа), после чего к образцу добавлялся стократный избыток этилендиаминтетрауксусной кислоты (EDTA), которая затем также удалялась посредством обмена буфера.

**Флуориметрические исследования.** Для регистрации собственной флуоресценции остатков триптофана в белке использовался флуориметр Cary Eclipse (Varian). В ходе измерения образцы находились в кварцевых кюветах, за исключением эксперимента по регистрации динамики установления равновесия при добавлении кальция к домену *V*6 виллина.

Для исследования обратимости связывания домена  $V_6$  виллина с кальцием к образцу белка концентрации 10 мкМ в буфере А добавлялась EDTA до концентрации 5 мМ, что приводило к снижению концентрации кальция не менее, чем на два порядка. После этого концентрация кальция в растворе восстанавливалась до уровня 5 мМ добавлением раствора CaCl<sub>2</sub>. В ходе эксперимента регистрировались спектры флуоресценции образца в диапазоне от 290 до 500 нм при возбуждении на длине волны 280 нм.

Регистрация динамики установления равновесия при добавлении кальция к домену *V*6 виллина осуществлялась в акриловой УФ-прозрачной кювете при непрерывном перемешивании при помощи магнитной мешалки. В образец объемом 2,25 мл и концентрацией V6 2,23 мкМ добавлялся раствор CaCl<sub>2</sub> до концентрации 5,0 мМ. В ходе этого регистрировалась динамика интенсивности флуоресценции образца на длине волны 350 нм при возбуждении на длине волны 280 нм.

Титрование домена Иб виллина кальцием осуществлялось посредством добавления к образцу в кювете (концентрация белка 17 мкМ, объем 600 мкл) по 1 мкл раствора CaCl, соответствующих концентраций (от 0,6 мМ до 0,6 М). После каждого добавления кальция образец инкубировался 5 мин для установления равновесия, после чего осуществлялось измерение спектра собственной флуоресценции белка в диапазоне 290 - 500 нм при возбуждении на длине волны 280 нм. Время инкубации было выбрано с учетом данных о кинетике установления равновесия при добавлении кальция к домену Иб виллина (рис. 2, б), демонстрирующих, что установление равновесия занимает менее 10 с. Для построения кривой титрования использовалась средняя интенсивность флуоресценции белка в диапазоне от 325 до 375 нм.

Обработка кривой титрования осуществлялась в рамках стандартного подхода для обратимого связывания белка с лигандом в эквимолярных пропорциях. В качестве меры афинности использовалась константа диссоциации  $K_d$  [15]. Для нелинейной регрессии данных использовалось уравнение, описывающее обратимое связывание белка с кальцием, вызывающее изменение интенсивности регистрируемого сигнала:

$$I = I_0 + (\Delta I / 2 \cdot [V6]) \cdot \{[V6] + [Ca^{2+}] + K_d - (([V6] + [Ca^{2+}] + (1) + K_d)^2 - 4 \cdot [V6] \cdot [Ca^{2+}])^{1/2} \}$$

где I — регистрируемая интенсивность флуоресценции;  $I_0$  — интенсивность флуоресценции белка, свободного от кальция;  $\Delta I$  — разность между интенсивностями флуоресценции белка, связанного с кальцием и свободного от него; [V6], [Ca<sup>2+</sup>] — концентрации белка и кальция;  $K_d$  — константа диссоциации для реакции связывания белка с кальцием.

#### Результаты и их обсуждение

Обратимое конформационное изменение домена *V*6 виллина при связывании с кальцием. Конформационные изменения белков вызывают в них трансформацию ближайшего окружения остатков триптофана, что отражается на интенсивности собственной флуоресценции. Было обнаружено, что при снижении концентрации кальция в растворе домена *V*6 виллина посредством добавления 5 мМ EDTA интенсивность соб-



Рис. 2. Обратимость (*a*) и динамика (*б*) связывания домена *V*6 виллина с кальцием: 1 - 3 - спектры флуоресценции *V*6 в буфере A до (*1*) и после (*2*) добавления EDTA до концентрации 5 мM, а также после повторного увеличения уровня Ca<sup>2+</sup> до 5 мM (*3*); на рис. (*б*) показаны исходный (*4*) и сглаженный (*5*) сигналы; окно сглаживания в 50 точек

ственной флуоресценции белка возрастала примерно на 10 %. Повторное добавление кальция к раствору белка возвращало интенсивность флуоресценции к исходным значениям (рис. 2, a).

Полученные данные позволяют заключить, что домен V6 виллина способен обратимо связывать ионы Ca<sup>2+</sup>, что приводит к конформационной перестройке в этом домене. Кинетические данные о процессе установления равновесия показывают, что интенсивность флуоресценции белка после добавления кальция выходит на насыщение менее, чем за 10 с (рис. 2,  $\delta$ ). Эти данные указывают на лимитацию диффузией скорости связывания V6 с кальцием, что может иметь существенное значение для регуляции микроворсинок (толщина 0,2 мкм) виллином.

Оценка константы диссоциации для связывания домена V6 виллина с кальцием. Для дальнейшей характеризации кальцийсвязывающих свойств домена V6 виллина была проведена оценка константы диссоциации для связывания этого домена с кальцием. С этой целью осуществлялось титрование раствора домена V6 виллина кальцием в диапазоне от 0 до 2000 мкМ [Ca<sup>2+</sup>], в ходе которого регистрировались спектр и интенсивность собственной флуоресценции образца (рис. 3).

На рис. 3, а приведены спектры соб-

ственной флуоресценции домена *V*6 виллина при различных концентрациях кальция. При повышении концентрации кальция наблюдаются снижение интенсивности флуоресценции и небольшой сдвиг полосы испускания в коротковолновую область.

Кривая титрования домена *V*6 виллина кальцием (рис. 3,  $\delta$ ) позволяет определить долю связанного с кальцием белка как функцию концентрации кальция. Нелинейная регрессия полученной зависимости с использованием модели (1) позволила оценить константу диссоциации для связывания данного домена с кальцием, которая составила 32 ± 5 мкМ. Выбранная модель хорошо описывает экспериментальные данные ( $R^2 = 0.96$ ).

#### Выводы

Полученные результаты подтверждают данные ЯМР [10] о способности домена *V*6 виллина связываться с кальцием. При этом процесс сопровождается изменением конформации этого домена.

Кривая титрования домена *V*6 кальцием хорошо описывается уравнением (1) для эквимолярного связывания белка с лигандом при значении  $K_d = 32 \pm 5$  мкМ.

Найденное значение *K<sub>d</sub>* лежит в физиологическом диапазоне концентраций кальция, связанных с переключением виллина



Рис. 3. Результаты титрования домена *V*6 виллина кальцием: *a* – спектры флуоресценции белка при концентрации Ca<sup>2+</sup>, равной 0 (*1*), 30 (*2*), 100 (*3*), 2000 (*4*) мкМ; *б* – кривая титрования (символы – экспериментальные точки, линия – результат нелинейной регрессии данных)

из состояния пучкования филаментов актина в состояние разрыва *F*-актина. Это наблюдение позволяет предположить, что домен *V*6 виллина может участвовать в изменении активности виллина в ответ на повышение концентрации кальция (порог активации – 200 мкМ) [1].

Полученные данные свидетельствуют в пользу того, что виллин обладает аналогичным гельзолину механизмом активации разрыва актиновых филаментов при повышении концентрации кальция.

1. Bretscher A., Weber K. Villin is a major protein of the microvillus cystoskeleton which binds both G and F actin in a calcium-dependent manner // Cell. 1980. Vol. 20. No. 3. pp. 839-47.

2. Andre E., Lottspeich F., Schleicher M., Noegel A. Severin, gelsolin, and villin share a homologous sequence in regions presumed to contain *F*-actin severing domains // J. Biol. Chem. 1988. Vol. 263. No. 2. pp. 722-7.

3. Pestonjamasp K.N., Pope R.K., Wulfkuhle J.D., Luna E.J. Supervillin (p205): A novel membrane-associated, F-actin-binding protein in the villin/gelsolin superfamily // J. Cell Biol. 1997. Vol. 139. No. 5. pp. 1255-69.

4. Gangopadhyay S.S., Takizawa N., Gallant C., Barber A.L., Je H.D., Smith T.C., Luna E.J., Morgan K.G. Smooth muscle archvillin: a novel regulator of signaling and contractility in vascular smooth muscle // J. Cell. Sci. 2004. Vol. 117, Pt. 21. pp. 5043-57.

5. **Khurana S., George S.P.** Regulation of cell structure and function by actin-binding proteins: villin's perspective// FEBS Lett. 2008. Vol. 582. No. 14. pp. 2128-39.

6. Smirnov S.L., Isern N.G., Jiang Z.G., Hoyt D.W., McKnight C.J. The isolated sixth gelsolin repeat and headpiece domain of villin bundle F-actin in the presence of calcium and are linked by a 40-residue unstructured sequence // Biochemistry. 2007. Vol. 46. No. 25. pp. 7488-96.

7. **Kumar N., Khurana S.** Identification of a functional switch for actin severing by cytoskeletal proteins // J. Biol. Chem. 2004. Vol. 279. No. 24. pp. 24915-8.

8. McGough A.M., Staiger C.J., Min J.K., Simonetti K.D. The gelsolin family of actin regulatory Дальнейшие исследования этого домена с использованием сайт-направленного мутагенеза помогут идентифицировать аминокислотные остатки, участвующие в формировании сайта связывания кальция в домене *V*6.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, соглашение 14.В37.21.1230, с использованием оборудования ЦКП «Аналитический центр нано- и биотехнологий ГОУ СПбГПУ» на базе ФГБОУ ВПО «СПбГПУ».

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

proteins: modular structures, versatile functions // FEBS Lett. 2003. Vol. 552. No. 2-3. pp. 75-81.

9. Walsh T.P., Weber A., Davis K., Bonder E., Mooseker M. Calcium dependence of villin-induced actin depolymerization // Biochemistry. 1984. Vol. 23. No. 25. pp. 6099-102.

10. Якимов А.П., Федечкин С.О., Нериновский К.Б., Шабалин К.А., Смирнов С.Л. Структурная стабильность домена 6 виллина в отсутствие ионов кальция // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2013. № 2 (170). С. 149–154.

11. Fedechkin S.O., Brockerman J., Pfaff D.A., Burns L., Webb T., Nelson A., Zhang F., Sabantsev A.V., Melnikov A.S., McKnight C.J., Smirnov S.L. Gelsolin-like activation of villin: calcium sensitivity of the long helix in domain 6 // Biochemistry. 2013. Vol. 52. No. 45. pp. 7890-900.

12. Finidori J., Friederich E., Kwiatkowski D.J., Louvard D. *In vivo* analysis of functional domains from villin and gelsolin // J. Cell Biol. 1992. Vol. 116. No. 5. pp. 1145-55.

13. Meng J., Vardar D., Wang Y., Guo H.C., Head J.F., McKnight C.J. High-resolution crystal structures of villin headpiece and mutants with reduced *F*-actin binding activity // Biochemistry. 2005. Vol. 44. No. 36. pp. 11963-73.

14. Vardar D., Buckley D.A., Frank B.S., McKnight C.J. NMR structure of an F-actin-binding «headpiece» motif from villin // J. Mol. Biol. 1999. Vol. 294. No. 5. pp. 1299-310.

15. Kumar N., Tomar A., Parrill A.L., Khurana S. Functional dissection and molecular characterization of calcium-sensitive actin-capping and actin-depolymerizing sites in villin // J. Biol. Chem., 2004. Vol. 279. No. 43. pp. 45036-46.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**САБАНЦЕВ Антон Владимирович** — аспирант кафедры биофизики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 sabantsev.a.v@gmail.com

ФЕДЕЧКИН Станислав Олегович — студент-магистрант факультета химии Западного университета штата Вашингтон.

Department of Chemistry, Western Washington University, Bellingham, WA, USA fedetcs@gmail.com

**ХОДОРКОВСКИЙ Михаил Алексеевич** — кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник ПНИЛ инженерно-строительного факультета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 khodorkovskii@mail.ru

**ПОБЕГАЛОВ Георгий Евгеньевич** — аспирант кафедры биофизики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 lwdrums@gmail.com

**ВЕДЯЙКИН Алексей Дмитриевич** — студент Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 god-fish@mail.ru

СМИРНОВ Сергей Львович — кандидат биологических наук, доцент факультета химии Западного университета штата Вашингтон.

Department of Chemistry, Western Washington University, Bellingham, WA, USA smirnov@chem.wwu.edu

# Sabantsev A.V., Fedechkin S.O., Khodorkovskii M.A., Pobegalov G.E., Vedyaykin A.D., Smirnov S.L. CHARACTERISATION OF VILLIN DOMAIN 6 CALCIUM-BINDING PROPERTIES.

Using intrinsic protein fluorescence spectroscopy actin-regulating protein villin domain 6 calciumbinding properties were characterized. Acquired data suggests the presence of calcium-binding site in villin domain 6. The affinity of this calcium-binding site was estimated to be 32  $\mu$ M, which suggested that the domain could be responsible for physiological transition of villin from bundling to severing actin filaments in response to the increase of intercellular calcium concentration.

VILLIN, INTRINSIC PROTEIN FLUORESCENCE, CYTOSKELETON, MODULAR PROTEINS.

#### REFERENCES

1. Bretscher A., Weber K. Villin is a major protein of the microvillus cystoskeleton which binds both G and F actin in a calcium-dependent manner. *Cell*, 1980, Vol. 20, No. 3, pp. 839-47.

2. Andre E., Lottspeich F., Schleicher M., Noegel A. Severin, gelsolin, and villin share a homologous sequence in regions presumed to contain *F*-actin severing domains. *J. Biol. Chem*, 1988, Vol. 263, No. 2, pp. 722-7.

3. Pestonjamasp K.N., Pope R.K., Wulfkuhle J.D., Luna E.J. Supervillin (p205): A novel membrane-associated, F-actin-binding protein in the villin/gelsolin superfamily. *J. Cell Biol*, 1997, Vol. 139, No. 5, pp. 1255-69.

4. Gangopadhyay S.S., Takizawa N., Gallant

C., Barber A.L., Je H.D., Smith T.C., Luna E.J., Morgan K.G. Smooth muscle archvillin: a novel regulator of signaling and contractility in vascular smooth muscle. *J. Cell. Sci*, 2004, Vol. 117, Pt. 21, pp. 5043-57.

5. **Khurana S., George S.P.** Regulation of cell structure and function by actin-binding proteins: villin's perspective. *FEBS Lett*, 2008, Vol. 582, No. 14, pp. 2128-39.

6. Smirnov S.L., Isern N.G., Jiang Z.G., Hoyt D.W., McKnight C.J. The isolated sixth gelsolin repeat and headpiece domain of villin bundle F-actin in the presence of calcium and are linked by a 40-residue unstructured sequence. *Biochemistry*, 2007, Vol. 46, No. 25, pp. 7488-96.

7. **Kumar N., Khurana S.** Identification of a functional switch for actin severing by cytoskeletal proteins. *J. Biol. Chem*, 2004, Vol. 279, No. 24, pp. 24915-8.

8. McGough A.M., Staiger C.J., Min J.K., Simonetti K.D. The gelsolin family of actin regulatory proteins: modular structures, versatile functions. *FEBS Lett.*, 2003, Vol. 552, No. 2-3, pp. 75-81.

9. Walsh T.P., Weber A., Davis K., Bonder E., Mooseker M. Calcium dependence of villin-induced actin depolymerization. *Biochemistry*, 1984, Vol. 23, No. 25, pp. 6099-102.

10. Yakimov A.P., Fedechkin S.O., Nerinovskiy K.B., Shabalin K.A., Smirnov S.L. Strukturnaya stabil'nost' domena 6 villina v otsutstvie ionov kal'tsiya. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics*, 2013, No. 2 (170), pp. 149-154. (rus)

11. Fedechkin S.O., J. Brockerman, Pfaff D.A., L. Burns, T. Webb, A. Nelson, F. Zhang, Sabantsev A.V., Melnikov A.S., McKnight C.J., Smirnov S.L. Gelsolin-like activation of villin: calcium sensitivity of the long helix in domain 6.. *Biochemistry*, 2013, Vol. 52, No. 45, pp. 7890-900.

12. Finidori J., Friederich E., Kwiatkowski D.J., Louvard D. In vivo analysis of functional domains from villin and gelsolin. *J. Cell Biol*, 1992, Vol. 116, No. 5, pp. 1145-55.

13. Meng J., Vardar D., Wang Y., Guo H.C., Head J.F., McKnight C.J. High-resolution crystal structures of villin headpiece and mutants with reduced *F*-actin binding activity. *Biochemistry*, 2005, Vol. 44, No. 36, pp. 11963-73.

14. Vardar D., Buckley D.A., Frank B.S., McKnight C.J. NMR structure of an *F*-actin-binding «headpiece» motif from villin. *J. Mol. Biol*, 1999, Vol. 294, No. 5, pp. 1299-310.

15. Kumar N., Tomar A., Parrill A.L., Khurana S. Functional dissection and molecular characterization of calcium-sensitive actin-capping and actin-depolymerizing sites in villin. *J. Biol. Chem.*, 2004, Vol. 279, No. 43, pp. 45036-46.

#### THE AUTHORS

#### SABANTSEV Anton V.

St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia sabantsev.a.v@gmail.com

#### FEDECHKIN Stanislav O.

Western Washington University Bellingham, WA, USA fedetcs@gmail.com

#### KHODORKOVSKII Mikhail A.

St. Petersburg State Polytechnical University, 29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia khodorkovskii@mail.ru

#### **POBEGALOV** George E.

St. Petersburg State Polytechnical University,
29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia
Iwdrums@gmail.com

#### VEDYAYKIN Alexey D.

St. Petersburg State Polytechnical University, 29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia god-fish@mail.ru

#### SMIRNOV Serge L.

Western Washington University Bellingham, WA, USA smirnov@chem.wwu.edu

© Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, 2014

# Ядерная физика

УДК 536.421

Д.А. Иванищев <sup>1</sup>, А.Е. Иванов <sup>1</sup>, Д.О. Котов <sup>2</sup>

<sup>7</sup> Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова <sup>2</sup> Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

## РОЖДЕНИЕ *К*<sup>\*</sup> И <sup>(1)</sup>-МЕЗОНОВ В СТОЛКНОВЕНИЯХ ЯДЕР ДЕЙТЕРИЯ И ЗОЛОТА ПРИ ЭНЕРГИИ 200 Гэв

В статье представлены результаты измерения инвариантных спектров по поперечному импульсу и факторов ядерной модификации для  $K^*(892)$ - и  $\omega$ -мезонов в столкновениях ядер дейтерия и золота при энергии 200 ГэВ. Про-изведено сравнение полученных результатов с измерениями рождения других легких мезонов, таких как  $\pi^0$ -,  $K_s$ -,  $\eta$ -,  $\eta'$ - и  $\varphi$ -мезонов. Проведено систематическое исследование спектров рождения мезонов в центральных столкновениях ядер дейтерия и золота.

СТОЛКНОВЕНИЯ ЯДЕР, МЕЗОНЫ, РОЖДЕНИЕ, ЛЕГКИЕ КВАРКИ, АНАЛИЗ.

#### Введение

Значительное подавление выхода адронов по отношению к их выходам в протонпротонных взаимодействиях, умноженных на соответствующее число парных неупругих нуклон-нуклонных взаимодействий, в столкновениях тяжелых ультрарелятивистских ядер вначале было обнаружено на ускорителе RHIC [1], а затем и на ускорителе LHC [2]. В области больших поперечных импульсов ( $p_T > 5 \ \Gamma \Rightarrow B/c$ ) в центральных столкновениях ядер золота при энергии  $\sqrt{S_{_{NN}}} = 200 \ \Gamma$ эВ выходы адронов подавлены примерно в пять раз. В центральных столкновениях ядер свинца при энергии  $\sqrt{S_{_{NN}}} = 2,76$  ТэВ в области поперечных импульсов (5 – 6 ГэB/c) адроны подавлены в семь раз, и степень подавления уменьшается с увеличением поперечного импульса, достигая значения, близкого к двум, при  $p_{T} > 40 \ \Gamma \ni B/c$ . В области больших поперечных импульсов (более 5 – 6 ГэВ/с) выходы адронов одинаково подавлены и степень подавления не зависит от типа, массы и кваркового состава частицы. В то же время в области промежуточных поперечных импульсов (2 – 5 ГэB/c) наблюдается зависимость степени подавления выхода адронов от их типа и кваркового состава. Для объяснения подобной зависимости необходимо разделить влияние эффектов начального и конечного состояний на свойства рождающихся частиц. Одним из возможных способов изучения эффектов начального состояния является систематическое исследование рождения адронов в столкновениях тяжелых и легких ядер, например дейтерия и золота (d + Au) или протонов и ядер свинца (p + Pb). В недавно полученных экспериментальных данных о рождении адронов в (*p* + Pb)-столкновениях при энергии  $\sqrt{S_{NN}} = 5,02$  ТэВ наблюдается избыток выхода адронов в области промежуточных поперечных импульсов. Данное наблюдение может свидетельствовать о существенном влиянии коллективных эффектов, наблюдаемых в (p + Pb)- [3] и (d + Au)- [1] столкновениях, на свойства рождающихся адронов в этой области поперечных импульсов.

В настоящей работе представлены результаты измерения инвариантных спектров по поперечному импульсу и факторов ядерной модификации для *К*\*(892)- и  $\omega$ -мезонов в столкновениях ядер дейтерия
и золота при энергии  $\sqrt{S_{NN}} = 200$  ГэВ. Измерения выполнены на экспериментальной установке PHENIX на ускорителе RHIC [4] в области быстрот |y| < 0,35. Результаты сравниваются со спектрами рождения и факторами ядерной модификации для  $\pi^0$ -,  $K_s$ -,  $\eta$ -,  $\eta'$ - и  $\varphi$ -мезонов. Произведено систематическое исследование спектров рождения легких мезонов в (d + Au)-столкновениях.

#### Отбор данных и методика измерений

Исследование рождения  $\omega$ - и  $K^*$ -мезонов с помощью экспериментальной установки PHENIX осуществлялось в каналах распадов  $\omega \to \pi^0 + \pi^+ + \pi^-$  и  $K^* \to K^{\pm} + \pi^{\mp}$ . При этом анализировалась выборка данных, накопленная экспериментом PHENIX во время физической работы ускорителя RHIC в 2008 г. Размер выборки данных соответствует светимости 81 нбарн<sup>-1</sup> [1].

Количество рожденных мезонов с поперечным импульсом  $p_T$  в интервале быстрот  $\Delta y$  в столкновении ядер определяется инвариантным выходом  $Y_{_{\rm ИHB}}(p_T)$ , который вычисляется по следующей формуле [5]:

$$\begin{split} Y_{\text{\tiny HHB}}(p_T) &= \frac{1}{2\pi p_T} \frac{d^2 N}{dp_T dy} = \\ &= \frac{N(p_T)}{2\pi p_T N_{\text{coff}} \varepsilon(p_T) \text{Br} \Delta p_T \Delta y} \,, \end{split}$$

где  $p_T$  – поперечный импульс мезона; у – быстрота; N(p<sub>т</sub>) – число мезонов, зарегистрированных с помощью экспериментальной установки (так называемый выход мезонов);  $\Delta p_T$  – диапазон поперечных импульсов, в пределах которого определяется выход мезонов;  $\varepsilon(p_{\tau}) - \phi$ ункция коррекции, учитывающая геометрический аксептанс, разрешение, эффективность работы детекторных подсистем экспериментальной установки PHENIX, а также влияние множественности частиц на эффективность регистрации мезонов; N<sub>соб</sub> число анализируемых столкновений ядер; Br – вероятность распада по исследуемому каналу, которая составляет почти 66% для канала распада  $K^* \to K^{\pm} + \pi^{\mp}$  и 89,2 % для  $\omega \rightarrow \pi^0 + \pi^+ + \pi^- [6].$ 

Канал распада  $\omega \to \pi^0 + \pi^+ + \pi^-$  имеет нейтральный пион в конечном состоянии, который представляет собой короткоживущую частицу, распадающуюся на два  $\gamma$ -кванта с вероятностью 98,823  $\pm$  0,034 % Поэтому для определения выхода [6]. ω-мезонов вначале были восстановлены основные характеристики  $\pi^0$ -мезонов по методике, описанной в работах [4, 5]. В пары объединялись только те ү-кванты, энергия которых превышала 0,2 ГэВ. Требовалось, чтобы поперечный импульс пары был больше 1 ГэВ/с. Затем нейтральные пионы, прошедшие критерии отбора, в пределах одного зарегистрированного столкновения комбинировались с парами положительно и отрицательно заряженных частиц. Выход ш-мезонов определялся путем аппроксимации спектра инвариантной массы триплетов  $\pi^0 \pi^+ \pi^-$  функцией, состоящей из суммы полинома второй степени и функции Гаусса. Интеграл функции Гаусса брался в качестве показателя выхода о-мезонов. Пример результата аппроксимации спектра инвариантной массы триплетов  $\pi^0 \pi^+ \pi^-$  с поперечным импульсом  $6 < p_T < 7 \ \Gamma \ni \mathbf{B}/c$ , показан на рис. 1, а.

Усредненное значение инвариантных выходов К\*- и антиК\*-мезонов (К\* + анти $K^*$ )/2 берется как итоговое значение инвариантного выхода К\*-мезонов. Выходы К\*- и антиК\*-мезонов измеряются в адронных каналах распада  $K^{+} + \pi^{-}$  и  $K^{-} + \pi^{+}$ . Для этого разнозаряженные частицы, зарегистрированные в одном столкновении, комбинируются в пары. Учитываются только частицы, поперечный импульс которых больше 0,3 ГэВ/с. Считается, что заряженная частица является каоном либо пионом, и в зависимости от исследуемого канала распада и ее заряда ей приписывается масса заряженного каона либо пиона. Для увеличения статистической значимости экспериментальных данных в широкой области поперечных импульсов спектры инвариантной массы пар  $K^{\pm}\pi^{\mp}$  восстанавливаются в рамках трех следующих различных подходов [7]:

без идентификации частиц. В пары комбинируются все разнозаряженные частицы, получивших свое подтверждение в третьем слое падовых камер или электромагнитном калориметре;

б) a) Количество отсчетов $\times 10^3/(10 \text{ M}_{3}\text{B}/c^2)$ Количество отсчетов×10<sup>3</sup>/(25 МэВ/с<sup>2</sup>) 20 25 linder de la construction de la 3 11 111 0.7 0.6 0,9 1,1 1,0 0,8 ,  $\Gamma \mathfrak{B}/c^2$  $M_{\kappa\pi}, \Gamma \mathfrak{B}/c^2$ 

Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки № 1(189) 2014

Рис. 1. Спектры инвариантной массы триплетов  $\pi^0\pi^+\pi^-(a)$  и разнозаряженных пар  $K\pi$ -мезонов (б). Спектры аппроксимированы функцией, состоящей из суммы полинома второй степени (пунктир) и функции Гаусса (*a*) либо из суммы полинома третьей степени (пунктир) и функции Брейта – Вигнера, свернутой с функцией Гаусса (б)

с идентификацией пионов и каонов. В данном случае в пары объединяются только частицы, идентифицированные как каоны или пионы. Идентификация частиц осуществляется времяпролетной системой экспериментальной установки PHENIX;

с идентификацией каона. В данном подходе требуется, чтобы одна из частиц пары была идентифицирована как каон, а другая частица получила подтверждение своей проекции в третьем слое падовых камер детектора PHENIX.

Комбинаторный фон [5] в спектре инвариантной массы пар  $K^{\pm}\pi^{\mp}$  максимален в области малых поперечных импульсов и уменьшается с его ростом. Большой уровень комбинаторного фона в области малых поперечных импульсов (менее  $2 - 3 \Gamma \Im B/c$ ) не позволяет выделить сигнал в спектре, восстановленном без идентификации частиц. В области значений поперечных импульсов более 2 – 3 ГэВ/с величина полезного сигнала ограничена только накопленной статистикой. Использование подхода с идентификацией заряженных частиц позволяет существенно уменьшить количество фоно-

вых отсчетов. Ввиду ограниченности аксептанса времяпролетной системы и методики идентификации заряженных частиц, данный подход позволяет восстанавливать спектры инвариантной массы разнозаряженных пар каонов и пионов только в области значений поперечных импульсов менее 4 ГэВ/с. Третий подход с идентификацией каона обеспечивает наилучшую статистическую значимость экспериментальных данных в области значений поперечных импульсов  $2 - 3 \Gamma_{3}B/c$ . Использование трех различных подходов позволяет выделить сигнал в широкой области поперечных импульсов со следующими значениями:

1,1 – 4,0 ГэВ/с с идентификацией мезонов:

2,3 - 8,5 ГэВ/с без идентификации мезонов;

1,4 – 4,5 ГэВ/с с идентификацией каона.

Результаты измерений с помощью трех методик получены в широкой области значений поперечного импульса, а это позволяет проводить гибкое изучение систематических неопределенностей и проверку правильности проведенных измерений.

Спектр инвариантной массы разнозаряженных пар каонов и пионов состоит из сигнала и фоновой составляющей. В свою очередь фон состоит из комбинаторной и коррелированной частей.

Для оценки комбинаторной части фоновой подложки использовался метод смешивания столкновений [7]. Для этого положительно (отрицательно) заряженные частицы одного столкновения объединялись в пары с отрицательно (положительно) заряженными частицами двадцати других некорреллированных столкновений. При этом смешивались столкновения с близкими значениями центральности (разница не превышает 10 %) и координатами положения точки взаимодействия (разница не превышает одного сантиметра). После нормировки полученного спектра на коэффициент  $2\sqrt{N^{++}N^{--}}$ , где  $N^{++}$  и  $N^{--}$  – число пар положительно или отрицательно заряженных частиц, он вычитался из спектра инвариантной массы пар Кл-мезонов. Неверная идентификация мезонов от распадов  $K \rightarrow$  $K^+K^-$  и  $\phi \to K^+K^-$  приводят к образованию коррелированной части фона. Пары треков от данных распадов образуют дополнительный пик, расположенный рядом с пиком *К*<sup>\*</sup>-мезона, в спектре инвариантной массы пар  $K^{\pm}\pi^{\mp}$ .

Коррелированная фоновая составляющей была оценена моделированием взаимодействия частиц от распадов  $K_s \rightarrow K^+K^-$  и  $\varphi \rightarrow K^+K^-$  с экспериментальной установкой PHENIX методом Монте-Карло; при этом использовались результаты измерения сечений рождения  $K_s$ - и  $\varphi$ -мезонов [1, 4]. Коррелированный фон был вычтен из спектра инвариантной массы пар  $K\pi$ -мезонов.

Спектр инвариантной массы для разнозаряженных пар  $K\pi$ -мезонов с поперечным импульсом 5,0 <  $p_T$  < 5,5 ГэВ/с, полученный после вычитания комбинаторного и коррелированной фона представлен на рис. 1,  $\delta$ . Для определения выхода  $K^*$ -мезонов спектр инвариантной массы аппроксимируется суммой полинома третьей степени и функции Брейта — Вигнера, свернутой с распределением Гаусса [7]. Полином используется для описания остаточного фона. Свертка функции Брейта — Вигнера с функцией Гаусса используется для описания формы пика К\*-мезона, поскольку экспериментально измеренное массовое разрешение детектора PHENIX (около 5 МэВ/с<sup>2</sup>) значительно меньше природной ширины  $K^*$ -мезона (примерно 48 МэВ/ $c^2$ ) и описывает форму пика  $K^*$ -мезона с учетом массового разрешения детектора PHENIX. Зависимость массового разрешения экспериментальной установки PHENIX от поперечного импульса частицы определяется из моделирования взаимодействия частиц с экспериментальной установкой PHENIX методом Монте-Карло [7]. Выход *К*<sup>\*</sup>-мезонов принимается равным количеству отсчетов в окне по инвариантной массе ±75 МэВ/с<sup>2</sup> от номинальной массы К<sup>\*</sup>-мезона. Инвариантный выход  $K^*$ -мезонов был измерен в рамках трех различных подходов, перечисленных выше. Финальные спектры  $K^*$ -мезонов по поперечному импульсу были получены из комбинации трех измерений, основываясь на статистических и систематических ошибках измерений. Подобная комбинация точек обеспечивала минимальные значения статистических и систематических ошибок экспериментальных точек в финальном спектре.

Функции коррекции  $\varepsilon(p_T)$  для  $K^*$ - и  $\omega$ -мезонов были рассчитаны по методике, описанной в работе [5].

Систематические ошибки измерения инвариантных выходов  $K^*$ - и  $\omega$ -мезонов обусловлены ошибками, вносимыми модельным расчетом функции коррекции  $\varepsilon(p_T)$ , методикой измерения выхода мезонов и ошибкой измерения вероятности распада по каналам  $K^* \to K^{\pm} + \pi^{\mp}$  и  $\omega \to \pi^0 + \pi^+ + \pi^-$ . Систематические ошибки обычно разделяют на три типа [5]:

А – не зависящие от поперечного импульса;

 B – зависящие от поперечного импульса, но форма зависимости не известна;

С – связанные с неопределенностью нормировки.

Основными источниками систематических ошибок измерения инвариантных выходов  $K^*$ - и  $\omega$ -мезонов являются неизбежно возникающие неопределенности, которые связаны с точностью моделирования экспериментальной установки. К ним можно отнести следующие «точности»:

задание геометрии, энергетической шкалы, пространственного и энергетического разрешений детектора PHENIX в модельном расчете (тип B);

описание материалов детектора в модельном расчете (тип С);

вычисление эффективностей триггеров экспериментальной установки PHENIX (тип В или С);

восстановление основных характеристик нейтральных пионов при физическом анализе экспериментальных данных и в модельном расчете при применении критериев отборов  $\pi^0$ -мезонов (тип В);

определение выхода  $K^*$ - и  $\omega$ -мезонов в модельном расчете (тип B);

методика измерения выхода мезонов (тип А);

измерение вероятности распада по исследуемым каналам (тип С).

Оценка систематической ошибки измерения выхода мезонов проводилась путем аппроксимации спектра инвариантной массы продуктов исследуемого распада с измененной функцией, отвечающей за описание комбинаторного фона (например, использование полинома третьей степени вместо параболы); путем изменения интервалов аппроксимации для определения формы фона под пиком; путем повторения анализа с дополнительным условием (например, проекции треков должны были быть подтверждены в электромагнитном калориметре или нейтральные пионы распада  $\omega$ -мезона комбинировались с  $\gamma$ -квантами с энергией более 1,5 ГэВ). Для каждого случая вычислялись инвариантные выходы. Систематическая ошибка, связанная с определением выхода мезонов, определялась как значение среднеквадратического отклонения, деленного на среднее значение полученных величин инвариантных выходов.

Для оценки систематических ошибок вычисления функции коррекции  $\varepsilon(p_T)$  инвариантные выходы  $K^*$ - и  $\omega$ -мезонов вычислялись при измененных величинах разрешения, длины энергетической шкалы и размера активной области детектора PHENIX в пределах ошибок их измерения. Разницы брались в качестве систематических ошибок; их значения приведены в табл. 1. Суммарная ошибка  $\varepsilon_{сум}$  была вычислена как корень квадратный из суммы квадратов систематических ошибок  $\varepsilon_{.}$ :

$$\varepsilon_{\text{сум}} = \sqrt{\sum_i \varepsilon_i^2}.$$

#### Результаты измерений

Результаты измерения инвариантных

Таблица 1

Измеряемая величина	ω	<i>K</i> *	Тип
Аксептанс	6	3 - 7	В
Энергетическое разрешение	2 - 5	—	В
Энергетическая шкала	3 - 6	2 - 7	В
Отбор заряженных частиц	_	6 - 11	В
Эффективность ү-триггера	2 - 10	—	В
Конверсия ү-квантов	3	—	С
Эффективность MinBias триггера	7,8		С
Выход мезонов:			
данные эксперимента	4 - 25	7 - 12	А
модельный расчет	1 -	3	В

Систематические неопределенности измерения (в процентах) инвариантных выходов ω- и K\*-мезонов

Примечание: Прочерки приведены в случаях отсутствия неопределенности.



Рис. 2. Зависимость инвариантных выходов  $\omega$ -(*a*) и  $K^*$ -(*b*) мезонов от поперечного импульса в столкновениях ядер дейтерия и золота при энергии  $\sqrt{S_{NN}} = 200$  ГэВ для различных классов столкновений по центральности, %: 0 - 88 (1, 6), 0 - 20 (2, 7), 20 - 40 (3, 8), 40 - 60 (4, 9), 60 - 88 (5, 10)

спектров по поперечному импульсу  $\omega$ - и  $K^*$ мезонов представлены на рис. 2. Измерения выполнены для пяти классов столкновений по центральности, %: 0 - 88, 0 - 20, 20 - 40, 40 - 60 и 60 - 88. Диапазон измерений по поперечному импульсу составляет от 3 до 14 ГэВ/с для ω-мезонов и от 1,3 до 8,75 ГэВ/с для К\*-мезонов. На данном и всех последующих рисунках вертикальные «усы» и прямоугольники вокруг символов соответствуют статистическим и систематическим ошибкам измерений. Диапазон измерений в области больших поперечных импульсов ограничен доступной статистикой, а в области малых поперечных импульсов - быстро уменьшающимся аксептансом экспериментальной установки.

Полученные результаты и существующие экспериментальные данные о рождении  $\pi^{0}$ -,  $K_s$ -,  $\eta$ -,  $\eta$ '- и  $\varphi$ -мезонов [1, 4, 7] позволяют провести систематическое исследование форм спектров рождения мезонов в центральных столкновениях ядер дейтерия и золота при энергии  $\sqrt{S_{NN}} = 200$  ГэВ. Аналогично исследованию форм спектров рождения мезонов в столкновениях протонов при энергии  $\sqrt{S} = 200$  ГэВ [1, 8] спектры были аппрок-

симированы функцией Тсаллиса, заданной уравнением

$$Y_{\text{инb}}(p_T) = \frac{1}{2\pi} \frac{dY}{dy} \frac{n-1}{nT + m_0(n-1)} \times \frac{n-2}{nT + m_0} \left(\frac{nT + m_T}{nT + m_0}\right)^{-n},$$

где dY/dy — интегральный выход частицы в области быстрот |y| < 0,35; T — свободный параметр;  $m_0$  — масса покоя частицы; n — степенной показатель;  $m_T$  — поперечная масса частицы,

$$m_T = (p_T^2 + m_0^2)^{1/2};$$

*p*<sub>*T*</sub> – поперечный импульс частицы.

Для параметров *n* и *T* были получены следующие линейные зависимости от массы покоя частицы:

+  $(0,108 \pm 0,004)m_0 [\Gamma \ni B/c^2]$ 

при величине  $\chi^2$ , деленной на число степеней свободы, равной соответственно 1,6 и 0,8.

#### Таблица 2

Значения интегральных выходов мезонов различного вида по результатам аппроксимации спектров их рождения функцией Тсаллиса

Мезон	dY/dy
$\pi^0$	$11,23 \pm 0,14 \pm 0,10$
η	$1,35 \pm 0,04 \pm 0,02$
η'	$0,14 \pm 0,02 \pm 0,01$
K <sub>s</sub>	$1,43 \pm 0,04 \pm 0,03$
φ	$0,14 \pm 0,01 \pm 0,01$
ω	$1,00 \pm 0,04 \pm 0,03$
$K^*$	$0,32 \pm 0,01 \pm 0,01$

Примечание: Величины  $\chi^2$ , отнесенные к числу степеней свободы, были близки к единице.

Результаты аппроксимации спектров по поперечному импульсу при значениях параметров n = 10,3 и  $T = 0,131 + 0,108m_0$  показаны на рис. 3. Полученные значения интегральных выходов частиц dY/dy приведены в табл. 2. Величины  $\chi^2$ , отнесенные к числу степеней свободы, для результатов аппроксимации были близки к единице.



Рис. 3. Инвариантные спектры по поперечному импульсу  $\pi^0$ -(1),  $\eta$ -(2),  $\eta'$ -(3),  $K_s$ -(4),  $\varphi$ -(5),  $\omega$ -(6), и  $K^*$ -мезонов (7) в центральных столкновениях ядер дейтерия и золота.

Пунктиры — результаты аппроксимации спектров функцией Тсаллиса при фиксированных значениях параметров n = 10,3 и  $T = 0,131 + 0,108m_0$  Таким образом, функция Тсаллиса описывает инвариантные спектры во всей области измерений и позволяет оценить интегральные выходы мезонов. Измерить эти величины на экспериментальной установке PHENIX в области малых поперечных импульсов не представляется возможным.

Для оценки влияния коллективных эффектов на свойства  $\omega$ - и  $K^*$ -мезонов, рождающихся в столкновениях ядер дейтерия и золота, были рассчитаны факторы ядерной модификации по формуле [5]:

$$R_{AA}(p_T) = \frac{1}{N_{\text{ct}}} \frac{Y_{\text{инв}}^{A+A}(p_T)}{Y_{\text{инв}}^{p+p}(p_T)},$$

где  $Y_{_{\rm ИHB}}^{^{A+A}}(p_T)$ ,  $Y_{_{\rm ИHB}}^{^{p+p}}(p_T)$  — инвариантные выходы частицы, измеренные во взаимодействиях ядер (A + A) или в протон-протонных столкновениях (p + p) в интервале импульсов  $dp_T$ , в диапазоне быстрот dy при одной и той же энергии пары взаимодействующих нуклонов;  $N_{_{\rm CT}}$  — число парных неупругих нуклон-нуклонных столкновений, произошедших при взаимодействии ядер.

При расчете факторов ядерной модификации использовались инвариантные выходы ω- и *К*<sup>\*</sup>-мезонов в протонных столкновениях, опубликованные в работах [1, 8]. Значения  $N_{\text{столкн}}$  были вычислены в рамках модели Глаубера [5]. Зависимость фактора ядерной модификации от поперечного импульса показана на рис. 4. Там же представлены факторы ядерной модификации, измеренные для мезонов пяти типов [1]. Поведение факторов ядерной модификации для  $\omega$ - и  $K^*$ -мезонов в области промежуточных (2 – 5 ГэВ/с) и больших более  $5 - 6 \Gamma_{3}B/c$ ) поперечных импульсов в пределах ошибок измерений согласуется с поведением факторов ядерной модификации для других мезонов. В периферийных столкновениях не наблюдается влияния коллективных эффектов на рождение мезонов. В центральных столкновениях в области промежуточных поперечных импульсов выход мезонов избыточен. Степень избыточности одинакова для всех мезонов и составляет 10 - 15 %. В области больших поперечных импульсов выходы мезонов одинаково подавлены на 10 - 20 %. Ре-



Рис. 4. Зависимости факторов ядерной модификации для π<sup>0</sup>-(*I*), η-(*2*), η'-(*3*), *K<sub>s</sub>*-(*4*), φ-(*5*), ω-(*6*) и *K*<sup>\*</sup>-мезонов (*7*) от поперечного импульса в центральных (0 – 20 %) (*a*) и периферийных (60 – 88 %) (*б*) столкновениях ядер дейтерия и золота. Вертикальные прямоугольники вблизи правых осей ординат соответствуют систематическим

ошибкам определения величины N<sub>ст</sub>

зультаты измерения факторов ядерной модификации для  $\omega$ - и  $K^*$ -мезонов подтверждают факт слабой зависимости эффектов начального состояния от массы мезонов и их кваркового состава [1, 4].

# 1. Бердников Я.А., Иванищев Д.А., Котов Д.О., Рябов В.Г., Рябов Ю.Г., Самсонов В.М. Рождение странных адронов в ядро-ядерных взаимодействиях в эксперименте PHENIX на коллайдере RHIC // Ядерная физика и инжиниринг. 2013. Т. 4. № 9-10. С. 812-817.

2. Müller B., Schukraft J., Wyslousch B. First results from Pb + Pb collisions at the LHC //Annual Review of Nuclear and Particle Science. 2012. Vol. 62. P. 361-386.

3. Aad G., Abajyan T., Abbott B. et al. (Atlas collaboration). Transverse momentum, rapidity, and centrality dependence of inclusive charged-particle production in  $\sqrt{S_{NN}} = 5.02$  TeV p + Pb collisions measured by the ATLAS experiment // ATLAS-

#### Заключение

В настоящей статье представлены экспериментальные результаты по исследованию рождения  $\omega$ - и  $K^*$ -мезонов в столкновениях ядер дейтерия и золота при энергии  $\sqrt{S_{_{NN}}} = 200 \ \Gamma$ эВ. Измерения выполнены для пяти классов столкновений по центральности в области поперечных импульсов от 3 до 13 ГэВ/с для ω-мезонов и от 1.30 до 8,75 ГэВ/с для К\*-мезонов. На основе измеренных в работе инвариантных спектров по поперечному импульсу ω- и K<sup>\*</sup>-мезонов и существующих результатов исследования других легких мезонов проведено систематическое исследование формы спектров рождения мезонов в центральных столкновениях ядер дейтерия и золота.

Установлено, что для описания спектров целесообразно использовать функциональную зависимость на основе распределения Тсаллиса, применяемую для описания спектров рождения частиц в столкновениях протонов [8]. Поведение факторов ядерной модификации для  $\omega$ - и  $K^*$ -мезонов, измеренных в данной работе, согласуется с поведением факторов ядерной модификации, полученных нами ранее для других мезонов. Указанный экспериментальный результат подтверждает факт слабой зависимости эффектов начального состояния от массы мезонов и их кваркового состава.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, грант № 12-02-31362 мол\_а.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

CONF-2013-107. 2013. P. 1-19.

4. Бердников Я.А., Иванищев Д.А., Котов Д.О., Рябов В.Г., Рябов Ю.Г., Самсонов В.М. Рождение короткоживущих нейтральных каонов в столкновениях ядер дейтерия и золота при энергии 200 ГэВ // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2011. № 3 (129). С. 134–139.

5. Бердников А.Я., Иванищев Д.А., Котов Д.О., Рябов В.Г., Рябов Ю.Г., Самсонов В.М. Рождение короткоживущих нейтральных каонов в столкновениях ядер меди при энергии 200 ГэВ // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2011. № 2 (122). С. 116–121.

6. Beringer J., Arguin J.F., Barnett R.M. et al. (Particle Data Group). Review of particle physics // Phys. Rev. D. 2012. Vol. 86. P. 010001(1-1528).

7. Бердников Я.А., Иванищев Д.А., Котов Д.О., Рябов В.Г., Рябов Ю.Г., Самсонов В.М. Рождение  $\varphi$ -мезонов в ядро-ядерных столкновениях при энергии  $\sqrt{S_{NN}} = 200 \ \Gamma$ эВ // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2008. № 6 (67). С. 74-78.

8. Бердников Я.А. Иванищев Д.А., Котов Д.О., Рябов В.Г., Рябов Ю.Г., Самсонов В.М. Дифференциальные сечения рождения  $\pi$ , K,  $\eta$ ,  $\omega$ ,  $\eta'$ ,  $\varphi$ -мезонов в p + p взаимодействиях при энергии  $\sqrt{S} = 200$  ГэВ // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2008. № 6 (67). С. 65–70.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ИВАНИЩЕВ Дмитрий Александрович** — кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории релятивистской ядерной физики отделения физики высоких энергий Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова.

188300, Россия, Ленинградская обл., г. Гатчина, Орлова роща, ФГБУ «ПИЯФ» (812) 552-75-31 ivanishchev@gmail.com

**ИВАНОВ Алексей Евгеньевич** — кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник лаборатории физики элементарных частиц отделения физики высоких энергий Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова.

188300, Россия, Ленинградская обл., г. Гатчина, Орлова роща, ФГБУ «ПИЯФ» (812) 552-75-31 ivanovae@pnpi.spb.ru

**КОТОВ** Дмитрий Олегович — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории релятивистской ядерной физики отделения физики высоких энергий Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова.

188300, Россия, Ленинградская обл., г. Гатчина, Орлова роща, ФГБУ «ПИЯФ» (812) 552-75-31 dm kotov@phmf.spbstu.ru

## Ivanishchev D.A., Ivanov A.E., Kotov D.O. $K^*$ AND $\omega$ -MESONS PRODUCTION IN d + Au COLLISIONS AT 200 GeV

Invariant transverse momentum spectra obtained for  $K^*$ - and  $\omega$ - mesons in d + Au collisions at 200 GeV have been presented. Comparison of the obtained results with existing measurements for  $\pi^0$ -,  $K_s$ -,  $\eta$ -,  $\eta'$ - and  $\varphi$ -mesons have been made. The systematic study for light mesons production in central d + Au collisions have been carried out.

NUCLEI COLLISIONS, MESONS, PRODUCTION, LIGHT QUARKS, ANALYSIS.

#### REFERENCES

1. Berdnikov Ya.A., Ivanishchev D.A., Kotov D.O., Ryabov V.G., Ryabov Yu.G., Samsonov V.M. Rozhdenie strannykh adronov v yadro-yadernykh vzaimodeystviyakh v eksperimente PHENIX na kollaydere RHIC. Yadernaya fizika i inzhiniring, 2013, Vol. 4, No. 9-10, pp. 812-817. (rus)

2. Müller B., Schukraft J., Wyslousch B. First results from Pb + Pb collisions at the LHC. Annual Review of Nuclear and Particle Science, 2012, Vol. 62, pp. 361-386.

3. Aad G., Abajyan T., Abbott B. et al. (Atlas collaboration). Transverse momentum, rapidity, and centrality dependence of inclusive charged-

particle production in  $\sqrt{S_{NN}} = 5.02$  TeV p + Pb collisions measured by the ATLAS experiment. ATLAS-CONF-2013-107, 2013, pp. 1-19. 4. Berdnikov Ya.A., Ivanishchev D.A., Kotov

4. Berdnikov Ya.A., Ivanisnchev D.A., Kotov D.O., Ryabov V.G., Ryabov Yu.G., Samsonov V.M. Rozhdenie korotkozhivushchikh neytral'nykh kaonov v stolknoveniyakh yader deyteriya i zolota pri energii 200 GeV. *St. Petersburg State Polytechnical University: Physics and Mathematics*, 2011, No. 3 (129), pp. 134-139. (rus)

5. Berdnikov A.Ya., Ivanishchev D.A., Kotov D.O., Ryabov V.G., Ryabov Yu.G., Samsonov V.M. Rozhdenie korotkozhivushchikh neytral'nykh kaonov v stolknoveniyakh yader medi pri energii 200 GeV. *St. Petersburg State Polytechnical University: Physics and Mathematics*, 2011, No. 2 (122), pp. 116-121. (rus)

6. Beringer J., Arguin J.F., Barnett R.M. et al. (Particle Data Group). Review of particle physics. *Phys. Rev. D*, 2012, Vol. 86, pp. 010001(1-1528).

7. Berdnikov Ya.A., Ivanishchev D.A., Kotov D.O., Ryabov V.G., Ryabov Yu.G., Samsonov V.M. Rozhdenie φ-mezonov v yadro-yadernykh stolkno-

veniyakh pri energii  $\sqrt{S_{NN}} = 200$  GeV. St. Petersburg State Polytechnical University: Physics and Mathematics, 2008, No. 6 (67), pp. 74-78. (rus)

8. Berdnikov Ya.A. Ivanishchev D.A., Kotov D.O., Ryabov V.G., Ryabov Yu.G., Samsonov V.M. Differentsial'nye secheniya rozhdeniya  $\pi$ , K,  $\eta$ ,  $\omega$ ,  $\eta'$ ,  $\varphi$ -mezonov v p + p vzaimodeystviyakh pri energii  $\sqrt{S} = 200$  GeV. St. Petersburg State Polytechnical University: Physics and Mathematics, 2008, No. 6 (67), pp. 65-70. (rus)

#### THE AUTHORS

#### **IVANISHCHEV Dmitry A.**

B.P. Konstantinov Petersburg Nuclear Physics Institute, 188300, Orlova Roscha, Gatchina, Russia

#### **IVANOV** Alexei E.

B.P. Konstantinov Petersburg Nuclear Physics Institute, 188300, Orlova Roscha, Gatchina, Russia

#### **KOTOV Dmitry O.**

St. Petersburg State Polytechnical University, 195251, Politekhnicheskaya Str. 29, St. Petersburg, Russia

## МАТЕМАТИКА

УДК 517.2

М.Р. Петриченко, Д.В. Серов

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

#### ПОЛНОЕ И НЕПОЛНОЕ АДДИТИВНЫЕ УДВОЕНИЯ ПЕРЕМЕННЫХ В ЛИНЕЙНЫХ СИСТЕМАХ С ПОСТОЯННЫМИ КОЭФФИЦИЕНТАМИ

Дифференциальные уравнения и их системы, не связанные ни с какой вариационной задачей, предлагается привести к гамильтоновскому виду и погрузить их решения в пучок экстремалей. Для малых импульсов удвоенная система уравнений совпадает с исходной плюс уравнения в вариациях.

Полностью или частично аддитивно удвоенная система линейных уравнений с постоянными коэффициентами имеет гамильтоновскую структуру. Для жордановых клеток матрицы коэффициентов системы полное и частичное удвоения совпадают с точностью до оператора сдвига, представимого в базисе собственных и присоединенных векторов нильпотентной матрицей.

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ; СИСТЕМА ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ; МАТРИЦА ЖОРДАНА; ПОЛНАЯ, АЛГЕБРАИЧЕСКАЯ И СПЕКТРАЛЬНАЯ КРАТНОСТИ.

\_

#### Введение

В 1987 году Ю.Г. Павленко и С.И. Зеленский предложили метод удвоения переменных [1]. Суть метода состоит в следующем. Для системы уравнений

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(t, \mathbf{x}), \ t \in T, \ \mathbf{x} \in X \subset \mathbb{R}^m,$$

$$f: (T \times X) \to \mathbb{R}^m, f \in \operatorname{Lip}^{\operatorname{loc}}(X), i = 1(1)m$$

вводится гамильтониан  $E(t, \mathbf{x}, \mathbf{y}) := (\mathbf{y}, \mathbf{f}),$ порождающий ассоциированную систему на импульс

$$\frac{dy_i}{dt} = -\sum_{j=1}^m y_j \frac{\partial f_j}{\partial x_i}, \quad i = 1(1)m.$$

Очевидно, что ассоциированная система совпадает с уравнениями в вариациях для исходной системы [2]. При этом вводится вектор

$$\mathbf{z}:=(x_1, ..., x_m, y_1, ..., y_m) \in \mathbb{R}^{2m},$$

и если  $F(t,\mathbf{z})$  — функция класса  $C^{1}(T \times X \times Y)$ , [A,B] — скобки Пуассона, то тогда можно ввести дифференциальный оператор

$$L_{v} \coloneqq \sum_{i=1}^{m} v_{i} \frac{\partial}{\partial z_{i}}$$

(производную *F* вдоль поля  $\mathbf{v} = d\mathbf{z} / dt$ ):

$$\frac{dF}{dt} = \frac{\partial F}{\partial t} + L_{v}(F) =$$
$$\frac{\partial F}{\partial t} + \sum_{i=1}^{m} v_{i} \frac{\partial F}{\partial z_{i}} = \frac{\partial F}{\partial t} + [F, E].$$

Тем самым вводится алгебра Ли, порожденная линейным дифференциальным оператором  $L_{..}$ .

Авторы статьи [1] указывают, что удвоение переменных «позволяет привести к гамильтоновой форме уравнения и системы уравнений, полученные феноменологически и не являющиеся экстремалями какойлибо вариационной задачи».

Недавно нами была опубликована работа [2], где идея аддитивного удвоения получила некоторое развитие, а именно: вместо исходной системы уравнений была рассмотрена возмущенная система

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x} + \mathbf{y}),$$

имеющая гамильтониан

$$E(t, \mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{m} \int_{0}^{y_i} f_i(t, \mathbf{x} + \mathbf{z}) dz_i$$

такой, что  $E(t, \mathbf{x}, 0) = 0.$ 

Ассоциированная система есть

$$\frac{d\mathbf{y}}{dt} = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}) - \mathbf{f}(t, \mathbf{x} + \mathbf{y})$$

Тогда очевидно, что если  $\|\mathbf{y}\| << \|\mathbf{x}\|$ ,  $\|\mathbf{\bullet}\| -$ какая-либо норма, то получается вариант исходного удвоения переменных. По описанной схеме, в частности, были рассмотрены наиболее изученные системы линейных уравнений с постоянными коэффициентами.

Использование этой схемы удвоения позволило получить следующие результаты:

а) существует пучок экстремалей  $(x_y(t))$ , локально близкий к траектории исходного уравнения (системы уравнений) (x(t)). Иначе,

$$\forall U(x_y) \subset X, \exists U(0) \subset Y \Rightarrow$$
$$\Rightarrow y \in U(0) \rightarrow x \in U(x_y),$$

где U(0) – окрестность нуля, U( $x_y$ ) – окрестность экстремалей пучка в W<sub>2</sub><sup>(1)</sup>(T) (T – промежуток или сегмент вещественной оси), X – множество векторов (x), Y – множество векторов (y).

Можно показать, что  $Y = X_{\tau} (X_{\tau} - про$ странство векторов, касательное к X);

б) плотность распределения лагранжиана  $\Lambda(t, \mathbf{x}, d\mathbf{x}/dt)$ , порожденного исходной и ассоциированной системами, определяется применением стандартного преобразования Юнга — Лежандра [3]. Например, в скалярном случае плотность лагранжиана имеет вид

$$\Lambda\left(t,x,\frac{dx}{dt}\right) = \frac{dx}{dt}\left(\varphi\left(\frac{dx}{dt}\right) - x\right) - \int_{x}^{\varphi\left(\frac{dx}{dt}\right)} f(z)dz,$$

где  $\varphi$  — распределение, обратное  $f(\varphi = f^{-1})$ .

Очевидно, что если y = 0, то  $\varphi(dx/dt) = x$ , а  $\Lambda = 0$ . Итак, с исходным дифференциальным уравнением связано условие экстремума:

$$\delta S_{\mathrm{T}}(x) \coloneqq \int_{\mathrm{T}} \delta \Lambda\left(t, x, \frac{dx}{dt}\right) dt$$

Экстремали  $S_{T}(x)$  совпадают с графиком (T, x(t)) исходного уравнения при y(0) = 0, y(t) = 0,  $t \in T$ . В первоначальном варианте теории, представленной в работе [1], га-

мильтониан вырожден,  $\Lambda = 0$  (тождественно) и никакого условия экстремума не существует. Видим, что аддитивное удвоение переменных не только дополняет исходную систему до гамильтоновой, но и позволяет явно сформулировать условие экстремума;

в) пусть f — аналитическое распределение в окрестности

$$x + y \in U(x_0) \subset X:$$
  
$$f(x + y) = \exp\left(y\frac{d}{dx}\right)f(x) = f(x) + yf(x) + \dots$$

Тогда, пренебрегая членами O(y), получаем удвоение, описанное в работе [1], с вырожденным гамильтонианом. Если же сохранить линейное по *y* слагаемое в степенном ряду и пренебречь слагаемыми  $O(y^2)$ , то

$$S_{\mathrm{T}}(x) \coloneqq \int_{\mathrm{T}} \frac{\left(\dot{x} - f(t, x)\right)^2}{f'(x)} dt$$

и решение задачи на экстремум  $S_{T}(x)$  равносильно решению исходной системы по методу наименьших квадратов с весовым множителем 1/f'(x).

#### Некоторые замечания по терминологии

Согласно результатам работы [2], в исходной системе координата складывается с импульсом, что позволяет естественно использовать каноническое преобразование от координат к импульсам [3].

Рассмотрим любую линейную комбинацию координат и импульсов, например  $x + \lambda y$  с параметром  $\lambda$ . Такая постановка интересна в задачах несингулярного возмущения. Влияние указанного параметра регламентировано известными теоремами о зависимости решения от параметра. Очевидно, что на гамильтонову структуру удвоенной системы параметр  $\lambda$  совершенно не влияет.

Далее, в аддитивном удвоении различается полное и частичное удвоение переменных. Например, в линейной системе

$$\dot{x} = ax + b$$

с матрицами a и b удвоение можно вести по всем компонентам вектора x (полное удвоение) либо только по компоненте строки (частичное удвоение). Вышеизложенное относится и к системам с параметром. В обоих случаях аддитивно удвоенная система остается гамильтоновой. Очевидно, что для матриц скалярного типа полное и частичное удвоения совпадают.

Наряду с приведенным выше аддитивным удвоением переменных можно рассмотреть мультипликативное удвоение в различных вариантах, например в таких:

$$\dot{x} = yf(x), \ \dot{x} = f(yx).$$

Пусть f — линейный оператор, представимый матрицей a и вектором сдвига b. Тогда в исходной системе уравнений  $\dot{x} = ax + b$  мультипликативное удвоение переменных принимает следующий вид:

$$\dot{x}_i = y_i \sum_{j=1}^m a_{ij} x_j + b_i, \ i = 1(1)m, \ m = \dim(x).$$

В тензорной нотации:

пусть  $y = \text{diag}(y_i)_{i=1}^m$ , тогда мультипликативное удвоение при левой мультипликации приводит к такой системе для координат вектора *x*:

$$\dot{x} = yax + b,$$

где  $(ax)_i = a_{ij}x_j$  — вектор-столбец;  $(yax)_i = y_i \delta_{ik} a_{kj} x_j$ , причем суммирование ведется по значкам k и j, i = 1(1)m.

При правой мультипликации получается такая система дифференциальных уравнений:

$$\dot{x} = (ax)^t y + b,$$

где  $(ax)^t$  — матрица-строка.

При y = I (I — матричная единица) мультиплицированное уравнение совпадает с исходным.

## Аддитивное удвоение в линейных системах с постоянными коэффициентами

**Общий случай.** Дана задача Коши для системы с постоянными коэффициентами:

$$\frac{dx}{dt} = ax + b, x(0) - x_0 = 0.$$
(1)

Для каноничности системы (1) необходимо и достаточно, чтобы Sp(a) = 0. В общем случае это не так и след матрицы коэффициентов может быть отделен от нуля.

Пусть выполняется процедура полного

аддитивного удвоения переменных. В этом случае *у*-градиент гамильтониана определяется как

$$\frac{\partial E}{\partial y_i} = a_{ij}(x_j + y_j) + b_i, i = 1(1)m,$$

где  $m = \dim(x, b)$ . Тогла

$$E(x, y) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} a_{ii} y_i^2 + \sum_{i,j=1}^{m} y_i a_{ij} x_j + \sum_{i,j=1}^{m} y_i a_{ij} y_j =$$
$$= \frac{1}{2} \|y\|_a^2 + \langle y, ax \rangle + \langle y, ay \rangle',$$

при этом штрих у суммы означает, что  $i \neq j$ .

Удвоенная система уравнений имеет вид

$$\begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} + b,$$

где матрица *α* – блочная,

$$\alpha = \begin{pmatrix} a & a + a^t - \operatorname{diag} a \\ 0 & -a^t \end{pmatrix}.$$

Ясно, что Sp( $\alpha$ ) = 0 и удвоенная система – действительно, каноническая (гамильтова) в целом и по каждой паре компонент  $x_i$ ,  $y_i$ . Роль энергии системы играет E(x, y).

Пусть  $y(0) = y_0$ . Если  $y_0 \neq 0$ , то очевидно, что  $y(t) \neq 0$ . Тогда решение удвоенной системы совпадает с экстремалью в окрестности  $U(y_0)$  вектора  $y_0$ . Траектория  $x_y(t) = x(t, y)$  удвоенной системы есть проекция экстремали пучка на множество (x(t, y)) траекторий исходной системы. При  $y_0 \to 0$  экстремаль  $x(t, y) \to x(t)$  равномерно по  $y \in U(y_0)$ . Здесь x(t) — решение исходной системы.

Например, пусть у мало. Тогда удвоенная система в качестве ассоциированного уравнения на импульс (y(t)) имеет как уравнение в вариациях, так и (вырожденный) гамильтониан E(x, y) = yf(x), не связанный ни с каким экстремальным условием [3 - 6]. Следовательно, аддитивное удвоение реализует сдвиг множества исходных траекторий (x(t)) на множество экстремалей (x(t, y)).

Процедура частичного аддитивного удвоения приводит к системе

$$\begin{cases} \dot{x}_{i} = a_{ii}(x_{i} + y_{i}) + \sum_{j \neq i} a_{ij}x_{j} + b_{i}; \\ \dot{y}_{i} = -a_{ii}y_{i}, i = 1(1)m, \end{cases}$$

имеющей гамильтониан

$$E(x, y) = \langle b, y \rangle + \langle y, ax \rangle + \frac{1}{2a} ||y||_a^2.$$

Тогда матрица коэффициентов удвоенной системы

$$\alpha = \begin{pmatrix} \operatorname{diag} a & \operatorname{diag} a \\ 0 & -\operatorname{diag} a \end{pmatrix}$$

причем  $Sp(\alpha) = 0$ .

Утверждение о погружении траекторий удвоенной системы в пучок экстремалей остается в силе [7, 8].

**Жорданова клетка.** Пусть p — неособая матрица  $m \times m$  и  $a = p^{-1}jp$ , где j — матрица Жордана. Такое преобразование единственно с точностью до эквивалентности матриц. Исходная система принимает вид

$$\dot{x} = p^{-1}jpx + b.$$

Если обозначить X := px, B := pb, то исходное уравнение принимает вид

$$\dot{X} = jX + B.$$

Возможны два случая:

существует собственный базис в X, тогда  $j = \text{diag}(\lambda_i)_{i=1(1)m}$ , причем среди характеристических чисел могут быть и равные;

не существует собственного базиса.

В последнем случае базис дополняется до полного присоединенными векторами. Пусть, не нарушая общности, в этом случае матрица *j* сводится к одной клетке Жордана. Тогда справедливы утверждения:

1) Спектральная кратность характеристического числа  $\lambda$ , dimKer $(a - \lambda I) = 1$ ;

2) Полная кратность характеристического числа  $\lambda$ , dimKer $(a - \lambda I)^{m(\lambda)} = m$  и совпадает с алгебраической кратностью характеристического числа  $\lambda$ . Другими словами, минимальный и аннулирующий полиномы матрицы *a* совпадают, и матрица *j* сводится к одной (максимальной) клетке Жордана:  $m(\lambda) = m$  [9, 10].

Скалярный случай является тривиальным: полное и частичное аддитивные удвоения тождественны, а матрица удвоенной системы есть

$$\alpha = \begin{pmatrix} a, & 0 \\ 0, -a \end{pmatrix}.$$

Если существуют присоединенные векторы, то исходная система уравнений принимает вид

$$\dot{X}_i = \lambda X_i + X_{i+1} + B_i \ i = 1(1)m - 1;$$
  
$$\dot{X}_m = \lambda X_m + B_m.$$

Полное аддитивное удвоение порождается гамильтонианом E(X, Y) таким, что

$$\begin{cases} \lambda(X_i + Y_i) + X_{i+1} + Y_{i+1} + B_i = \frac{\partial E}{\partial Y_i}, \\ i = 1(1)m - 1; \\ \lambda(X_m + Y_m) + B_m = \frac{\partial E}{\partial Y_m}, \end{cases}$$

откуда получается следующее выражение для гамильтониана:

$$E(X,Y) = \frac{\lambda}{2} \sum_{i=1}^{m} Y_i^2 + \lambda \sum_{i=1}^{m} X_i Y_i + \sum_{i=1}^{m-1} (X_{i+1}Y_i + Y_{i+1}Y_i) + \sum_{i=1}^{m} B_i Y_i,$$

ИЛИ

$$egin{aligned} E(X,Y) &= rac{\lambda}{2} \left\|Y
ight\|^2 + \lambda \left\langle X,Y
ight
angle + \left\langle au(X+Y),Y
ight
angle + \left\langle egin{aligned} B,Y
ight
angle, \end{aligned}$$

где  $\tau$  — нильпотентный (порядка *m*) оператор сдвига, такой, что  $\tau^m = 0$ ,  $\tau^{m-1} \neq 0$ .

Следовательно, удвоенная система уравнений имеет вид

$$\begin{cases} \dot{X}_{i} = \lambda(X_{i} + Y_{i}) + X_{i+1} + Y_{i+1} + B_{i}, \\ i = 1(1)m - 1; \ \dot{X}_{m} = \lambda(X_{m} + Y_{m}) + B_{m}; \\ \dot{Y}_{1} = -\lambda Y_{1i}; \ \dot{Y}_{i} = -\lambda Y_{i} - Y_{i-1}, \ i = 2(1)m. \end{cases}$$

Матрица коэффициентов удвоенной системы имеет вид

$$\begin{pmatrix} \dot{X} \\ \dot{Y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j, & j+j^t - \operatorname{diag} j \\ 0, & -j^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} + \operatorname{colon} \begin{pmatrix} B \\ 0 \end{pmatrix}.$$

При неполном аддитивном удвоении энергия системы определяется тождествами:

$$\begin{cases} \frac{\partial E}{\partial Y_i} = \lambda(X_i + Y_i) + X_{i+1} + B_i, & i = 1(1)m - 1; \\ \frac{\partial E}{\partial Y_m} = \lambda(X_m + Y_m) + B_m. \end{cases}$$

121

Следовательно,

. . .

$$E(X,Y) = \frac{\lambda}{2} \|Y\|^{2} + \lambda \langle X,Y \rangle + \langle \tau X,Y \rangle + \langle B,Y \rangle$$

и удвоенная система остается по-прежнему блочной:

$$\begin{pmatrix} X\\ \dot{Y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j, \operatorname{diag} j\\ 0, -j^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X\\ Y \end{pmatrix} + \operatorname{colon} \begin{pmatrix} B\\ 0 \end{pmatrix}.$$

Итак, в результате проведенного анализа можно утверждать следующее: 1. Полностью или частично аддитивно удвоенная система линейных уравнений с постоянными коэффициентами имеет гамильтонову структуру. Это означает, что след матрицы  $Sp(\alpha)$  коэффициентов  $\alpha$  удвоенной системы всегда равен нулю.

2. Для жордановых клеток матрицы коэффициентов системы полное и частичное удвоения совпадают с точностью до оператора сдвига, представимого в базисе собственных и присоединенных векторов нильпотентной матрицей.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Павленко Ю.Г., Зеленский С.И. Интегрирование негамильтоновых систем методом удвоения переменных // Вестник МГУ. Серия 3. Физика. Астрономия. 1987. Т. 28. № 1. С. 8–12.

2. Петриченко М.Р., Серов Д.В. Удвоение переменных в уравнениях и системах обыкновенных дифференциальных уравнений // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2012. № 4 (158). С. 120–125.

3. **Тер Хаар Д.** Основы гамильтоновой механики. М.: Наука. 1974. 224 с.

4. **Переломов А.М.** Интегрируемые системы классической механики и алгебры Ли. М.: Наука. 1990. 240 с. 5. Козлов В.В. Интентегрируемость и неинтегрируемость в гамильтоновой механике // Успехи математических наук. 1983. Т. 38. № 1. С. 1–27.

6. **Souriau J.-M.** Structure des systems dynamiques. Paris: Duno, 1980. 232 p.

7. Weinstein A. Geometrie simplectique at contact. Paris: Hermann, 1984, 140 p.

8. Gromov M. Travaux en cours 33. Paris: Hermann, 1988. P. 61–241.

9. Lelong-Ferran J. Notions matematiques de base. Paris: Armand Colin, 1989. 310 p.

10. Глазман И.М., Любич Ю.И. Конечномерный линейный анализ. М.: Наука. 1968. 476 с.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ПЕТРИЧЕНКО Михаил Романович** – доктор технических наук, профессор кафедры гидравлики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. 195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 fonpetrich@mail.ru

**СЕРОВ Дмитрий Владимирович** — старший преподаватель кафедры высшей математики Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 dimusum@yandex.ru

## *Petrichenko M.R., Serov D.V.* COMPLETE AND INCOMPLETE ADDITIVE DOUBLING VARIABLES IN LINEAR SYSTEMS WITH CONSTANT COEFFICIENTS.

Differential equations and their systems, not associated with any of the variational problems have been put forward to transform up to Hamiltonian form and immerse their solutions into a bundle of extremities. For small momenta the doubled system of the equations corresponds closely with the original one but for the equations in variations.

Totally or partly additive doubled system of linear equations with constant coefficients has a Hamilton structure. For Jordan cells in the matrix of coefficients of the system complete and partial doubling correspond closely, with an accuracy up to a shift operator, which is representable in the basis of its own and associated vectors of a nilpotent matrix.

DIFFERENTIAL EQUATION, SYSTEM OF DIFFERENTIAL EQUATIONS, JORDAN MATRIX, COMPLETE, ALGEBRAIC AND SPECTRAL MULTIPLICITY.

#### REFERENCES

1. Pavlenko G.G., Zelensky S.I. Integration of the non-Hamiltonian systems by the method of doubling of variables. *Announcer Moskow State Un., series of Physics, Astronomy*, 1987, Vol. 28, No. 1, pp. 1-25.

2. Petrichenko M.R., Serov D.V. Doubling the variables in equations and systems of ordinary differential equations. *St. Petersburg State Polytechnical University Journal : Physics and mathematics*, 2012, No. 4(158), pp. 120-125. (rus).

3. Ter Haar D. Elements of Hamiltonian mechanics. London, Pergamon Press, 1971, 196 p.

4. **Perelomov A.M.** Integrable systems in classical mechanics and Lie's algebra. Moscow, Nauka, 1990, 240 p.

5. **Kozlov V.V.** Integrable and non-integrable in Hamiltonian mechanic. UMN, 1983, Vol. 38, No. 1, pp. 1-27.

6. **Souriau, J.-M.** Structure des systems dynamiques. Paris, Duno, 1980, 232 p.

7. Weinstein, A. Geometrie Simplectique at Contact. Paris, Hermann, 1984, 140 p.

8. Gromov, M. Travaux en cours 33. Paris, Hermann, 1988, pp. 61-241.

9. Lelong-Ferran, J. Notions matematiques de base, Paris, Armand Colin, 1989, 310 p.

10. **Glazman I.M., Luibich G.I.** Linear analysis in finite-dimensional spaces. Moscow, Nauka, 1968, 476 p.

#### THE AUTHORS

#### PETRITCHENKO Mikhail R.

St. Petersburg State Polytechnical University, 195251, Politechnicheskaya Str. 29, St. Petersburg, Russia fonpetrich@mail.ru

#### **SEROV Dmitry V.**

St. Petersburg State Polytechnical University, 195251, Politechnicheskaya Str. 29, St. Petersburg, Russia. dimusum@yandex.ru УДК 517.968.22

А.В. Кондрашков<sup>1</sup>, Ю.А. Пичугин<sup>2</sup>

<sup>7</sup> Санкт-Петербургский государственный экономический университет <sup>2</sup> Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена

#### ИДЕНТИФИКАЦИЯ И СТАТИСТИЧЕСКАЯ ПРОВЕРКА УСТОЙЧИВОСТИ МОДЕЛИ ВОЛЬТЕРРЫ

В статье рассматриваются некоторые аспекты модели Вольтерры. Основное внимание уделяется определению области устойчивости в пространстве параметров модели и статистической проверке устойчивости. МОДЕЛЬ ВОЛЬТЕРРЫ, ИДЕНТИФИКАЦИЯ, УСТОЙЧИВОСТЬ, СТАТИСТИЧЕСКАЯ ПРОВЕРКА.

#### Введение

В задаче прогнозирования того или иного процесса (экономического, социального, биологического и т. п.) единственным источником фактической информации служат данные наблюдений, представимые в виде таблиц чисел. Здесь прослеживается связь с задачами анализа экспериментальных данных. Чтобы преодолеть ситуацию «черного ящика», в ряде случаев бывает целесообразно выбрать какую-нибудь известную математическую модель в качестве отправного пункта поиска подходящей модели, требуемой для интерпретации наблюдаемых данных. Например, в теории экономических циклов имеется динамическая модель Гудвина [1] на основе системы Лотки -Вольтерры [2], связывающая пару величин. Однако модель такого вида является слишком «жесткой», поскольку демонстрирует единственный сценарий (замкнутые траектории). Простое продолжение на основе общей системы Вольтерры ведет к более вариативной модели [3]. При этом важная величина, характеризующая эластичность в паре переменных, остается в пределах класса дробно-линейных выражений. Здесь следует подчеркнуть, что выбор типа модели всегда является прерогативой предметного исследователя и не требует особых усилий в плане обоснования, так как ошибка выбора непременно приводит к ситуации, когда дисперсии оценок параметров относительно велики, а сами оценки параметров не проходят статистического тестирования, что означает отклонение модели.

В процессе реализации выбранного типа модели возникает весьма обширный круг задач. Однако ниже мы ограничимся рассмотрением лишь следующих этапов: оценка параметров модели; определение (в пространстве параметров) области устойчивости точного решения; статистическая проверка принадлежности параметров области устойчивости. Остальные вопросы предполагается рассмотреть в дальнейших публикациях.

#### Постановка задачи

Предположим, что для пары неких предметных величин *x* и *y* требуется выяснить функциональную зависимость между ними на основании исходных данных, представимых в виде пары временных рядов наблюдений  $\xi$  и  $\eta$ . Пусть известно, что данные наблюдений имеют шаг  $\delta$  по шкале времени *t* на промежутке  $t_0 = 0 \le t \le t_m$ . Временные ряды  $\xi = (\xi_i)$  и  $\eta = (\eta_i)$  можно рассматривать как сеточные функции на равномерной сетке

$$\omega_{\delta} \coloneqq \{t_i = i\delta : i = 0, m\}.$$

При дальнейшей обработке данных нам понадобятся следующие числовые характеристики:

$$\overline{\xi} \coloneqq (1 / m) \sum_{i=1}^{m} \xi_i; \quad \overline{\eta} \coloneqq (1 / m) \sum_{i=1}^{m} \eta_i;$$
$$\operatorname{cov}(\xi, \eta) \coloneqq (1 / m) \sum_{i=1}^{m} (\xi_i - \overline{\xi})(\eta_i - \overline{\eta}).$$

С целью обнаружения и обоснования функциональной зависимости широко

применяют методы регрессионного анализа. Традиционные подходы связаны с поиском уравнений регрессии на основе явных форм:

$$y = Y(x; \zeta)$$
 или  $x = X(y; \zeta'),$ 

где  $\zeta$ ,  $\zeta'$  — списки определяемых параметров.

Между тем в каких-то случаях путь рассеяния данных может свидетельствовать в пользу выбора неявной формы:

$$\Phi(x,y;\zeta)=0.$$

Обобщенный подход связан с описанием на основе параметризации. С этой точки зрения графиком искомой функциональной зависимости будет некая геометрическая кривая, представимая как множество всех эквивалентных путей

$$\{p \mapsto (\tilde{x}(p), \tilde{y}(p))\},\$$

параметризующих эту кривую.

Достаточно гладкая общая кривая, заданная уравнением h(x, y) = 0, допускает параметризацию с помощью решения задачи Коши для «почти гамильтоновой» системы вида

$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = -a(x, y)\frac{\partial h}{\partial y}(x, y);\\ \frac{dy}{dt} = -a(x, y)\frac{\partial h}{\partial x}(x, y). \end{cases}$$

Начальные условия при *t* = 0 имеют вид:

$$x(0) = x_0, y(0) = y_0; h(x_0, y_0) = 0.$$

С другой стороны, параметризованная кривая, заданная уравнениями  $(x, y) = (\tilde{x}(t), \tilde{y}(t))$ , имеет представление в виде локально конечного объединения общих кривых, уравнения которых могут быть получены путем исключения параметра *t* из параметрических уравнений.

Отдельно взятый путь

$$t \mapsto (x(t), y(t)),$$

где t — параметр времени, может служить описанием процесса [4, 5].

#### Динамическая модель процесса

Пусть через t обозначено время. Пусть

гладкий путь (x(t), y(t)) служит изображением наблюдаемого процесса. Тогда можно принять динамическую модель (с непрерывной шкалой времени) на основе системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ):

$$\begin{cases} \dot{x} = F_1(x, y); \\ \dot{y} = F_2(x, y), \end{cases}$$
(1)

где  $\mathbf{F} = (F_1, F_2) -$ гладкое векторное поле.

Как было отмечено выше, выбор выражений  $F_1$  и  $F_2$  остается за предметным исследователем в соответствии с предпочтениями предметной области. Например, нередко авторы работ по математическому моделированию экономических процессов [4] идут по пути заимствования подходящих динамических моделей из биологии. Фактически эти заимствования с учетом тех или иных традиционных предположений [1] определяют общий вид ожидаемых динамических систем.

Положения равновесия (они же – стационарные точки) определяются как решения векторного уравнения F(x, y) = 0.

Изоклина векторного поля F — это полезная линия, вдоль которой выполняется условие вида

$$\left\langle \vec{F} \left| \vec{v} \right\rangle = 0, \right.$$

т. е.  $\vec{F} \perp \vec{v}$  при  $\vec{F} \neq 0$ , где  $\vec{v} \neq 0$  — фиксированный вектор.

Ниже используются *h*-изоклины («горизонтальные», когда  $F_2 = 0$ ) и *v*-изоклины («вертикальные», когда  $F_1 = 0$ ).

Фактически любая стационарная точка системы ОДУ (1) реализуется как точка пересечения *v*-изоклины и *h*-изоклины.

Специфика динамической модели. При моделировании процессов в ряде предметных областей (к числу которых относятся экономика, социология, биология, химия, и т. п.) встречаются неотрицательные предметные величины, которые могут принимать только неотрицательные значения. Предполагается, что x > 0 и y > 0 — именно такие величины. Тогда можно несколько уточнить общий вид уравнений динамической системы (1), чтобы автоматически иметь описание в положительном конусе:

$$\mathbf{R}_{+}^{2} := \{(x, y) : x > 0, y > 0\}.$$

С этой целью достаточно принять

$$\dot{x} = x f_1(x, y), \quad \dot{y} = y f_2(x, y).$$
 (2)

Заметим, что сделанный выбор соответствует специфике популяционной динамики по Колмогорову [3].

На основании данной динамической модели можно написать ОДУ:

$$\frac{x}{y}\frac{dy}{dx} = \frac{f_1(x,y)}{f_2(x,y)}.$$

Выражение левой части этого уравнения обычно называют эластичностью. Таким образом, эластичность выражается формулой:

$$\ni (x, y) = \frac{f_2(x, y)}{f_1(x, y)}.$$

Идентификация модели. Ниже используется описание в положительном конусе  $\mathbf{R}_{+}^2$ . В таком случае динамическая модель (2) приобретает следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{\dot{x}}{x} = f_1(x, y); \\ \frac{\dot{y}}{y} = f_2(x, y). \end{cases}$$

Очередной этап сводится к нахождению правых частей этих дифференциальных уравнений по имеющимся наблюдаемым данным, заданным в виде пары временных рядов ξ и η.

При отсутствии каких-либо иных соображений можно предположить, что предметный исследователь сделал выбор, приняв решение о поиске  $f_1(x, y)$  и  $f_2(x, y)$  в виде многочленов от (x, y) степени  $\leq k$ .

В линейном случае (k = 1) порядок действий состоит в следующем. Наряду с имеющимися наблюдаемыми временными рядами  $\xi$  и  $\eta$  можно ввести для величин  $\dot{x} / x$ и  $\dot{y} / y$  вычисляемые временные ряды  $\varphi = (\varphi_i)$  и  $\psi = (\psi_i)$ :

$$\varphi \coloneqq \frac{\xi_{\bar{t}}}{\xi}; \quad \psi \coloneqq \frac{\eta_{\bar{t}}}{\eta}$$

Временные ряды  $\xi$  и  $\eta$  рассматриваются как сеточные функции, так что  $\xi_i$  и  $\eta_i$  — это стандартные обозначения разностных про-изводных:

$$(\xi_{\overline{i}})_i = rac{\xi_i - \xi_{i-1}}{\delta}; \ (\eta_{\overline{i}})_i = rac{\eta_i - \eta_{i-1}}{\delta}.$$

Далее, с целью определения коэффициентов многочленов правой части можно применить метод наименьших квадратов (МНК) по схеме «2 × 3». В результате получим дифференциальные равенства вида:

$$\frac{\dot{x}}{x} = \alpha_1 + \beta_{11}x + \beta_{12}y; \quad \frac{\dot{y}}{y} = \alpha_2 + \beta_{21}x + \beta_{22}y. \quad (3)$$

Для определения двух троек чисел ( $\alpha_1$ ,  $\beta_{11}$ ,  $\beta_{12}$ ) и ( $\alpha_2$ ,  $\beta_{21}$ ,  $\beta_{22}$ ) стандартные оценки по методу МНК в матричной форме имеют вид:

$$B = DC^{-1}; \ (\alpha_1, \alpha_2)^T = (\overline{\phi}, \overline{\psi})^T - B(\overline{\phi}, \overline{\psi})^T. \ (4)$$

С использованием сокращенных обозначений ( $c_{\xi\eta} := \text{cov}(\xi, \eta)$ ) матрицы в (4) вводятся следующим образом:

$$\begin{split} \boldsymbol{B} \coloneqq \begin{pmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{21} & \beta_{22} \end{pmatrix}; \quad \boldsymbol{C} \coloneqq \begin{pmatrix} \boldsymbol{c}_{\xi\xi} & \boldsymbol{c}_{\xi\eta} \\ \boldsymbol{c}_{\eta\xi} & \boldsymbol{c}_{\eta\eta} \end{pmatrix}; \\ \boldsymbol{D} \coloneqq \begin{pmatrix} \boldsymbol{c}_{\varphi\xi} & \boldsymbol{c}_{\varphi\eta} \\ \boldsymbol{c}_{\psi\xi} & \boldsymbol{c}_{\psi\eta} \end{pmatrix}. \end{split}$$

В итоге соотношения (3) могут быть записаны в виде системы ОДУ:

$$\begin{cases} \dot{x} = x(\alpha_1 + \beta_{11}x + \beta_{12}y); \\ \dot{y} = y(\alpha_2 + \beta_{21}x + \beta_{22}y). \end{cases}$$
(5)

Важно отметить, что в популяционной динамике система ОДУ такого вида известна как общая система Вольтерры (ОСВ).

Выбранная динамическая модель (5) характеризуется дробно-линейной эластичностью:

$$\mathfrak{s}(x,y) = \frac{\alpha_2 + \beta_{21}x + \beta_{22}y}{\alpha_1 + \beta_{11}x + \beta_{12}y}.$$

Расширенная матрица параметров может быть записана следующим образом:

$$\overline{B} := \begin{pmatrix} \beta_{10} \coloneqq \alpha_1 & \beta_{11} & \beta_{12} \\ \beta_{20} \coloneqq \alpha_2 & \beta_{21} & \beta_{22} \end{pmatrix}$$

Вычеркивая столбцы этой матрицы, вычисляем миноры второго порядка:

$$d_0 := \det B = \beta_{11}\beta_{22} - \beta_{12}\beta_{21};$$
  
$$d_1 := \alpha_1\beta_{22} - \alpha_2\beta_{12}, \quad d_2 := \alpha_1\beta_{21} - \alpha_2\beta_{11}.$$

Полученная динамическая модель изображается «точкой» в пространстве матриц  $\overline{B}$  размера 2 × 3. Равенства (4) позволяют перейти к укороченному описанию, так что модель процесса однозначно определяется квадратной матрицей *B* размера 2 × 2.

Чтобы развернуть процесс во времени, следует найти решение (x(t), y(t)) задачи Коши для системы ОДУ (5) при t > 0 с использованием начальных условий:

$$x(0) = \xi_0, \quad y(0) = \eta_0.$$
 (6)

### Влияние матрицы параметров модели на характер процесса

Положения равновесия и изоклины. По итогам проделанной идентификации векторное поле **F** приобретает компоненты:

$$F_1 \coloneqq x(\alpha_1 + \beta_{11}x + \beta_{12}y);$$
  

$$F_2 \coloneqq y(\alpha_2 + \beta_{21}x + \beta_{22}y).$$

Для более наглядного представления положений равновесия можно выделить полезные линии:

*v*-изоклины *Oy* и  $L_1: \alpha_1 + \beta_{11}x + \beta_{12}y = 0;$ 

*h*-изоклины Ox и  $L_2: \alpha_2 + \beta_{21}x + \beta_{22}y = 0$ . Тривиальные стационарные точки расположены на координатных осях Ox и Oy:

$$P_0 := (0,0); \ P_1 := (x_1,0) \in L_1 \cap Ox;$$
  
 $P_2 := (0, y_2) \in L_2 \cap Oy.$ 

По умолчанию подразумевается, что  $L_1 \neq Ox$  и  $L_2 \neq Oy$ . Условия реализации точек  $P_1$  или  $P_2$ :

если  $\beta_{11} \neq 0$ , то  $L_1 \cap Ox = \{P_1\}$  и  $x_1 = -\alpha_1 / \beta_{11};$ 

 $x_1 = -\alpha_1 / \beta_{11};$ если  $\beta_{22} \neq 0$ , то  $L_2 \cap Oy = \{P_2\}$  и  $y_2 = -\alpha_2 / \beta_{22}.$ 

Нетривиальная стационарная точка

$$P_* \coloneqq (x_*, y_*) \in L_1 \cap L_2$$

определяется в случае  $L_1 \neq L_2$  как решение системы линейных уравнений:

$$\begin{cases} \alpha_1 + \beta_{11} x_* + \beta_{12} y_* = 0; \\ \alpha_2 + \beta_{21} x_* + \beta_{22} y_* = 0. \end{cases}$$
(7)

Условие реализации точки  $P_*$  (существование и единственность) состоит в невырожденности матрицы B:

$$L_1 \cap L_2 = \{P_*\} \Leftrightarrow \det B \neq 0.$$

По формулам Крамера имеем:

 $d_0 x_* = -d_1, \ d_0 y_* = d_2.$ 

Процесс и его модель называются невырожденными, если det  $B \neq 0$ . В настоящей работе не обсуждаются иные возможности, ведущие к возникновению стационарных решений.

Центрированные процессы. Процесс и его модель называется центрированными, если  $L_1 \cap L_2 = \{P_*\}$  и  $P_* \in \mathbb{R}^2_+$  (точка  $P_*$  является внутренней точкой положительного конуса.)

Условие реализации центрированного процесса:

$$d_1d_0 < 0, \ d_2d_0 > 0.$$

**Остальные процессы.** Нецентрированные случаи появляются всякий раз, когда имеет место одно из двух условий:

либо (1) det  $B \neq 0$ , но  $P_* \notin \mathbb{R}^2_+$ ;

либо (2) det B = 0.

Генезис модели Вольтерры. Невырожденная модель M с матрицей *B* ведет свое происхождение от некой невырожденной модели M<sub>0</sub> с матрицей  $B_0$ , если их матрицы принадлежат связной открытой области  $\Theta$  пространства матриц 2 × 2, а соответствующие стационарные точки ( $P_*$  и  $P_{0,*}$ ) принадлежат заранее заданному выпуклому открытому конусу K на плоскости переменных (x, y). При этом в области  $\Theta$  не должно быть вырожденных матриц. При рассмотрении центрированных моделей следует принять K :=  $\mathbf{R}_+^2$ .

Пусть  $M_0$  — это какая-либо известная модель (например, имеющая уникальное наименование и зафиксированная в литературных источниках). Если область  $\Theta$  — максимальная среди всех, отвечающих указанным требованиям, то такая область  $\Theta$  интерпретируется как клан модели  $M_0$ .

Расслоение пространства параметров модели. Этот подход способствует визуализации и позволяет выявить детально структуру границы того или иного клана.

Сначала введем структурированное арифметическое пространство  $\mathbf{R}_{B}^{4}$  как пространство всех квадратных матриц *B* размера 2 × 2. Возьмем за основу «перекрестное» представление:

$$\mathbf{R}_B^4 \cong \mathbf{R}_{11,22}^2 \times \mathbf{R}_{12,21}^2$$

где  $\mathbf{R}_{11,22}^2$  и  $\mathbf{R}_{12,21}^2$  состоят из пар  $p = (\beta_{11}, \beta_{22})$ и  $q = (\beta_{12}, \beta_{21}).$ 

Тем самым мы можем рассматривать  $\mathbf{R}_{B}^{4}$  как объединение всех слоев

$$\Sigma_q := \mathbf{R}_{11,22}^2 \times \{q\}.$$

В силу данного расслоения пространства  $\mathbf{R}_{B}^{4}$  возникает расслоение какой-либо области *U* в виде семейства слоев

$$U_a \coloneqq U \cap \Sigma_a (q \in \operatorname{pr} U),$$

где ргU — это проекция U в пространстве  $\mathbf{R}_{12,21}^2$ .

При этом возникает сопутствующая задача: требуется определить край  $\partial U_q$  каждого слоя  $U_a$  при всех  $q \in \text{pr } U$ .

Область U и ее граница  $\partial U$  могут быть восстановлены путем объединения всех слоев области U.

Две области центрированных моделей. В случае невырожденной модели из сравнения формул (4) и (7) находим:

$$(x_*, y_*)^T = (\overline{\xi}, \overline{\eta})^T - B^{-1}(\overline{\phi}, \overline{\psi})^T;$$
$$x_* = \overline{\xi} - \frac{\beta_{22}\overline{\phi} - \beta_{12}\overline{\psi}}{\det B}; \quad y_* = \overline{\eta} - \frac{\beta_{11}\overline{\psi} - \beta_{21}\overline{\phi}}{\det B}.$$

Чтобы несколько упростить дальнейшие выкладки, введем многочлены второго порядка от  $\beta_{ij}$ :

$$u_* = \overline{\xi} \det B - (\beta_{22}\overline{\phi} - \beta_{12}\overline{\psi});$$
  
$$v_* = \overline{\eta} \det B - (\beta_{11}\overline{\psi} - \beta_{21}\overline{\phi}).$$

Модель с матрицей *В* реализуется как центрированная, если (и только если) выполняется один из двух вариантов условий:

1) когда det 
$$B > 0$$
 и min $(u_*, v_*) > 0$ ;

2) когда det B < 0 и max $(u_*, v_*) < 0$ .

Пусть область U' пространства  $\mathbf{R}_B^4$  определяется условиями варианта 1. Ее граница  $\partial U'$  может быть составлена из кусков трех алгебраических гиперповерхностей второго порядка:

det 
$$B = 0; u_* = 0, v_* = 0.$$

Если же придерживаться расслоения, то в проекции на пространство  $\mathbf{R}_{11,22}^2$  край

 $\partial U'_{q}$  произвольно взятого слоя  $U'_{q}$  формируется из кусков ветвей трех гипербол:

det 
$$B = 0; u_* = 0; v_* = 0$$

Особую роль играют места соединения разных кусков границы. В частности, чтобы определить точки пересечения гиперповерхностей  $u_* = 0$  и  $v_* = 0$ , можно составить систему:

$$\begin{cases} \overline{\xi} \det B + \beta_{12}\overline{\psi} = \beta_{22}\overline{\phi}; \\ \overline{\eta} \det B + \beta_{21}\overline{\phi} = \beta_{11}\overline{\psi}. \end{cases}$$

Как следствие этой системы выводится уравнение сборки границы:

$$\det(B)(\overline{\xi\eta}\det B+\beta_{12}\overline{\psi\eta}+\beta_{21}\overline{\varphi\xi}-\overline{\varphi\psi})=0.$$

В дальнейшем выражение

$$\chi \coloneqq \frac{\beta_{12}\overline{\psi\eta} + \beta_{21}\overline{\phi\xi} - \overline{\phi\psi}}{\overline{\xi\eta}}$$

рассматривается как характеристика сборки границы (из кусков).

Все эти рассуждения переносятся без изменений на случай другой области U'', определяемой по варианту 2.

Рамочные условия. Дальнейшие выкладки будут правомерны, если исходные временные ряды  $\xi$  и  $\eta$  отвечают определенным требованиям.

Чтобы обеспечить специфику, по умолчанию подразумевается, что указанные временные ряды — положительные:  $\xi_i > 0$ и  $\eta_i > 0$  для всех i = 0, m. Таким образом, всегда имеем  $\overline{\xi} > 0$  и  $\eta > 0$ .

Однако средние значения  $\varphi$  и  $\psi$  вычисляемых рядов  $\varphi$  и  $\psi$  могут повлиять на схему сборки границы области центрированных моделей (в каждом из двух случаев). Выделим условия, руководствуясь следующим определением:

исходные данные (временные ряды  $\xi$  <u>и</u>  $\eta$ ) находятся в общем положении, если  $\phi \neq 0$  и  $\psi \neq 0$ .

Другие случаи, когда  $\varphi = 0$  или  $\psi = 0$ , не рассматриваются в настоящей работе. В ситуации общего положения комбинация знаков (sgn  $\varphi$ , sgn  $\psi$ ) может указывать на выбор первого из четырех главных кланов. Для каждого из этих кланов его образ при проекции в  $\mathbf{R}_{12,21}^2$  совпадает с первой из четырех компонент связности области  $\beta_{12}\beta_{21} \neq 0$ . Ниже приводятся расчеты для одного из реальных кланов.

Клан модели Лотки — Вольтерры. В динамической модели (5) система Лотки — Вольтерры (СЛВ) реализуется, если  $\beta_{12}\beta_{21} < 0$  и  $\beta_{11} = \beta_{22} = 0$ .

Имеются две возможности: либо  $q \in Q_{(a)}$ , либо  $q \in Q_{(b)}$ . Обозначения:

Варианты (*a*) и (*b*) различаются лишь «направлением обхода» траекторий. Поэтому имеет смысл ограничиться рассмотрением одного из вариантов СЛВ, например (*a*).

Пусть для определенности в исходной ситуации общего положения имеют место следующие условия:  $\overline{\phi} > 0$ ,  $\overline{\psi} < 0$ . Тогда для всех  $q \in Q_{(a)}$  при  $\beta_{11} = \beta_{22} = 0$  выполняются неравенства:

$$u_* = \overline{\xi}\kappa + \beta_{12}\overline{\psi} > 0, \quad v_* = \overline{\eta}\kappa + \beta_{21}\overline{\phi} > 0,$$

где  $\kappa := -\beta_{12}\beta_{21} > 0.$ 

Тем самым все реализации СЛВ (*a*) – центрированные.

Все модели клана СЛВ (*a*), который далее обозначается через *G*, относятся к области det B > 0. Характеристика сборки границы:  $\chi < 0$ . Основная часть границы  $\partial G$ клана *G* формируется из трех кусков:

$$H_1 := \{ \det B = 0, \beta_{11} > 0 \};$$
  

$$H_2 := \{ v_* = 0, \det B \ge 0 \};$$
  

$$H_3 := \{ u_* = 0, \det B \ge 0 \}.$$

Куски  $H_2$  и  $H_3$  соединяются вдоль многообразия L при  $\beta_{11} < 0$ . Многообразие L размерности 2 определяется системой линейных уравнений:

$$\begin{cases} \beta_{22}\overline{\phi}-\beta_{12}\overline{\psi}=0,\\ \beta_{11}\overline{\psi}-\beta_{21}\overline{\phi}=0. \end{cases}$$

Очевидно, что det B = 0 на L. Если рассматривать произвольно взятый слой  $G_q$ , то его край

$$\partial G_a = (H_1)_a \cup (H_2)_a \cup (H_3)_a.$$

В проекции на  $\mathbf{R}_{11,22}^2$  возникают следующие отождествления:  $(H_1)_q$  — ветвь гиперболы det B = 0 ( $\beta_{11} > 0$ );  $(H_2)_q$  — кусок

ветви гиперболы  $v_* = 0(\det B \ge 0); (H_3)_q$  кусок ветви гиперболы  $u_* = 0(\det B \ge 0).$ 

Пересечение  $L \cap \Sigma_q$  проектируется в точку

$$p_L(q) \coloneqq (\beta_{21}\overline{\varphi} / \overline{\psi}, \beta_{12}\overline{\psi} / \overline{\varphi}).$$

Остаточная часть границы состоит из кусков, допускающих расслоение при  $\beta_{12}\beta_{21} = 0$ , точнее, при  $q \in \partial Q_{(a)}$ .

#### Условия устойчивости модели Вольтерры

Линеаризация в окрестности нетривиального положения равновесия. Перейдем к новым переменным:

$$x = x_* + \zeta_1, \quad y = y_* + \zeta_2.$$

Система (5) преобразуется в систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \dot{\zeta}_1 = x_*(\beta_{11}\zeta_1 + \beta_{12}\zeta_2) + \zeta_1(\beta_{11}\zeta_1 + \beta_{12}\zeta_2), \\ \dot{\zeta}_2 = y_*(\beta_{21}\zeta_1 + \beta_{22}\zeta_2) + \zeta_2(\beta_{21}\zeta_1 + \beta_{22}\zeta_2). \end{cases} (8)$$

Для использования записей в матричной форме вводятся обозначения:

$$\begin{split} \Gamma &\coloneqq (\gamma_{ij}), \ \gamma_{1j} &\coloneqq x_* \beta_{1j}, \ \gamma_{2j} &\coloneqq y_* \beta_{2j}; \\ \zeta &= (\zeta_1, \zeta_2)^T. \end{split}$$

Матричная запись системы (8) имеет вид:

$$\dot{\zeta} = \Gamma \zeta + \operatorname{diag}(\zeta_1, \zeta_2) B \zeta.$$
(9)

Отбрасывая слагаемые вида  $O(|\zeta|^2)$ , приходим к линеаризованной системе:  $\dot{Z} = \Gamma Z$ . Инварианты матрицы  $\Gamma$  выражаются следующим образом:

tr 
$$\Gamma = \gamma_{11} + \gamma_{22} = x_*\beta_{11} + y_*\beta_{22};$$
  
det $\Gamma = \gamma_{11}\gamma_{22} - \gamma_{12}\gamma_{21} = x_*y_*$  det  $\Gamma$ .

Собственные значения матрицы Г могут быть получены как корни ее характеристического многочлена

$$\det(\Gamma - \lambda E) = \lambda^2 - \lambda \operatorname{tr} \Gamma + \det \Gamma.$$

Линеаризация в окрестности тривиального положения равновесия. Сначала вычислим для векторного поля **F** его матрицу Якоби в произвольно взятой точке:

$$(\vec{\mathbf{F}}')^T = \begin{pmatrix} \partial F_1 / \partial x & \partial F_1 / \partial y \\ \partial F_2 / \partial x & \partial F_2 / \partial y \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} f_1 + \beta_{11}x & \beta_{12}x \\ \beta_{21}y & f_2 + \beta_{22}y \end{pmatrix}.$$

Дальнейшая линеаризация системы (5) в окрестности каждой из точек  $P_k$  (k = 1, 2, 3) по известной схеме ведет к получению линейной системы:

$$\begin{cases} \dot{Z} = \Gamma_k Z; \\ \Gamma_k := (\vec{F}'(P_k))^T. \end{cases}$$

При возникновении необходимости все элементы матриц  $\Gamma_k$  могут быть выражены через элементы расширенной матрицы  $\overline{B}$ .

Устойчивость и неустойчивость. Руководствуясь теорией Ляпунова [6], можно выделить достаточные условия устойчивости и неустойчивости положения равновесия на основании спектральных свойств матрицы линеаризованной системы. Применимость теорем Ляпунова в случае системы (5) обеспечивается тем, что отбрасываемые при линеаризации слагаемые являются однородными многочленами второй степени.

Какая-либо квадратная матрица A называется устойчивой, если ее спектр содержится в левой полуплоскости:  $\text{Re }\lambda < 0$ . Для матрицы размера 2 × 2 условие устойчивости равносильно выполнению двух неравенств: det A > 0, tr A > 0.

Нетривиальное положение равновесия характеризуется выполнением одного из трех случаев:

если det  $\Gamma > 0$  и tr  $\Gamma < 0$  (матрица  $\Gamma$  — устойчивая), то стационарная точка  $P_*$  асимптотически устойчива (локально);

если det  $\Gamma > 0$  и tr  $\Gamma > 0$  (матрица ( $-\Gamma$ ) – устойчивая), то стационарная точка  $P_*$  вполне неустойчива (локально);

если det  $\Gamma < 0$ , то стационарная точка *P*<sub>\*</sub> неустойчива (коль скоро она является седловой).

Во всех остальных случаях (когда det  $\Gamma = 0$  или tr  $\Gamma = 0$ ) требуются индивидуальные рассмотрения. В частности, если det  $\Gamma > 0$  и det  $\Gamma = 0$ , то выпуклая окрестность точки  $P_*$  заполнена замкнутыми траекториями [7], так что имеет место простая устойчивость.

Как для точки  $P_*$ , для каждой из точек  $P_k$  (k = 1, 2, 3) можно составить аналогичные условия устойчивости и неустойчивости. Формулировки условий здесь не пред-

ставлены, поскольку в рассматриваемых ниже задачах точки  $P_k$  себя не проявляют.

Области устойчивости и неустойчивости модели Вольтерры. Здесь и далее толкование термина «устойчивость» связывается с выполнением условий устойчивости нетривиального положения равновесия. В порядке очередной задачи требуется определить в пространстве  $\mathbf{R}_{B}^{4}$  связную открытую область  $\Omega$ , состоящую из таких матриц B, для которых матрица  $\Gamma$  – устойчивая.

Матрицы В и Г связаны соотношением

$$\Gamma = \operatorname{diag}(x_*, y_*)B.$$

Все дальнейшие расчеты выполнены в клане G, т. е. в клане СЛВ (*a*). Ввиду того, что

$$\det \Gamma = x_* y_* \det B,$$

в клане G имеем: det  $\Gamma > 0$ . В качестве области устойчивости можно принять область

$$\Omega \coloneqq \{B \in G : \operatorname{tr} \Gamma < 0\}.$$

Чтобы существенно упростить выкладки, введем выражение (многочлен третьей степени от  $\beta_{ij}$ ):

 $\rho := \det(\Gamma) \operatorname{tr}(\Gamma) = u_* \beta_{11} + v_* \beta_{22}.$ 

С использованием  $\rho$  возникает другое представление области устойчивости:

$$\Omega \coloneqq \{B \in G : \rho < 0\}.$$

Основная часть границы  $\partial \Omega$  области устойчивости  $\Omega$  формируется из трех кусков по списку  $\{H_0, H_1^-, H_2\}$ , где

$$H_0 := \{ \rho = 0, \det \Gamma \ge 0 \};$$

$$H_1^- := H_1 \cap \{\rho < 0\}.$$

После несложных преобразований можно написать:

$$\rho = \det(B)[\beta_{11}\xi + \beta_{22}\eta - (\phi + \psi)] + \\ + \kappa(\overline{\phi} + \overline{\psi}) + (\beta_{11}\beta_{12}\overline{\psi} + \beta_{22}\beta_{21}\overline{\phi}).$$

Пересечение гиперповерхностей det B = 0 и  $\rho = 0$  имеет вид  $L \cup N$ , где многообразие N определяется условиями  $\beta_{22} = \beta_{12}, \beta_{11} = \beta_{21}$ . Куски границы  $H_0$  и  $H_2$  соединяются вдоль многообразия L при  $\beta_{11} < 0$ . Куски  $H_0$  и  $H_1^-$  соединяются вдоль многообразия N при  $\beta_{11} > 0$ .

Для произвольно взятого слоя Ω<sub>q</sub> области устойчивости его край имеет представление



Области устойчивости ( $\Omega$ ) и неустойчивости ( $\Xi_0 \cup \Xi_1 \cup \Xi_2$ ) для клана модели Лотки — Вольтерры в случае выполнения неравенств:  $\beta_{12} < 0, \beta_{21} > 0$ 

$$\partial \Omega_q = (H_0)_q \cup (H_1^-)_q \cup (H_2)_q.$$

В проекции на  $\mathbf{R}_{11,22}^2$  возникает еще одно отождествление, согласно которому  $(H_0)_q$  — кусок алгебраической кривой (третьего порядка):  $\rho = 0$  при det  $B \ge 0$ . Пересечение  $N \cap \Sigma_q$  проектируется в точку

$$p_N(q) \coloneqq (\beta_{21}, \beta_{12}).$$

Остаточная часть границы области устойчивости состоит из двух кусков, расположенных на гиперплоскостях  $\beta_{12} = 0$  и  $\beta_{21} = 0$ .

На рисунке показаны геометрические объекты в сечении слоем  $\Sigma_q$  (индекс q опущен):  $\Omega$  – область асимптотической устойчивости клана G;  $\Xi_0$  – область вполне неустойчивости клана G;  $\Xi_1$  и  $\Xi_2$  – области, не задевающие G, составленные из множеств, в каждом из которых имеет место одно из двух: либо модель нецентрированная, либо она центрированная, но точка  $P_*$  – неустойчивая (когда положение равновесия является седловой точкой).

#### Устойчивость с точки зрения проверки статистических гипотез

В случае, когда полученные значения коэффициентов указывают на устойчивость процесса, описываемого системой (3), исследователю хотелось бы выяснить, насколько надежен результат, что, естественно, переводит задачу в область проверки статистических гипотез. До этого момента даже характерные для статистики формулы использовались лишь в смысле МНК, который, как известно, весьма популярен в области прикладной статистики.

Теперь нам следует подчеркнуть, что вычисленные значения параметров (коэффициентов) системы (3) являются оценками, которые, в принципе, носят случайный характер, и поэтому мы будем их обозначать как  $\hat{\beta}_{ij}$ , а обозначения без «крышек» использовать для истинных значений, которые, естественно, считаем неизвестными. Будем предполагать, что оценки коэффициентов подчиняются нормальному распределению. Поэтому ближайшая наша задача — это выяснение параметров этого распределения, а именно — матрицы дисперсий и совместных ковариаций.

Реализации левых частей системы (3), как и ранее, обозначаем через  $\varphi_i$  и  $\psi_i$ , соответственно, а реализации переменных *x* и *y* – соответственно через  $\xi_i$  и  $\eta_i$ , где  $i = \overline{0, m}$ . Перейдем к центрированным значениям  $\tilde{\varphi}_i = \varphi_i - \varphi$ , где  $\varphi$  – среднее арифметическое. С остальными переменными поступим аналогично. Построим выборочную матрицу левых частей системы (3):

$$A = \begin{pmatrix} \tilde{\varphi}_1 & \tilde{\varphi}_2 & \dots & \tilde{\varphi}_m \\ \tilde{\psi}_1 & \tilde{\psi}_2 & \dots & \tilde{\psi}_m \end{pmatrix}.$$

Пусть *P* – ортогональная матрица, такая, что  $P^T A A^T P = \Lambda$ , где  $\Lambda$  – диагональная матрица. Тогда в строках матрицы  $D = P^T A$ стоят реализации независимых, нормально распределенных величин, которые мы обозначим через  $z_1$  и  $z_2$ . Рассмотрим систему регрессионных уравнений:

$$\begin{cases} z_1 = b_{11}x + b_{12}y + \varepsilon_1; \\ z_2 = b_{21}x + b_{22}y + \varepsilon_2. \end{cases}$$
(10)

Пусть через  $B_z$  обозначается (2 × 2)матрица параметров системы (10). Тогда МНК-оценка этих параметров следует выражению [8, 9]:

$$\widehat{B}_{z} = DX^{T} (XX^{T})^{-1},$$

где *X* – выборочная матрица центрированных реализаций переменных *x* и *y*, т. е.

$$X = \begin{pmatrix} \tilde{\xi}_1 & \tilde{\xi}_2 & \dots & \tilde{\xi}_m \\ \tilde{\eta}_1 & \tilde{\eta}_2 & \dots & \tilde{\eta}_m \end{pmatrix}.$$

Остатки регрессии (10)  $\varepsilon_j$  (j = 1, 2) имеют нулевое среднее значение, а несмещенные оценки дисперсий этих остатков следуют выражению:

$$\widehat{\sigma}_{j}^{2} = (m-3)^{-1} \sum_{i=1}^{m} (z_{ji} - \widehat{b}_{j1}\xi - \widehat{b}_{j2}\eta_{i})^{2}.$$
 (11)

Обращая внимание на то, что матрица коэффициентов при переменных в правой части (3) может быть получена по формуле

$$\widehat{B} = AX^T (XX^T)^{-1},$$

приходим к соотношению

$$\hat{B} = P\hat{B}_{z}$$
.

Отсюда видно, что векторы

 $\hat{\beta}^{T} = (\hat{\beta}_{11}, \hat{\beta}_{12}, \hat{\beta}_{21}, \hat{\beta}_{22}), \quad \hat{b}^{T} = (\hat{b}_{11}, \hat{b}_{12}, \hat{b}_{21}, \hat{b}_{22})$ 

связаны следующим соотношением [8, 9]:

$$\hat{B} = Q\hat{b}, \qquad (12)$$

где ортогональная матрица Q составлена из элементов P, т. е.

$$Q = \begin{pmatrix} p_{11} & 0 & p_{12} & 0 \\ 0 & p_{11} & 0 & p_{12} \\ p_{21} & 0 & p_{22} & 0 \\ 0 & p_{21} & 0 & p_{22} \end{pmatrix}.$$

Здесь и далее для какой-либо матрицы  $B = (\beta_{ij})$  размера 2 × 2 через  $\beta$  обозначается ее развертка в столбец, так что

$$\boldsymbol{\beta}^T \coloneqq (\boldsymbol{\beta}_{11}, \boldsymbol{\beta}_{12}, \boldsymbol{\beta}_{21}, \boldsymbol{\beta}_{22}).$$

Матрица дисперсий и взаимных ковариаций вектора  $\hat{b}$  в силу независимости  $z_1$  и  $z_2$  имеет блочную структуру и выражается как

$$V_{\hat{b}} = \begin{pmatrix} \widehat{\sigma}_1^2 (XX^T)^{-1} & O \\ O & \widehat{\sigma}_1^2 (XX^T)^{-1} \end{pmatrix}$$

где каждый блок относится к паре коэффициентов соответствующего уравнения.

Из соотношения (12) следует, что матрица дисперсий и взаимных ковариаций вектора  $\hat{\beta}$  равна

$$V_{\hat{\beta}} = Q V_{\hat{b}} Q^T$$
.

В рассмотренной выше ситуации мы имеем устойчивость, когда точка  $\beta$  с координатами ( $\beta_{11}, \beta_{12}, \beta_{21}, \beta_{22}$ ) лежит в области  $\Omega$ , т. е. когда  $\beta \in \Omega$ . Вектор  $\hat{\beta}$  является несмещенной оценкой, следовательно, этот вектор подчиняется нормальному распределению, т. е.  $\hat{\beta} \sim N(\beta, V_{\hat{\beta}})$ . Функция плотности этого распределения выражается формулой

$$f(\beta) = c \cdot \exp(-\Psi(\beta - \hat{\beta}) / 2),$$

где *с* — множитель нормировки (*c* > 0),  $\Psi$  — положительно определенная квадратичная форма с матрицей ( $V_{\rm fl}$ )<sup>-1</sup> ( $\Psi(\cdot) > 0$ ).

В одномерном случае при нормальном распределении, проверяя статистическую гипотезу, мы имеем в качестве границы критической области две точки, расположенные симметрично относительно центра предполагаемого распределения.

В четырехмерном же случае, если проверяется гипотеза  $H_0$ :  $\beta = \beta^*$ , границей критической области будет эллипсоид  $W_{\alpha}$  с центром в точке  $\beta^*$ . Функция плотности указанного выше распределения принимает на нем постоянное значение, а вероятность того, что точка  $\beta$  с координатами ( $\beta_{11}, \beta_{12}, \beta_{21}, \beta_{22}$ ) принадлежит области, ограниченной этим эллипсоидом, равна  $1 - \alpha$ ( $\alpha$  – уровень значимости).

В нашем случае гипотеза  $H_0$  имеет вид  $H_0: \beta \notin \Omega$ . Эту гипотезу можно рассматривать как совокупность простых гипотез  $H_0: \beta = \beta^*$ , где  $\beta^* \notin \Omega$ . Границей пересечения всех критических областей будет огибающая семейства эллипсоидов  $W_{\alpha}$ , лежащая в  $\Omega$ , при условии, что центры эллипсоидов (параметры сдвига семейства распределений) пробегают границу  $\partial\Omega$  области  $\Omega$ . Проверку такой гипотезы можно осуществить по следующему алгоритму, основанному на том, что аргумент и параметр сдвига в функции плотности распределения занимают симметричное положение.

Для распределения  $\beta \sim N(\hat{\beta}, V_{\hat{\beta}})$  находим такой эллипсоид  $W_{\gamma}$  с центром в точке  $\hat{\beta}$ , чтобы он касался границы  $\partial\Omega$  области  $\Omega$ , а постоянное значение функции плотности этого распределения на границе эллипсоида было бы максимальным. Тогда если вероятностная мера области, ограниченной этим эллипсоидом, будет больше, чем  $(1 - \alpha)$ , т. е.  $(1 - \gamma) > (1 - \alpha)$ , или  $\gamma < \alpha$ ( $\gamma$  – вероятностная мера внешней для эллипсоида части четырехмерного пространства), то гипотеза  $H_0$  может быть отвергнута, и мы, в свою очередь, можем быть уверены в том, что процесс устойчив.

Геометрически задача нахождения эллипсоида  $W_{\gamma}$  сводится к нахождению точки  $\beta^*$  касания этого эллипсоида с границей  $\partial \Omega$  области  $\Omega$  и имеет стандартное решение по методу множителей Лагранжа [10]. Введем список  $\Pi := \{\rho, \det B, \nu_*, \beta_{12}, \beta_{21}\}.$ 

Каждый кусок границы  $\partial \Omega$  области  $\Omega$  определяется своим уравнением вида  $\omega(\beta) = 0$ , где  $\omega \in \Pi$ . Каждому выражению  $\omega$  из списка  $\Pi$  соответствует своя функция Лагранжа

$$L_{\omega}(\beta;\lambda) \coloneqq \ln f(\beta) - \lambda \omega(\beta)(\omega \in \Pi),$$

где  $f(\beta)$  – функция плотности, а уравнением  $\omega(\beta) = 0$  задается соответствующий кусок границы  $\partial \Omega$  области  $\Omega$ . Из предыдущего раздела видно, что точка  $\beta^*$  есть решение одной из пяти систем уравнений ( $\omega \in \Pi$ ):

$$\frac{\partial L_{\omega}(\beta;\lambda)}{\partial \beta_{ii}} = 0 \ (i,j=\overline{1,2}), \omega(\beta) = 0.$$

За окончательное решение  $\beta^*$  принимаем такое, которое дает большее значение правдоподобия  $f(\beta^*) = f_{\gamma}$ , и тем самым получаем искомый эллипсоид

$$W_{\gamma} = \{\beta : f(\beta) = f_{\gamma}\},\$$

а вероятностную меру области, ограниченной этим эллипсоидом, сравниваем с выбранным уровнем доверия  $(1 - \alpha)$ .

В случае относительно небольшого объема выборки для проверки  $H_0$  здесь можно воспользоваться, например, статистикой

$$\boldsymbol{r} = (\boldsymbol{\beta}^* - \widehat{\boldsymbol{\beta}})^T \boldsymbol{V}_{\widehat{\boldsymbol{\beta}}}^{-1} (\boldsymbol{\beta}^* - \widehat{\boldsymbol{\beta}}),$$

которая имеет распределение, близкое к  $\chi$ -квадратному, с числом степеней свободы, равным 4, так как вырожденность  $V_{\beta}$  в этом случае означала бы линейную связь между x и y, т. е. нецелесообразность рассматриваемой модели. Компоненты вектора

$$S = V_{\widehat{\beta}}^{-1/2}(\beta^* - \widehat{\beta})$$

здесь будут иметь распределение Стьюдента с числом степеней свободы

v = m - 3.

Кроме  $\chi$ -квадрат-статистики и статистики Стьюдента, для проверки исходной гипотезы можно построить *F*-статистику.

Пусть имеет место условие  $\sigma_1^2 = \sigma_2^2$ , статистическая проверка которого сводится к *F*-критерию и является хорошо известным хрестоматийным примером. Тогда исходная гипотеза может быть проверена посредством статистики  $\mu \sim F_{4,2m-6}$ , которая следует выражению

$$\mu := \frac{(\beta^* - \hat{\beta})^T Q M Q^T (\beta^* - \hat{\beta}) / 4}{(S_1 + S_2) / (2m - 6)}.$$
$$M := \begin{pmatrix} X X^T & O \\ O & X X^T \end{pmatrix},$$
$$S_j := \sum_{i=1}^m (\varepsilon_{ji})^2 (j = 1, 2).$$

133

Здесь  $S_j$  — суммы квадратов регрессионных остатков уравнений (10). Если же условие  $\sigma_1^2 = \sigma_2^2$  не проходит

статистическую проверку, то для j = 1, 2имеем статистики  $\mu_i \sim F_{2,m-3}$ , вычисляемые как

$$\mu_{j} \coloneqq \frac{(\beta_{j}^{*} - \hat{\beta}_{j})^{T} X X^{T} (\beta_{j}^{*} - \hat{\beta}_{j}) / 2}{(p_{j1}^{2} S_{1} + p_{j2}^{2} S_{2}) / (m - 3)},$$

где  $\beta_{j}^{*} = (\beta_{j1}^{*}, \beta_{j2}^{*})^{T}, \ \hat{\beta}_{j} = (\hat{\beta}_{j1}, \hat{\beta}_{j2})^{T}.$ Независимо от выбора статистики (критерия) вычисление точки касания  $\beta^*$ является необходимым, так как перечисленные выше распределения (х-квадрат, Стьюдента и *F*-распределение) строятся на основе нормального распределения, а геометрические свойства последнего в этой ситуации играют ключевую роль. Именно эти геометрические свойства и позволяют сводить проверку гипотезы  $H_0: \beta \notin \Omega$  к проверке гипотезы  $H_0: \beta = \beta^*$ . Перечисленные выше статистики могут быть ис-

1. Колемаев В.А. Математическая экономика: Учебник для вузов. М.: ЮНИТИ-ДАНА, 2005. 399 c.

2. Прасолов А.В. Динамические модели с запаздыванием и их приложения в экономике и инженерии: Учебное пособие. СПб.: Изд-во «Лань», 2010. 192 с.

3. Братусь А.С., Новожилов А.С., Платонов А.П. Динамические системы и модели биологии. М.: Физматлит, 2010. 400 с.

4. Лебедев В.В. Математическое моделирование социально-экономических процессов. М.: «Изограф», 1997. 222 с.

5. Кондрашков А.В. О средствах анализа экономических процессов с использованием непрерывной шкалы времени // Сб. научных статей Всероссийской научно-практической конференции «Проблемы предпринимательства в услови-

пользованы для проверки любых предположений относительно истинных значений вектора β, т. е. для тестирования модели в целом, а результат тестирования, как было отмечено в самом начале, определяет, согласно общим принципам, правильность выбора модели.

#### Заключение

Важно отметить, что рассмотренная модель может иметь широкое применение в анализе и прогнозе экономических, социальных и биологических процессов, а также каких-либо иных, которые исследуются в различных областях науки. Все этапы алгоритма построения и анализа этой модели принципиально осуществимы, что, в свою очередь, позволяет рассматривать этот алгоритм в качестве основы для разработки программных продуктов для решения практических задач в различных сферах деятельности.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

ях кризиса» 30 сентября 2010. Т. 1. СПб.: Изд-во СПбГУСЭ, 2010. С. 330-332.

6. Понтрягин Л.С. Обыкновенные дифференциальные уравнения. М.: Наука, 1974. 332 с.

7. Баутин Н.Н., Леонтович Е.А. Методы и приемы качественного исследования динамических систем на плоскости. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит-ры, 1990. 488 с. (Справочная математическая библиотека).

8. Рао С.Р. Линейные статистические методы и их применения. М.: Наука, 1968. 548 с.

9. Себер Дж. Линейный регрессионный анализ. М.: Мир, 1980. 456 с.

10. Пичугин Ю.А. Вероятностные оценки риска и надежности в экономике // Научная сессия ГУАП: Сб. докл.: В 3-х чч. Ч. 1. Технические науки. СПб.: ГУАП СПб., 2013. C. 195-196.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

КОНДРАШКОВ Анатолий Викторович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры «Прикладные информационные технологии» Санкт-Петербургского государственного экономического университета.

191023, Россия, г. Санкт-Петербург, Садовая ул., 21 ankon69@mail.ru

ПИЧУГИН Юрий Александрович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры геометрии Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена.

191186, Россия, г. Санкт-Петербург, Казанская ул., 6 yury-pichugin@mail.ru

## Kondrashkov A.V., Pichugin, Yu.A. ON THE IDENTIFICATION AND STATISTICAL TESTING STABILITY OF THE VOLTERRA MODEL.

Some aspects of the Volterra model are considered in the paper. The emphasis is both on the determination of solution stability area in the space of model parameters and on statistical testing of stability. VOLTERRA MODEL, IDENTIFICATION, STABILITY, STATISTICAL TESTING.

#### REFERENCES

1. **Kolemaev V.A.** Matematicheskaya ekonomika: Uchebnik dlya vuzov. Moscow, YuNITI-DANA, 2005, 399 p. (rus)

2. **Prasolov A.V.** Dinamicheskie modeli s zapazdyvaniem i ikh prilozheniya v ekonomike i inzhenerii: Uchebnoe posobie. St. Petersburg, Izd-vo «Lan'», 2010, 192 p. (rus)

3. **Bratus' A.S., Novozhilov A.S., Platonov A.P.** Dinamicheskie sistemy i modeli biologii. Moscow, Fizmatlit, 2010, 400 p. (rus)

4. **Lebedev V.V.** Matematicheskoe modelirovanie sotsial'no-ekonomicheskikh protsessov. Moscow, Izograf, 1997, 222 p. (rus)

5. **Kondrashkov A.V.** O sredstvakh analiza ekonomicheskikh protsessov s ispol'zovaniem nepreryvnoy shkaly vremeni. Sb. nauchnykh statey Vserossiyskoy nauchno-prakticheskoy konferentsii «Problemy predprinimatel'stva v usloviyakh krizisa» 30 sentyabrya 2010. T. 1. St. Petersburg, Izd-vo SPbGUSE, 2010, pp. 330–332. (rus)

6. **Pontryagin L.S.** Obyknovennye differentsial'nye uravneniya. Moscow, Nauka, 1974, 332 p. (rus)

7. **Bautin N.N., Leontovich E.A.** Metody i priemy kachestvennogo issledovaniya dinamicheskikh sistem na ploskosti. Moscow, Nauka. Gl. red. fiz.mat. lit-ry, 1990, 488 p. (Spravochnaya matematicheskaya biblioteka). (rus)

8. **Rao S.R.** Lineynye statisticheskie metody i ikh primeneniya. Moscow, Nauka, 1968, 548 p. (rus)

9. Seber Dzh. Lineynyy regressionnyy analiz. Moscow, Mir, 1980, 456 p. (rus)

10. Pichugin Yu.A. Veroyatnostnye otsenki riska i nadezhnosti v ekonomike. Nauchnaya sessiya GUAP: Sb. dokl.: V 3-kh chch. Ch. 1. Tekhnicheskie nauki. St. Petersburg, GUAP SPb, 2013, pp. 195–196. (rus)

#### THE AUTHORS

#### **KONDRASHKOV** Anatoliy V.

St. Petersburg State University of Economics, 21 Sadovaya St., St. Petersburg, 191023, Russia ankon69@mail.ru

#### **PICHUGIN Yuriy A.**

Herzen State Pedagogical University of Russia, 6 Kazanskaya St., 191186, St. Petersburg, Russia yury-pichugin@mail.ru

## РАДИОФИЗИКА

УДК 537.86

А.Ю. Рыкшин, П.М. Зацепин, П.Н. Уланов

Алтайский государственный университет

#### МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЕЯНИЯ КОРОТКОГО ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИМПУЛЬСА НА ДВУХСЛОЙНОЙ СТРУКТУРЕ ПРИ ПОМОЩИ ВЕЙВЛЕТ-ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

Рассмотрена задача рассеяния короткого электромагнитного импульса двухслойной диэлектрической структурой. Исходное поле генерируется бесконечно тонким источником электрического или магнитного тока, расположенным параллельно границам слоя. Решение задачи записывается через преобразование Фурье по пространственным координатам и через вейвлет-преобразование по времени. Изучены характеристики полей в указанной структуре и в окружающем пространстве.

ВЕЙВЛЕТ-ПРЕОБРАЗОВАНИЕ, ИМПУЛЬС, РАССЕЯНИЕ, ДВУХСЛОЙНАЯ СТРУКТУРА.

#### Введение

Теоретическое изучение явлений распространения и рассеяния полей импульсных источников может быть полезным при решении задач радиолокации, геолокации, дистанционного зондирования природных сред. Кроме того, во многих областях предметной деятельности актуальны вопросы технической диагностики при помощи электромагнитных полей.

В связи с этим значительный интерес представляют задачи распространения и рассеяния коротких и сверхкоротких электромагнитных импульсов в различных структурах [1 – 3].

При теоретическом исследовании задач распространения и рассеяния коротких и сверхкоротких электромагнитных импульсов возникают трудности, связанные с выбором метода решения таких задач. В данном случае главное требование к методу — это возможность учета импульсного характера источника первичного поля. Традиционные методы решения, в основе которых лежат преобразования Фурье или Лапласа, во многих случаях непригодны, так как приводят либо к трудностям в интерпретации полученного решения, либо к сложности численных расчетов. Решение этих проблем возможно, если использовать подход, который бы учитывал локальный характер первичного поля. Указанным требованиям может удовлетворять метод, в котором вместо преобразования Фурье по временной координате используется интегральное вейвлет-преобразование.

В данном исследовании рассмотрена задача рассеяния на двухслойной диэлектрической структуре короткого электромагнитного импульса, который порождается бесконечным нитевидным источником.

#### Постановка задачи

Бесконечно протяженный вдоль оси *у* линейный источник с плотностью электрического поверхностного тока  $j^{e}$  имеет координаты  $(x_0, z_0)$  в декартовой системе. Источник излучает первичный импульс, имеющий горизонтальную поляризацию, и его поле рассеивается на двухслойной структуре с толщинами слоев  $d_2$  и  $d_3$ . Диэлектрические проницаемости верхнего и нижнего полупространств  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_4$ , а также слоев исследуемой структуры  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$  могут



Рис. 1. Геометрия задачи:  $d_2, d_3$  – толщины слоев структуры;  $\varepsilon_i$  – относительные диэлектрические проницаемости сред;  $(x_0, z_0)$  – координаты источника излучения

принимать и действительные, и комплексные значения. Магнитные проницаемости всех сред равны единице. Требуется найти рассеянное поле излучения в произвольной точке пространства. Рассматриваемая задача является двумерной, следовательно, производные по координате у равны нулю.

Геометрия задачи представлена на рис. 1.

Источник тока является импульсным с временной зависимостью вида:

$$j(t) = -\frac{t - t_0}{\tau^2} \exp\left[-\frac{(t - t_0)^2}{2\tau^2}\right],$$
 (1)

где т — размерный коэффициент, задающий полуширину импульса.

Поле источника падает на диэлектрический слой, частично отражается и проходит внутрь этого слоя; там оно испытывает множественные переотражения и затем выходит из слоя (см. рис. 1) [4].

Для решения поставленной задачи нами применяется преобразование Фурье по пространственным координатам и вейвлетпреобразование по временной координате. Вейвлет-преобразование имеет следующий вид:

$$W(\Omega,T)=\int_{-\infty}^{+\infty}f(t)\left|\Omega\right|^{1/2}\psi(\Omega(t-T))dt;$$

$$f(t) = \frac{1}{C_{\psi}} \int_{-\infty}^{+\infty} -W(\Omega, T) \left|\Omega\right|^{1/2} \psi(\Omega(t-T)) d\Omega dT;$$

здесь  $C_{\psi}$  — нормировочная константа, которая рассчитывается следующим образом:

$$C_{\psi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|\psi(\omega)|^2}{|\omega|} d\omega,$$

 $(\psi(\omega) - \Phi ypbe-oбpas вейвлетной функции <math>\psi(t)$ ).

Для решения задачи был использован вейвлет Гаусса первого порядка:

$$\Psi_{\Omega T}(t) = -\Omega(t-T) \exp\left[-\frac{\Omega^2(t-T)^2}{2}\right].$$

## Электромагнитные поля и граничные условия

В силу двумерности задачи система уравнений Максвелла распадается на две независимых подсистемы с компонентами  $(E_y, H_x, H_z)$  и  $(H_y, E_x, E_z)$  – горизонтальная и вертикальная поляризации соответственно.

Далее, рассмотрим решение для случая горизонтальной поляризации. Система уравнений Максвелла для выбранной поляризации примет следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{dE_{y}}{dz} = \mu_{0} \frac{dH_{x}}{dt}, \\ \frac{dE_{y}}{dx} = -\mu_{0} \frac{dH_{z}}{dt}, \\ \frac{dH_{x}}{dz} - \frac{dH_{z}}{dx} = \varepsilon_{0} \varepsilon \frac{dE_{y}}{dt} + j_{y}^{e}, \end{cases}$$
(2)

где  $j_y^e$  — плотность тока импульса (ток проходит по нити источника).

Для вывода компонент в разных областях пространства воспользуемся техникой, описанной в работах [5, 6]. Представление компонент электромагнитного поля через вейвлет-образы по временным координатам и Фурье-образы по пространственным координатам в полупространстве z > 0 записывается следующим образом:

$$E_{y}(x, z, t) = \frac{1}{C_{\psi}(2\pi)^{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e_{y}(\xi, \eta, \Omega, T) \times$$
  
 
$$\times \exp[i\xi x + i\eta z] |\Omega|^{1/2} \psi_{\Omega T}(t) d\xi d\eta d\Omega dT;$$
  

$$H_{x}(x, z, t) = \frac{1}{C_{\psi}(2\pi)^{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} h_{x}(\xi, \eta, \Omega, T) \times$$
(3)

$$\times \exp[i\xi x + i\eta z] |\Omega|^{1/2} \psi_{\Omega T}(t) d\xi d\eta d\Omega dT; H_z(x, z, t) = \frac{1}{C_{\psi}(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} h_z(\xi, \eta, \Omega, T) \times$$
(3)  
 
$$\times \exp[i\xi x + i\eta z] |\Omega|^{1/2} \psi_{\Omega T}(t) d\xi d\eta d\Omega dT.$$

Для полного описания решения достаточно найти компоненты  $(E_v, H_y)$ .

Подставляя выражения для компонент полей (3) в систему уравнений Максвелла (2), получим следующие соотношения для спектральных плотностей компонент падающего поля:

$$e_{y}^{i}(\xi,\eta,\Omega,T) = -\mu_{0}I^{e}(\xi,\eta,\Omega,T) \times \\ \times \frac{\psi_{1\Omega T}(t)}{\psi_{\Omega T}(t)} \left[\eta^{2} + \xi^{2} + \frac{\varepsilon_{0}\mu_{0}\varepsilon\psi_{1\Omega T}^{2}(t)}{\psi_{\Omega T}^{2}(t)}\right]^{-1}; \quad (4)$$

$$h_{x}^{i}(\xi,\eta,\Omega,T) = e_{y}^{i}\frac{i\eta\psi_{\Omega T}(t)}{\mu_{0}\psi_{1\Omega T}(t)},$$

где

$$I^{e}(\xi,\eta,\Omega,T) = \int_{-\infty}^{\infty} j^{e}(x',z',t')e^{-i\xi x'-i\eta z'} \times \sqrt{|\Omega|}\psi_{\Omega T}(t')dx'dz'dt', \qquad (5)$$

$$j^{e}(x',z',t') = \delta(x'-x_{0})\delta(z'-z_{0})j^{e}(t'); \qquad \psi_{1\Omega T}(t) = \frac{d\psi_{\Omega T}(t)}{dt}.$$

 $+\alpha$ 

Выражения для компонент электромагнитного поля, с учетом применения теоремы о вычетах при интегрировании по координате η и подстановки спектральной плотности тока (5), примут следующий вид:

$$E_{y}^{i}(x, z, t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \int_{-\infty}^{+\infty} -\frac{i\mu_{0}}{w_{1}} \exp[i\xi(x - x_{0}) \pm iw_{1}(z - z_{0})]J(\Omega, T) |\Omega|^{1/2} \psi_{1\Omega T}(t)d\xi d\Omega dT;$$
  

$$H_{x}^{i}(x, z, t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \pm \exp[i\xi(x - x_{0}) \pm (6)]$$
  

$$\pm iw_{1}(z - z_{0})]J(\Omega, T) |\Omega|^{1/2} \psi_{\Omega T}(t)d\xi d\Omega dT;$$
  

$$(z - \xi + \xi) ||\xi||^{1/2} \psi_{\Omega T}(t) |\xi|^{1/2}$$

$$w_n = \left(-\xi^2 - \frac{\varepsilon_0 \mu_0 \varepsilon_n \psi_{1\Omega T}(t)}{\psi_{\Omega T}^2(t)}\right)$$

Для упрощения записи введем оператор запаздывания по времени  $\widehat{D}(t_0): f(t) \to f(t-t_0)$ . Тогда граничное

условие на границе диэлектриков z = 0 запишется в следующем виде:

$$\begin{cases} \widehat{D}(t_0) E_y^i + E_y^R = E_y^T; \\ \widehat{D}(t_0) H_x^i + H_x^R = H_x^T, \end{cases}$$
(7)

где  $t_0 = \left(\frac{x_0^2 + z_0^2}{c^2 \operatorname{Re} \varepsilon_1}\right)^{1/2}$ .

Представляя прошедшее и отраженное поля излучения аналогично компонентам падающего поля (6) и используя систему (7), получим для отраженного и прошедшего полей на границе z = 0 следующие выражения:

$$E_{y}^{R}(x,z,t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \widehat{D}(t_{0}) \times \\ \times \int_{-\infty}^{+\infty} e_{y}^{i} R_{12} \exp[i\xi x + iw_{1}z] d\xi d\Omega dT;$$
(8a)

$$H_x^R(x,z,t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \widehat{D}(t_0) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{iw_1 \psi_{\Omega T}(t)}{\mu_0 \psi_{1\Omega T}(t)} \times (86)$$
$$\times e_{\psi}^i R_{12} \exp[i\xi x + iw_1 z] d\xi d\Omega dT;$$

$$E_{y}^{T}(x,z,t) = \frac{1}{4\pi C_{y}} \widehat{D}(t_{0}) \int_{-\infty}^{+\infty} e_{y}^{i} T_{12} \times$$

$$\times \exp[i\xi x - iw z] d\xi d\Omega dT$$
(8B)

$$H_x^T(x,z,t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \widehat{D}(t_0) \int_{-\infty}^{+\infty} -\frac{iw_2 \psi_{\Omega T}(t)}{\mu_0 \psi_{1\Omega T}(t)} \times \frac{e_y^i T_{12} \exp[i\xi x - iw_2 z] d\xi d\Omega dT,}$$
(8r)

где

$$e_{y}^{i} = e_{y}^{i}(\xi, \Omega, T, t) = -\frac{i\mu_{0}}{w_{1}} \exp[-i\xi x_{0} - iw_{1}z_{0}] \times J(\Omega, T) \left|\Omega\right|^{1/2} \psi_{1\Omega T}(t);$$
$$R_{nm} = \frac{w_{n} - w_{m}}{w_{n} + w_{m}}, \quad T_{nm} = \frac{2w_{n}}{w_{n} + w_{m}}.$$

Используя тот же способ, получим с помощью формул (8в), (8г) выражения для напряженностей прошедшей и отраженной компонент поля, образованных в результате падения излучения на границу  $z = -d_2$ :

$$E_{y}^{R}(x,z,t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \widehat{D}(t_{0}+t_{2}) \int_{-\infty}^{+\infty} e_{y}^{i} \times R_{23}T_{12}e^{2iw_{2}d_{2}} \exp[i\xi x+iw_{2}z]d\xi d\Omega dT;$$
(9)

$$E_{y}^{T}(x,z,t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \widehat{D}(t_{0}+t_{2}) \int_{-\infty}^{+\infty} e_{y}^{i} T_{23} T_{12} \times (9)$$
  
 
$$\times \exp[id_{2}(w_{2}-w_{3})] \exp[i\xi x - iw_{3}z] d\xi d\Omega dT,$$

где  $t_n = d_n / c_n$  – время задержки при прохождении среды с номером  $n, c_n -$ скорость света в среде с номером *n*.

В результате падения излучения с компонентой напряженности электрического поля  $E_y^R$  из области первого слоя структуры (см. формулы (9)) на границу между слоями z = 0 компоненты поля излучения принимают следующий вид:

$$E_{y}^{R}(x, z, t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \widehat{D}(t_{0} + 2t_{2}) \int_{-\infty}^{+\infty} e_{y}^{i} R_{23} T_{12} \times e^{2iw_{2}d_{2}} R_{21} e^{i\xi x - iw_{2}z} d\xi d\Omega dT;$$
  

$$E_{y}^{T}(x, z, t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \widehat{D}(t_{0} + 2t_{2}) \int_{-\infty}^{+\infty} e_{y}^{i} R_{23} T_{12} \times \exp[2iw_{2}d_{2}] T_{21} \exp[i\xi x + iw_{1}z] d\xi d\Omega dT.$$

Рассмотрим переотражения от границ в среде 2 и в результате получим конечное выражение для компонент полей излучения в этой среде:

$$E_{2}^{+}(x, z, t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \times \\ \times \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} \left( \widehat{D} \left( t_{0} + (2n+1)t_{2} + \frac{d_{2} + z}{c_{2}} \right) e_{y}^{i} T_{12} R_{23} \times \\ \times \exp[2iw_{2}d_{2}] R_{1}^{n} \right) \exp[i\xi x + iw_{2}z] d\xi d\Omega dT;$$

$$E_{2}^{-}(x, z, t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \times$$

$$\times \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} \left( \widehat{D} \left( t_{0} + 2nt_{2} - \frac{z}{c_{2}} \right) e_{y}^{i} T_{12} R_{1}^{n} \right) \times \\ \times \exp[i\xi x - iw_{2}z] d\xi d\Omega dT;$$

$$R_{1} = R_{23} R_{21} \exp[2iw_{2}d_{2}].$$
(10)

Верхние плюсовый и минусовый индексы при величине Е, означают движение поля излучения по направлению оси z и в противоположном направлении соответственно (нижний индекс указывает на номер среды). Результирующее поле  $E_2^-(x, z, t)$  во второй среде (первый слой структуры) движется против оси z и попадает на границу  $z = -d_2$ , где частично отражается и частично проходит в третью среду. Это прошедшее поле создает в третьей среде (второй слой структуры) множественные внутренние переотражения:

$$E_{3}^{+}(x, z, t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} (\widehat{D}(t_{0}) \times \widehat{D}([2n+1]t_{2} + [2m+1]t_{3}) \widehat{D}\left(\frac{d_{2} + d_{3} + z}{c_{3}}\right) \times \\ \times \widehat{D}([2n+1]t_{2} + [2m+1]t_{3}) \widehat{D}\left(\frac{d_{2} + d_{3} + z}{c_{3}}\right) \times \\ \times e_{y}^{i}T_{12}R_{23}T_{23}R_{34}R_{1}^{n}R_{2}^{m} \exp[2iw_{2}d_{2}] \times \\ \times \exp[i(w_{2} - w_{3})d_{2}] \exp[2iw_{3}(d_{2} + d_{3})]) \times \\ \times \exp[i(\xi_{x} + iw_{3}z]d\xi d\Omega dT; \qquad (11) \\ E_{3}^{-}(x, z, t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} (\widehat{D}(t_{0}) \times \\ \times \widehat{D}\left([2n+1]t_{2} + 2mt_{3} - \frac{d_{2} + z}{c_{3}}\right) e_{y}^{i}T_{12}T_{23}R_{1}^{n}R_{2}^{m} \times \\ \times \exp[i(w_{2} - w_{3})d_{2}]) \exp[i\xi_{x} - iw_{3}z]d\xi d\Omega dT; \\ R_{2} = R_{32}R_{34} \exp[2iw_{3}d_{3}].$$

Далее поле  $E_{3}^{-}(x, z, t)$  падает на границу сред 3 и 4 в плоскости  $z = -d_3$  и частично проходит в среду 4:

×

$$E_{4}^{-}(x, z, t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} (\widehat{D}(t_{0}) \times \widehat{D}([2n+1]t_{2} + [2m+1]t_{3}) \times \widehat{D}\left(\frac{d_{2} + d_{3} + z}{c_{4}}\right) e_{y}^{i} T_{12} T_{23} T_{34} R_{1}^{n} R_{2}^{m} \times$$
(12)

× exp[ $i(w_2 - w_3)d_2 + i(w_3 - w_4)(d_2 + d_3)$ ])×  $\times \exp[i\xi x - iw_4 z]d\xi d\Omega dT.$ 

Поле  $E_{3}^{+}(x, z, t)$  в свою очередь падает на границу сред 3 и 2 в плоскости  $z = -d_2$ и частично проходит в среду 2:

$$E_{2}^{+}(x, z, t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} (\widehat{D}(t_{0}) \times \widehat{D}\left([2n+1]t_{2} + [2m+2]t_{3} + \frac{d_{2}+z}{c_{2}}\right) \times \widehat{D}(2lt_{2})e_{\psi}^{i}T_{12}R_{23}T_{23}R_{34}T_{32}R_{1}^{n+l}R_{2}^{m} \times \exp[2iw_{2}d_{2}]\exp[2i(w_{2}-w_{3})d_{2}] \times$$
(13a)

 $\times \exp[2iw_3(d_2 + d_3)]) \exp[i\xi x + iw_2 z] d\xi d\Omega dT;$ 

$$E_{2}^{-}(x,z,t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} (\widehat{D}(t_{0}) \times (136))$$

$$\times \widehat{D}\left( [2n+1]t_{2} + [2m+2]t_{3} + \frac{d_{2}+z}{c_{2}} \right) \times \\ \times \widehat{D}(2lt_{2})e_{y}^{i}T_{12}R_{23}T_{23}R_{34}T_{32}R_{21}R_{1}^{n+l}R_{2}^{m} \times \\ \times \exp[2iw_{2}d_{2}]\exp[2i(w_{2}-w_{3})d_{2}] \times \\ \times \exp[2iw_{3}(d_{2}+d_{3})])\exp[i\xi x + iw_{2}z]d\xi d\Omega dT.$$

Поле  $E_2^+(x, z, t)$  (см. формулы (13а)) падает на границу сред 2 и 1, в результате чего появляется компонента  $E_1$ :

$$E_{1}^{+}(x, z, t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{n=0}^{+\infty} (\widehat{D}(t_{0}) \times \widehat{D}([2n+1]t_{2} + [2m+2]t_{3} + [2l+1]t_{2}) \times \widehat{D}(\frac{z}{c_{1}}) e_{y}^{i} T_{12} R_{23} T_{23} R_{34} T_{32} T_{21} R_{1}^{n+l} R_{2}^{m} \times \exp[2iw_{2}d_{2}] \exp[2i(w_{2} - w_{3})d_{2}] \times$$
(14)

 $\times \exp[2iw_2d_2] \exp[2i(w_2 - w_3)d_2] \times$  $\times \exp[2iw_3(d_2 + d_3)]) \exp[i\xi x + iw_2z] d\xi d\Omega dT.$ 

Затем движение поля излучения повторяется:  $E_2^-(x, z, t)$  проходит в среду 3, испытывает переотражения, проходит в среду 4, а также возвращается в среду 2, где вновь испытывает переотражения, проходит в среду 1 и падает на границу сред 2 и 3, а затем все вновь повторяется.

Для получения более компактной записи введем операторы  $\hat{F}_{nm}^{\pm}$  перехода из среды *n* в среду *m*, где верхний индекс показывает, куда движется результирующее поле. В компактной записи:

$$\begin{aligned} \widehat{F}_{12}^{-} &= \widehat{D}(2nt_2)T_{12}R_1^n; \\ \widehat{F}_{12}^{+} &= \widehat{D}([2n+1]t_2)T_{12}R_{23}R_1^n \exp[2iw_2d_2]; \\ \widehat{F}_{32}^{+} &= \widehat{D}(t_3 + 2nt_2)T_{32}R_1^n \exp[i(w_2 - w_3)d_2]; \\ \widehat{F}_{32}^{-} &= \widehat{D}(t_2)R_{21}\widehat{F}_{32}^{+}; \\ \widehat{F}_{31}^{-} &= \widehat{D}(t_2)T_{21}\widehat{F}_{32}^{+}; \\ \widehat{F}_{23}^{-} &= \widehat{D}(t_2 + 2nt_3)T_{23}R_2^n \exp[i(w_2 - w_3)d_2]; \\ \widehat{F}_{23}^{+} &= \widehat{D}(t_3)R_{34} \exp[2iw_3(d_2 + d_3)]\widehat{F}_{23}^{-}; \\ \widehat{F}_{24}^{-} &= \widehat{D}(t_3)T_{34} \exp[i(w_3 - w_4)(d_2 + d_3)]\widehat{F}_{23}^{-}; \\ \widehat{M} &= \widehat{F}_{32}^{+}\widehat{F}_{23}^{+}, \quad \widehat{L} &= \widehat{F}_{32}^{-}\widehat{F}_{23}^{+}. \end{aligned}$$

Тогда выражения для напряженностей электрического поля примут следующий вид:

$$E_{1}^{+}(x,z,t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \int_{-\infty}^{\infty} e_{1}^{+}(\xi,\Omega,T,z,t) \times \\ \times \exp[i\xi x + iw_{1}z]d\xi d\Omega dT; \qquad (16a)$$

$$E_{1}^{-}(x,z,t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e_{1}^{-}(\xi,\Omega,T,z,t) \times \\ \times \exp[i\xi x - iw_{1}z]d\xi d\Omega dT; \qquad (16b)$$

$$E_{2}^{+}(x,z,t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e_{2}^{+}(\xi,\Omega,T,z,t) \times \\ \times \exp[\dots]d\xi d\Omega dT; \qquad (16b)$$

$$E_{2}^{-}(x,z,t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e_{2}^{-}(\xi,\Omega,T,z,t) \times \\ \times \exp[i\xi x - iw_{2}z]d\xi d\Omega dT; \qquad (16b)$$

$$E_{3}^{+}(x,z,t) = \frac{1}{4\pi C_{\psi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e_{3}^{+}(\xi,\Omega,T,z,t) \times \\ \times \exp[i\xi x + iw_{3}z]d\xi d\Omega dT; \qquad (16b)$$

$$\times \exp[i\xi x - iw_{3}z]d\xi d\Omega dT; \qquad (16b)$$

$$\times \exp[i\xi x - iw_{3}z]d\xi d\Omega dT; \qquad (16b)$$

$$\times \exp[i\xi x - iw_{3}z]d\xi d\Omega dT; \qquad (16b)$$

$$x \exp[i\xi x - iw_4 z] d\xi d\Omega dT,$$

где спектральные плотности полей будут иметь следующий вид:

$$e_{1}^{-}(\xi,\Omega,T,z,t) = \widehat{D}\left(t_{0} - \frac{z}{c_{1}}\right)e_{y}^{i};$$

$$e_{1}^{+}(\xi,\Omega,T,z,t) = \widehat{D}\left(t_{0} + \frac{z}{c_{1}}\right) \times$$
(17a)
$$\times \left[R_{12}e_{y}^{i}(\xi,\Omega,T,t) + \sum_{n=0}^{+\infty}\widehat{F}_{31}^{+}\widehat{F}_{23}^{+}\widehat{L}^{n}\widehat{F}_{12}e_{y}^{i}\right];$$

$$e_{2}^{-}(\xi,\Omega,T,z,t) = \widehat{D}\left(t_{0} - \frac{z}{c_{2}}\right)\sum_{n=0}^{+\infty}\widehat{L}^{n}\widehat{F}_{12}e_{y}^{i};$$

$$e_{2}^{+}(\xi,\Omega,T,z,t) = \widehat{D}\left(t_{0} + \frac{d_{2} + z}{c_{2}}\right) \times$$
(176)
$$\times \left[\widehat{F}_{12}^{+}e_{y}^{i} + \sum_{n=0}^{+\infty}\widehat{M}\widehat{L}^{n}\widehat{F}_{12}e_{y}^{i}\right];$$

$$e_{3}^{-}(\xi,\Omega,T,z,t) = \widehat{D}\left(t_{0} - \frac{d_{2} + z}{c_{3}}\right) \times$$
(17B)

$$\times \sum_{n=0}^{+\infty} \widehat{F}_{23}^{-} \widehat{L}^{n} \widehat{F}_{12}^{-} e_{y}^{i}(\xi, \Omega, T, t);$$

$$e_{3}^{+}(\xi, \Omega, T, z, t) = \widehat{D} \left( t_{0} + \frac{d_{2} + d_{3} + z}{c_{3}} \right) \times$$

$$\times \sum_{n=0}^{+\infty} \widehat{F}_{23}^{+} \widehat{L}^{n} \widehat{F}_{12}^{-} e_{y}^{i};$$

$$e_{4}^{-}(\xi, \Omega, T, z, t) = \widehat{D} \left( t_{0} - \frac{d_{2} + d_{3} + z}{c_{4}} \right) \times$$

$$\times \sum_{n=0}^{+\infty} \widehat{F}_{24}^{+} \widehat{L}^{n} \widehat{F}_{12}^{-} e_{y}^{i}.$$

$$(17B)$$

#### Результаты численных расчетов

Рассмотрим некоторые численные результаты, полученные с использованием приведенных выше выражений для напряженностей электрической компоненты поля в верхнем полупространстве (среда 1). На рис. 2 приведены три графика для напряженностей полей, нормированных на максимум, во временной развертке. Они построены для относительных диэлектрических проницаемостей  $\varepsilon_{1,4} = 1$ ,  $\varepsilon_3 = 6$ ,  $\varepsilon_2 = \{2; 10; 80\}$  и толщины слоев  $d_2 =$  $= d_3 = 0,1$  м. Заметно смещение относительных максимумов амплитуды напряженностей для различных комбинаций диэлектрических проницаемостей.



Рис. 2. Временная развертка нормированных напряженностей электрического поля при изменяющейся величине  $\varepsilon_2$ : 2 (кривая *I*), 10 (2), 80 (3);  $\varepsilon_1 = 1$ ,  $\varepsilon_3 = 6$ ,  $\varepsilon_4 = 1$ ; толщина слоев структуры  $d_2 = d_3 = 0,1$  м



Рис. 3. Временная развертка нормированных напряженностей электрического поля при изменяющейся толщине слоя структуры  $d_2$ , м: 0,1 (*I*), 0,2 (*2*), 0,3 (*3*);  $d_3 = 0,1$  м;  $\epsilon_1 = \epsilon_4 = 1, \epsilon_2 = 4, \epsilon_3 = 80$ 

На рис. 3 приведены еще три графика для нормированных на максимум напряженностей электрического поля во временной развертке. Они построены для одинаковых значений относительных диэлектрических проницаемостей  $\varepsilon_{1,4} = 1$ ,  $\varepsilon_2 = 4$ ,  $\varepsilon_3 = 80$ , толщины второго слоя структуры  $d_3 = 0,1$  м и различных значений толщины ее первого слоя  $d_2$ . Как и на рис. 2, заметно смещение относительных максимумов напряженности поля для различных толщин слоев.

#### Заключение

Итак, в результате проведенного исследования успешно решена задача рассеяния поля импульсного источника на двухслойной структуре с использованием адаптивного интегрального вейвлет-преобразования. Получены расчетные соотношения для полей в различных областях пространства. Представлены предварительные численные результаты, которые наглядно демонстрируют влияние различных параметров на пространственную картину полей электромагнитного излучения от нитевидного источника.

Работа выполнена при поддержке РФФИ конкурс «р\_сибирь\_а» проект № 13-05-98037.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Рыкшин А.Ю., Зацепин П.М. Моделирование рассеяния электромагнитного импульса на диэлектрическом слое // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2009. № 4(88). С. 14–18.

2. Zatsepin P.M., Ulanov P.N., Rykshin A.Yu. Wavelet-transform usage for solving the problem of short electromagnetic pulse scattering by the perfect conductive strip // International Siberian Conference on Control and Communications Proceedings. Krasnoyarsk, 2013.

3. **Ulanov P.N., Zatsepin P.M.** Applying of the wavelet transform to solve the problem of coaxial waveguide pulsed excitation // International Siberian Conference on Control and Communications Proceedings. Krasnoyarsk, 2013.

4. Бреховских Л.М., Годин О.А. Акустика слоистых сред. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит-ры, 1989. 416 с.

5. **Rykshin A., Zatsepin P., Komarov S.** Scattering of electro-magnetic pulse on the impedance strip into the dielectric layer // XIIIth International Conference on Mathematical Methods in Electromagnetic Theory (MMET'2010) Proceedings. 2010. Kiev, Ukraine. 2010.

6. Zatsepin P.M., Rykshin A.Y. Electromagnetic pulse scattering by impedance cylinder // Proceedings of 2008 IEEE Region 8 International Conference on Computational Technologies in Electrical and Electronics Engineering, Sibircon 2008. Novosibirsk, Russia. 2008. Pp. 350-354.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

РЫКШИН Алексей Юрьевич — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры вычислительной техники и электроники Алтайского государственного университета. 656049, Россия, г. Барнаул, пр. Ленина, 61

alexey-r@yandex.ru

ЗАЦЕПИН Павел Михайлович — кандидат физико-математических наук, завидующий кафедрой вычислительной техники и электроники Алтайского государственного университета. 656049, Россия, г. Барнаул, пр. Ленина, 61 zpm@phys.asu.ru

**УЛАНОВ Петр Николаевич** — аспирант кафедры вычислительной техники и электроники Алтайского государственного университета. 656049, Россия, г. Барнаул, пр. Ленина, 61 ulanovpn@gmail.com

## *Rykshin A.Yu., Zatsepin P.M., Ulanov P.N.* THE MODELING OF A SHORT ELECTROMAGNETIC PULSE SCATTERING BY DUAL LAYERS STRUCTURE USING WAVELET TRANSFORM.

In the paper the problem of a short electromagnetic pulse scattering by dual dielectric layers structure has been considered. An incident field was generated by infinitely thread-like source of electric or magnetic current located parallel to the boundaries of layers. The solution was written through the Fourier transform with respect to the spatial coordinates and wavelet transform with respect to the time coordinate. Electromagnetic fields characteristics within the given structure and in the surrounding space were studied.

WAVELET TRANSFORM, PULSE, SCATTERING, TWO-LAYER STRUCTURE.

#### REFERENCES

1. **Rykshin A.Yu., Zatsepin P.M.** Modelirovanie rasseyaniya elektromagnitnogo impulsa na dielektricheskom sloe// St. Petersburg State Polytechnical University Journal : Physics and mathematics, 2009, No. 4(88), pp. 14-18. (rus)

2. Zatsepin P.M., Ulanov P.N., Rykshin A.Yu. Wavelet-transform usage for solving the problem of short electromagnetic pulse scattering by the perfect

conductive strip // 2013 International Siberian Conference on Control and Communications Proceedings. Krasnoyarsk, 2013.

3. Ulanov P.N., Zatsepin P.M. Applying of the wavelet transform to solve the problem of coaxial waveguide pulsed excitation // International Siberian Conference on Control and Communications Proceedings. Krasnoyarsk, 2013.

4. **Brekhovskikh L.M.**, **Godin O.A.** Acoustics of layered media. Moscow: Nauka. Head Ed. Sci. Lit. 1989. 416 p. (rus)

5. **Rykshin A., Zatsepin P., Komarov S.** Scattering of electro-magnetic pulse on the impedance strip into the dielectric layer // XIIIth International Conference on Mathematical Methods in Electromagnetic Theory (MMET'2010) Proceedings. 2010. Kiev, Ukraine. 2010.

6. Zatsepin P.M., Rykshin A.Yu. Electromagnetic pulse scattering by impedance cylinder // Proceedings of 2008 IEEE Region 8 International Conference on Computational Technologies in Electrical and Electronics Engineering, Sibircon 2008. Novosibirsk, Russia. 2008. pp. 350-354.

#### THE AUTHORS

#### **RYKSHIN Alexei Yu.**

Altay State University, 61 Lenin St., Barnaul, 656049, Russia alexey-r@yandex.ru

#### ZATSEPIN Pavel M.

Altay State University, 61 Lenin St., Barnaul, 656049, Russia zpm@phys.asu.ru

#### ULANOV Petr N.

Altay State University, 61 Lenin St., Barnaul, 656049, Russia ulanovpn@gmail.com УДК 623 983

А.Г. Голубев 1, А.С. Смирнов 2

<sup>7</sup> ОАО «Камчатский гидрофизический институт» <sup>2</sup> ОАО «Концерн «ЦНИИ «Электроприбор»

#### РАСЧЕТ ДОПУСТИМОГО УРОВНЯ ШУМОВ ПРИЕМНОГО ТРАКТА В ГИДРОАКУСТИЧЕСКОМ КОМПЛЕКСЕ, СОДЕРЖАЩЕМ АНТЕННУ С ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКИМИ ГИДРОФОНАМИ

Динамический диапазон тракта предварительной обработки (ТПО) сигналов в гидроакустическом комплексе определяется чувствительностью гидрофонов приемной антенны и уровнем внутренних шумов компонентов, входящих в состав этого тракта. При использовании в указанном комплексе приемной антенны с интерференционными волоконно-оптическими гидрофонами в состав ТПО входят оптическая и цифровая компоненты. Статья посвящена методике расчета максимально допустимых внутренних шумов ТПО, приведенных к его входу.

ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫЙ ВОЛОКОННО-ОПТИЧЕСКИЙ ГИДРОФОН, ЧУВСТВИТЕЛЬ-НОСТЬ ГИДРОФОНА, ДИНАМИЧЕСКИЙ ДИАПАЗОН, ВНУТРЕННИЙ ШУМ, АНАЛОГО-ЦИФРОВОЙ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЬ; ПРОСТРАНСТВЕННАЯ ОБРАБОТКА.

#### Введение

Качество функционирования приемного тракта гидроакустического комплекса (ГАК) (и в первую очередь – его динамический диапазон) в значительной степени определяется корректностью выбора совокупности параметров чувствительных элементов антенны (гидрофонов) и аппаратных средств предварительной обработки сигналов. Далее для краткости совокупность последовательно соединенных гидрофонов и указанных аппаратных средств мы называем трактом предварительной обработки (ТПО).

Выбор указанных параметров делается на основе предельно допустимых внутренних шумов ТПО; уровень последних определяют, учитывая ограничение чувствительности гидрофонов, которое обусловлено требуемой верхней границей динамического диапазона.

Решение задачи расчета предельно допустимого уровня внутренних шумов для тракта, содержащего классическую антенну с пьезокерамическими гидрофонами, проработано достаточно глубоко. Вместе с тем, в течение двух последних десятилетий в качестве перспективного направления проектирования компонентов гидроакустических антенн рассматриваются волоконно-оптические интерферометрические гидрофоны (ВОИГ) [1 - 3].

Актуальность данного направления проектирования определяется несомненными полезными свойствами волоконнооптических интерферометрических технологий для построения гидроакустических антенн. К преимуществам такого рода относятся низкая отражательная способность антенны, ее малый вес, отсутствие электронной аппаратуры в забортном пространстве корабля-носителя комплекса и, как следствие этого, высокая ремонтопригодность, а также дешевизна (в перспективе).

Принцип действия ВОИГ основан на том, что падающие на них акустические сигналы изменяют фазу светового излучения, распространяющегося по волоконному световоду, который размещен в чувствительном элементе. Порожденные акустическим сигналом флуктуации фазы в интерферометрической схеме преобразуются в фазомодулированные (ФМ) колебания интенсивности, которые регистрируются фотодетектором. Эту часть ТПО мы далее именуем оптической.

После аналого-цифрового преобразования процессор формирует сигнал, повторяющий по форме акустический, принятый
гидрофоном [4]. Эту часть ТПО мы далее именуем цифровой.

Цель настоящей работы — разработка методики расчета параметров ТПО, совокупность которых должна обеспечить его требуемый динамический диапазон.

Считаем, что этот диапазон задан нижней и верхней (соответственно  $U_{\rm H}(f_{\rm a})$  и  $U_{\rm g}(f_{\rm a})$ [Па·(Гц)<sup>-1/2</sup>]) границами уровня акустического сигнала, относящимися к оговоренной частоте анализа (как правило, эта частота равна либо 1 кГц, либо верхнему значению частоты рабочего диапазона). Здесь и далее под уровнем сигнала подразумевается корень квадратный из спектральной плотности его мощности.

Для обеспечения работы приемного тракта ГАК при заданных требованиях к минимальному уровню принимаемого акустического сигнала  $U_{_{\rm H}}$  и его динамическому диапазону

 $D = 20 \lg(U_{R}(f_{a}) / U_{H}(f_{a}))$  (дБ)

необходимо определить оптимальное сочетание таких параметров, как чувствительность гидрофона  $\gamma$  (рад/Па), которую будем считать частотно-независимой, и максимально допустимые уровни шумов оптической и цифровой частей ТПО, приведенные ко входу гидрофона.

Решению первой из указанных задач, а именно задачи расчета оптимальной (предельной) чувствительности гидрофонов, посвящена работа [5].

Настоящая статья посвящена разработке методики расчета допустимых уровней шумов оптической и цифровой частей ТПО при оптимальной чувствительности этого гидрофона и заданных границах динамического диапазона тракта  $U_{\mu}(f_a)$  и  $U_{\mu}(f_a)$ .

## Постановка задачи расчета оптимальных параметров ТПО сигналов

Приемная гидроакустическая антенна может содержать до нескольких тысяч гидрофонов. В связи с этим разработчик антенны вынужден разделять всю совокупность гидрофонов на группы, содержащие по µ гидрофонов, и обеспечить размещение каждой группы на одном оптоволокне, т. е. их мультиплексирование. Для ВОИГ наиболее востребованной является технология временно́го мультиплексирования. Она подразумевает, что информация от каждого гидрофона группы позиционируется в специально выделенном интервале времени внутри периода опроса гидрофонов [1-3, 6]. При этом после демультиплексирования формируются временные отсчеты, несущие информацию (в законе фазовой модуляции) о выборках акустических сигналов, принимаемых каждым из группы гидрофонов. При этом частота дискретизации сигнала в каждом гидрофоне равна частоте опроса группы гидрофонов  $f_{onp}$ .

Подробное описание объекта исследования приведено также в работе [5], которая посвящена методике расчета предельного значения чувствительности гидрофона γ<sub>0</sub> (рад/Па) (оно же оптимальное). Эта методика позволяет определить величину ү в применении к ожидаемой форме спектра принимаемого сигнала и фиксированной частоте опроса гидрофонов  $f_{onp}$  при заданных параметрах: его минимальном приведенном уровне  $U_{\mu}(f_{z})$  и динамическом диапазоне D. Следует отметить, что величина *f*<sub>опр</sub> не есть требование, которое предъявляется потребителем к ТПО (как это имеет место с границами динамического диапазона); она является таким же параметром ТПО, как и прочие, подлежащие оптимизации. При этом в части выбора параметра *f*<sub>опр</sub> имеют место ограничения, связанные, в частности, с величиной µ и различиями во времени распространения оптического сигнала по оптоволокну от начала этого волокна в первом гидрофоне из группы до его конца в последнем. В связи с этим в рамках настоящей статьи задача определения оптимальной величины  $f_{onp}$  не рассматривается, а сам этот параметр задается как одно из требований к ТПО.

Таким образом, в качестве исходной известна зависимость условно оптимальной (т. е. при условии фиксации величины  $f_{onp}$ ) чувствительности гидрофона  $\gamma_0(U_{\rm H}(f_{\rm a}), D, f_{onp})$ , оговорена величина  $f_{onp}$  (она может рассматриваться как варьируемый параметр) и заданы требования к величине динамического диапазона *D*. Требуется определить допустимый суммарный уровень шумов

оптической и цифровой частей ТПО.

## О норме на величину уровня внутренних шумов ТПО

Расчетные соотношения для определения максимально допустимого уровня внутренних шумов ТПО, полученные в настоящем разделе статьи, по сути универсальны. Они имеют отношение к ТПО с приемной антенной с произвольными гидрофонами и, в частности, с ВОИГ.

Считаем, что уровень внутреннего шума ТПО аддитивно добавляется к акустическому шуму моря. Тогда при допустимых технических потерях (ТП) на частоте  $f_a - T\Pi(f_a)$ (дБ), обусловленных внутренними шумами ТПО, необходимо выполнение условия

$$\begin{aligned} & T\Pi(f_a) = 10 \cdot \lg\{[P_{\text{unak}}(f_a) + \zeta(f_a) \times \\ & \times U^2_{\text{unak}}(f_a)] \cdot P^{-1}_{\text{unak}}(f_a)\} \leq T\Pi_{\text{non}}(f_a), \end{aligned}$$

где все величины даны при работе на частоте анализа;  $P_{\rm ш \ a\kappa}(f_{\rm a})$  — отсчет энергетического спектра акустического шума при его заданном минимальном уровне;  $U^2_{\rm ш \ вн \ вx}(f_{\rm a})$  — отсчет энергетического спектра внутреннего шума ТПО, приведенного ко входу этого ТПО;  $\zeta(f_{\rm a})$  — отношение выигрыша по акустическому шуму к таковому по внутреннему шуму ТПО (имеется в виду выигрыш от группы задач пространственной обработки, реализуемой после ТПО);  $T\Pi_{\rm доn}(f_{\rm a})$ , дБ — допустимая величина технических потерь ТПО.

Из условия (1) следует соотношение

$$U_{\text{III BH BX}}^{2}(f_{a}) \leq \zeta^{-1}(f_{a}) \cdot [10^{0, 1 \cdot \text{TI}_{\text{gon}}(f_{a})} \times P_{\text{III ak}}(f_{a}) - P_{\text{III ak}}(f_{a})].$$
(2)

Актуальность учета параметра  $\zeta(f_a)$  при решении рассматриваемой задачи иллюстрируется следующим расчетным примером.

**Пример расчета.** Рассмотрим плоскую антенну размером

 $5\lambda_a \times 5\lambda_a$ ,

где  $\lambda_a$  – длина волны на частоте анализа.

Пусть эта антенна содержит  $N_r = 11 \times 11 = 121$  гидрофонов, расположенных по горизонтали и вертикали, с шагом  $0.5\lambda_a$ . Относительная величина площади рабочего

пятна такой антенны составляет  $s = 25\lambda_{0}^{2}$ . При этом ее коэффициент концентрации, характеризующий величину выигрыша в отношении сигнал/шум (в разах) по мощности акустической помехи (выигрыш за счет пространственной фильтрации) на частоте анализа  $f_{\rm a}$  (Гц), при  $\lambda_{\rm a} = 1500/f_{\rm a}$  (м) определяется как  $K = 2\pi s/\lambda_{\rm a}^2 \approx 157$  [6]. Выигрыш же в отношении сигнал/шум по мощности внутренних шумов ТПО при этом составляет всего  $N_r = 121$  раз. Это соотношение выигрышей приводит к перераспределению уровней акустического и внутреннего шумов в результате пространственной фильтрации в «пользу» этого внутреннего шума, причем коэффициент перераспределения составляет 1,3 раза. Если же антенна лежит на экране, который снижает уровень шума моря в два раза и не влияет на уровень внутреннего шума ТПО, то коэффициент указанного перераспределения составляет уже 2,6 раза. Если же шаг между смежными гидрофонами превышает величину 0,5 $\lambda_2$ , например в  $\sqrt{2}$  раз (это вполне допустимо на практике для верхних частот рабочего диапазона, особенно в части шага по вертикали), то такое превышение приводит к дополнительному перераспределению уровней в «пользу» внутреннего шума еще в два раза. Наконец, если учитывать, что при работе в реальных условиях, когда шум моря анизотропен по вертикали, то перераспределение уровней в «пользу» внутреннего шума, как правило, составляет еще два раза.

В итоге уровень внутреннего шума в рассмотренном примере, за счет всех перечисленных выше факторов, благодаря реализации процедуры пространственной фильтрации (после предварительной обработки), будет «подчеркнут» относительно уровня акустического шума на величину порядка 10. Это и есть величина  $\zeta(f_a)$ , прогнозируемая в данной ситуации.

Таким образом, для расчета допустимого уровня внутренних шумов ТПО  $U_{\text{ш вн вх}}(f_{a})$  при выбранной частоте анализа  $(f_{a})$ , допустимых технических потерях ТП $(f_{a})$ , а также прогнозируемой величине  $\zeta(f_{a})$  и заданном уровне шумов моря  $P_{\text{ш ак}}(f_{a})$ необходимо решить неравенство (2) относительно искомой величины  $U_{\text{ш вн вх}}(f_{a})$ . Решение данной задачи целесообраз-

Решение данной задачи целесообразно проводить на верхней частоте рабочего диапазона  $f_{\rm B}$ , которая относится к наиболее проблемной в плане обеспечения требуемого уровня внутренних шумов ТПО, либо на его среднегеометрической частоте.

Для допустимого уровня внутренних шумов имеем следующее выражение (здесь и далее аргумент частоты  $f_{p}$  опущен):

$$U_{\rm III \ BH \ BX} = \sqrt{U_{\rm on \ BX}^2 + U_{\rm KB \ BX}^2} \ [\Pi a \cdot (\Gamma {\rm II})^{-1/2}], \ (3)$$

где  $U_{\text{оп вх}}$ ,  $U_{\text{кв вх}}$  — уровни оптической и цифровой частей ТПО, причем шум цифровой части — шум квантования в АЦП.

Методики расчетов (соответствующие расчетные соотношения) величин  $U_{\text{оп вх}}$  и  $U_{\text{кв вх}}$  представлены ниже.

## Анализ уровня внутренних шумов оптической части тракта

Ошибки фазового детектирования являются следствием конечности отношения сигнал/шум  $q_{\rm dn}$  на выходе фотоприемника (т. е. на выходе линейной части оптического тракта). Эти ошибки формируются в цифровой части ТПО в ходе выполнения операции фазового детектирования, однако по признаку местонахождения источников шумов, порождающих эти ошибки, мы их относим к внутренним шумам оптической части этого ТПО. Известно [8], что стандарт флуктуаций (или ошибки измерения) фазы при отношении сигнал / шум по напряжению на выходе линейной части тракта  $q_{\phi n} >> 1$ , определяется как  $\sigma_{\phi} \sim q_{\phi n}^{-1}$ (рад). Указанное отношение сигнал/шум *q*<sub>фп</sub> обусловлено уровнем сигнала, излучаемого оптическим источником, коэффициентом ослабления сигнала при его распространении в оптической части ТПО, а также уровнями шумов оптического источника и фотоприемника. Условие большого отношения сигнал/шум, т. е.  $q_{\phi n} >> 1$ , на практике выполняется, поскольку уровень оптического сигнала, принимаемого фотоприемником, много больше уровней шумов как этого фотоприемника, так и оптического источника (при правильном проектировании).

Следует отметить, что отношение  $q_{\rm dm}$ определяется исключительно качествами оптического источника и фотоприемника и не зависит от уровня принимаемого акустического сигнала. Данное обстоятельство связано с тем, что фаза оптического сигнала, определяемая принимаемым акустическим сигналом, является неэнергетическим параметром. Уровни шумов (отношения сигнал/шум) оптического источника И фотоприемника определяются качествами этих компонент ТПО, и выполнение требований к этим уровням достигается путем подбора оптического источника (лазера) и фотоприемника надлежащего качества.

В связи с тем, что искомый сигнал (результат фазовой демодуляции) формируется с частотой  $0.5f_{onp}$ , далее полагаем, что уровни шумов лазера и фотоприемника также определены с «приведением» к величине полосы частот ( $0 - 0.5f_{onp}$ ) и в этой полосе от частоты не зависят. При этом уровень внутренних шумов оптической части тракта, приведенный ко входу гидрофона, определяется следующим образом (аргумент частоты опущен):

$$U_{\text{on BX}} = \gamma_0^{-1} \cdot (0, 5 \cdot f_{\text{onp}})^{-0,5} \times \times q_{\phi_n}^{-1} [\Pi a \cdot (\Gamma \mathfrak{U})^{-1/2}].$$
(4)

### Анализ уровня внутренних шумов цифровой части ТПО

Считаем, что уровень внутренних шумов цифровой части ТПО, приведенных ко входу гидрофона, определяется только эффектом амплитудного квантования. При этом возможный шум усилителя в составе АЦП учитывается путем расчета уровня шума квантования при разрядности АЦП, соответствующей количеству его корректных разрядов. Такой подход к решению рассматриваемой задачи оправдан тем, что при указании количества корректных разрядов АЦП его разработчик учитывает также уровень внутренних шумов усилителя, входящего в состав АЦП.

Считаем, что АЦП содержит  $n_{\kappa}$  корректных разрядов при напряжении питания  $U_{\text{AUII}}$ . В этом случае «цена» младшего разряда определяется как  $\Delta = U_{\text{AUII}} / 2^{n_{\kappa}}$ .

Стандарт шума квантования (как практически равномерно распределенной случайной величины) следует выражению

$$\sigma_{_{\rm KB}} = \Delta \cdot (12\varsigma)^{-1/2} \approx 0.3 \Delta \cdot (\varsigma)^{-1/2},$$

где *с* – количество выборок, выполняемых АЦП на интервале длительности импульса опроса сигнала от одного ВОИГ при их последующем осреднении.

Следует отметить, что параметр с ограничен сверху величиной отношения длительности импульса опроса гидрофона к интервалу корреляции шумов фотоприемника.

При этом уровень шумов квантования (приведенный ко входу гидрофона) определяется как

$$U_{\text{KB BX}} \approx \gamma_0^{-1} \cdot 0, 3 \cdot U_{\text{aun}} \cdot 2^{-n_{\text{K}}} \times (0, 5 \cdot f_{\text{onp}} \cdot \varsigma)^{-0.5} [\Pi a \cdot (\Gamma \mu)^{-1/2}].$$
(5)

Суммарный же уровень внутренних шумов ТПО  $U_{\text{ш вн вх}}$  определяется согласно выражению (3).

1. Волоконно-оптические датчики. Вводный курс для инженеров и научных работников. Под ред. Э. Удда. М.: Техносфера, 2008. 520 с.

2. Shizhuo Y., Ruffin P.B., Yu Francis T.S. Fiber optic sensor. Talor & Francis Group, 2008. P. 479.

3. **Kirkendall C.K., Dandridge A.** Overview of high performance fiber-optic sensing // J. Phys. D: Appl. Phys. 2004. Vol. 37. P. R197-R216.

4. Лиокумович Л.Б. Волоконно-оптические интерферометрические измерения. Ч. 2. Волоконный интерферометрический чувствительный элемент. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2007. 68 с.

5. Голубев А.Г., Смирнов А.С. О расчете верхней границы чувствительности интерфе-

#### Заключение

В работе приведены расчетные соотношения, позволяющие сформулировать требования к оптической и цифровой компонентам тракта предварительной обработки сигналов, включающего волоконнооптические интерферометрические гидрофоны. При этом требования относятся к уровню их внутренних шумов. Выполнение этих требований должно гарантировать необходимое (контролируемое) качество тракта в отношении технических потерь помехоустойчивости.

Предложенный анализ можно применять, например, при разработке сейсморазведочных гибких буксируемых протяженных гидроакустических антенн, которые используются для поиска полезных ископаемых.

Статья подготовлена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 11--08-01097-а и 12-08-00511-а.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

ренционных волоконно-оптических гидрофонов приемной гидроакустической антенны // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Информатика. Телекоммуникации. Управление. 2012. № 6 (162). С. 73–80.

6. Cranch G.A., Nash P.J. Large-scale multiplexing of interferometric fiber-optic sensor using TDM and DWDM // J. Lightwave Technology. 2001. Vol. 19. No. 5. pp. 687-699.

7. Смарышев М.Д., Добровольский Ю.Ю. Гидроакустические антенны. Л.: Судостроение. 1984. 300 с.

8. Левин Б.Р. Теоретические основы статистической радиотехники. 3-е изд. М.: Радио и связь, 1989. 654 с.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ГОЛУБЕВ Анатолий Геннадиевич** — доктор технических наук, заместитель генерального директора *ОАО* «Камчатский гидрофизический институт» по научной работе.

197081, Россия, г. Санкт-Петербург, Липовая аллея, 9 agg300@mail.ru

СМИРНОВ Алексей Сергеевич — ведущий инженер ОАО «Концерн ЦНИИ «Электроприбор»». 197046, Россия, г. Санкт-Петербург, Малая Посадская ул., 30 hydroacoustics@mail.ru

*Golubev A.G., Smirnov A.S.* THE CALCULATION OF A TOLERABLE NOISE LEVEL FOR THE RECEIVING SECTION IN THE UNDERWATER ACOUSTIC UNIT CONTAINING AN ANTENNA WITH FIBRE-OPTIC HYDROPHONES. The dynamic range of the section for signals pre-processing in the underwater acoustic unit is conditioned by hydrophones sensitivity of the receiving antenna and by the internal noise level of operative assemblies composing the section. When we use a receiving antenna with interferometric fiber-optic hydrophones in that complement, optical and digital components are parts of the section. Our paper focuses on the calculation technique to get tolerable internal noise level reduced to the hydrophone input value. The technique is concerned with the underwater-acoustic unit containing receiving antenna with interferometric fiber-optic hydrophones.

INTERFEROMETRIC FIBER-OPTIC HYDROPHONE, HYDROPHONE SENSITIVITY, DYNAMIC RANGE, INTERNAL NOISE, ANALOGUE-DIGINAL CONVERTER, SPATIAL PROCESSING.

#### REFERENCES

1. Volokonno-opticheskie datchiki. Vvodnyy kurs dlya inzhenerov i nauchnykh rabotnikov. Pod red. E.Udda. Moscow, Tekhnosfera, 2008. 520 p. (rus)

2. Shizhuo Y., Ruffin P.B., Yu Francis T.S. Fiber Optic Sensor. Talor & Francis Group, 2008. P. 479.

3. Kirkendall C.K., Dandridge A. Overview of high performance fibre-optic sensing. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 2004, Vol. 37, pp. R197-R216.

4. Liokumovich L.B. Volokonno-opticheskie interferometricheskie izmereniya. Ch. 2. Volokonnyy interferometricheskiy chuvstvitel'nyy element. St. Petersburg, Polytechnical University Press, 2007. 68 p. (rus)

5. Golubev A.G., Smirnov A.S. O raschete

verkhney granitsy chuvstvitel'nosti interferentsionnykh volokonno-opticheskikh gidrofonov priemnoy gidroakusticheskoy antenny. *St Petersburg State Polytechnical University Journal: Physics and Mathematics*, 2012, No. 6 (162), pp. 73-80. (rus)

6. Cranch G.A., Nash P.J. Large-scale multiplexing of interferometric fiber-optic sensor using TDM and DWDM. *J. Lightwave Technology*, 2001, Vol. 19, No. 5, pp. 687-699.

7. Smaryshev M.D., Dobrovol'skiy Yu.Yu. Gidroakusticheskie antenny. Leningrad, Sudostroenie, 1984, 300 p. (rus)

8. Levin B.R. Teoreticheskie osnovy statisticheskoy radiotekhniki. 3-e izd. Moscow, Radio i svyaz', 1989. 654 p. (rus)

#### THE AUTHORS

GOLUBEV Anatoly G. Kamchatka Hydrophysical Institute JSC 9 Lipovaya Ave., St. Petersburg, 197081, Russia agg300@mail.ru.

#### **SMIRNOV** Alexey S.

State Research Center of the Russian Federation Concern CSRI Elektropribor, JSC 30, Malaya Posadskaya St., St. Petersburg, 197046, Russia hydroacoustics@mail.ru

УДК 621.391

А.Г. Голубев, П.А. Молчанов

ОАО «Камчатский гидрофизический институт»

### АЛГОРИТМЫ ОЦЕНИВАНИЯ ИМПУЛЬСНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ МНОГОЛУЧЕВОГО КАНАЛА СВЯЗИ С ТРАНСФОРМАЦИЕЙ РАБОЧЕГО ДИАПАЗОНА ЧАСТОТ

При передаче данных в многолучевом канале связи, как правило, по реакции канала на испытательный импульс (ИИ) осуществляется предсказание формы каждого принимаемого информационного сигнала (ИС). Во избежание межсимвольной интерференции в последовательности ИИ целесообразна ее передача со скачкообразным изменением несущей частоты. При этом возникает необходимость оценивания импульсной реакции канала в полосе частот ИС по реакции канала на последовательность ИИ, передаваемых в разных диапазонах частот, в общем случае не совпадающих с полосой частот ИС. Настоящая статья посвящена алгоритмам такого оценивания.

МНОГОЛУЧЕВОЙ КАĤАЛ, ИСПЫТАТЕЛЬНЫЙ ИМПУЛЬС, АЛГОРИТМ ОЦЕНИВАНИЯ, ПОГРЕШНОСТЬ ОЦЕНИВАНИЯ, ИМПУЛЬСНАЯ РЕАКЦИЯ, КОРРЕЛЯЦИЯ, АВТОКОРРЕЛЯ-ЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ.

#### Введение

Большинство каналов связи сравнительно большой протяженности характеризуется многолучевым распространением. Форма передаваемого сигнала при таком распространении искажается случайным образом, что приводит к существенному снижению эффективности когерентной обработки при приеме. В таких случаях применяется, в частности, так называемая «система с испытательным импульсом и предсказанием» (СИИП) [1, 2, 8]. Реализация СИИП предполагает несколько функций:

передачу информационных сигналов (ИС), соответствующих символам передаваемого алфавита;

передачу испытательных импульсов (ИИ), не содержащих информации;

оценивание по ИИ импульсной характеристики канала распространения (ИХК);

предсказание (прогноз) формы каждого из выходных ИС, т. е. ИС на выходе канала связи.

Указанный прогноз каждого из выходных информационных сигналов осуществляется посредством вычисления свертки соответствующего исходного ИС (т. е. сигнала на входе канала связи) с ИХК.

Чтобы обеспечить необходимую точ-

ность оценивания ИХК, испытательные импульсы должны передаваться многократно (непрерывно), однако при этом (особенно в случае их передачи при повторяющейся форме) происходят искажения формируемой оценки ИХК, вызванные эффектом, аналогичным межсимвольной интерференции (МСИ). Последняя имеет место при передаче через многолучевой канал информационных сигналов. Для исключения МСИ необходимо, например, передавать последовательность испытательных импульсов со скачкообразным изменением несущей частоты [3, 9]. При этом для накопления (осреднения) оценок ИХК, сформированных по разным испытательным импульсам (они передаются на разных частотах), необходимо «привести» эти оценки к одному частотному диапазону, а именно к диапазону (либо диапазонам) передачи информационных сигналов. Данная задача никем до нас не рассматривалась.

Настоящая статья посвящена решению указанной задачи, а именно разработке алгоритма оценивания ИХК с трансформацией диапазона частот, в котором по каждому испытательному импульсу формируется оценка ИХК (далее для краткости именуем их алгоритмами трансформации).

## Модель многолучевого канала и используемая терминология

Моделями канала с рассеянием по времени могут служить соответствующие четырехполюсники с переменными параметрами, характеризующиеся импульсными характеристиками, зависящими от времени [4, 5, 10]. При этом принимаемый сигнал есть свертка переданного сигнала с ИХК. Импульсная характеристика четырехполюсника определяется как его реакция на входное воздействие в виде б-функции; такое определение соответствует ИХК в бесконечной полосе частот. Применительно к многолучевому каналу, по которому передаются сигналы в ограниченной полосе частот, оправдано рассмотрение модели, содержащей в качестве входной цепи узкополосный фильтр, полоса пропускания которого совпадает с частотным диапазоном передаваемого сигнала [4]. Импульсная характеристика такого канала (его узкополосной модели) есть свертка ИХК с импульсной указанного полосового характеристикой фильтра; последняя же практически совпадает с автокорреляционной функцией (АКФ) передаваемого сигнала. Определенную таким образом ИХК будем называть УИХК (импульсная характеристика канала, определенная в узкой полосе частот).

Оценка УИХК в диапазоне частот испытательного импульса S(n) (здесь и далее n - индекс аргумента дискретного времени) вычисляется как свертка принимаемого сигнала с этим импульсом (см., например, работу [3]). Нетрудно установить, что результат оценивания указанной УИХК (с точностью до реализации аддитивного шума) есть свертка ИХК с АКФ испытательного импульса S(n).

#### Постановка задачи

Задача настоящей статьи — разработка и сравнение алгоритмов пересчета оценки УИХК, полученной в диапазоне частот испытательного импульса  $S_1(n)$ , в оценку импульсной характеристики этого же канала в диапазоне частот ИС или испытательного импульса  $S_2(n)$ . Последний передается в полосе частот, не совпадающей с таковой для сигнала  $S_1(n)$ .

Эта задача ставится следующим образом. Имеем следующие исходные соотношения:

$$y_{1}(n) = z(n) \otimes S_{1}(M - n) =$$

$$= AK\Phi_{1}(n) \otimes h(n) + N_{1}(n);$$

$$\hat{y}_{2}(n) = z(n) \otimes S_{2}(M - n) =$$

$$= AK\Phi_{2}(n) \otimes h(n) + N_{2}(n),$$
(1)

где  $\hat{y}_1(n)$ ,  $\hat{y}_2(n)$  — оценки УИХК1 и УИХК2, которые были бы сформированы в случаях передачи испытательных импульсов  $S_1(n)$  и  $S_2(n)$  при их взаимно-корреляционной обработке соответственно; z(n) — реализация сигнала на входе приемника;  $\otimes$  — операция свертки;  $M = f_{a} \tau (f_{a}, \tau$  — частота дискретизации каждого из результатов оценивания УИХК и длительность каждого из сигналов  $S_1(n)$  и  $S_2(n)$ ; АК $\Phi_{1,2}(n)$  — АК $\Phi$  сигналов  $S_{1,2}(n)$ ; h(n) — ИХК;  $N_1(n)$ ,  $N_2(n)$  — реализации шума или ошибки оценивания соответствующих УИХК.

Вместо оценки УИХК1  $y_1(n)$  решение задачи может быть также основано непосредственно на анализе наблюдаемой приемником реализации сигнала z(n).

Задана форма каждого из испытательных импульсов  $S_{1,2}(n)$ , причем вместо одного из них можно рассмотреть и информационный сигнал. Фактически передан испытательный импульс  $S_1(n)$ , и на основе взаимно-корреляционной обработки этого импульса сформирована оценка УИХК1  $y_1(n)$ ; при этом форма ИХК h(n)неизвестна. Требуется вычислить оценку УИХК2, близкую по форме к той, которая была бы сформирована в случае передачи испытательного импульса  $S_2(n)$  на основе его взаимно-корреляционной обработки (это есть оценка  $y_2(n)$ ). Другими словами, требуется пересчитать оценку УИХК из диапазона частот испытательного импульса  $S_1(n)$  в аналогичную оценку УИХК (того же канала) в диапазоне частот испытательного импульса  $S_2(n)$ ; такую пересчитанную оценку обозначаем как  $y_{1\rightarrow 2}(n)$ .

## Варианты алгоритма трансформации (пересчета) рабочего диапазона частот

В рамках настоящей работы предлагаются и анализируются три варианта алго-

ритма трансформации рабочего диапазона частот (алгоритмы 1 – 3).

Алгоритм 1. Это алгоритм с промежуточным оцениванием непосредственно ИХК. Согласно этому варианту алгоритма, на основе заданной оценки УИХК1  $y_1(n)$  реализуется прямое вычисление оценки ИХК  $\hat{h}(n)$  и далее вычисляется искомая оценка УИХК2 как свертка:

$$\hat{y}_{1\to 2}(n) = AK\Phi_2(n) \otimes \hat{h}(n).$$
(2)

При оценивании ИХК последняя рассматривается как решетчатая функция, представляющая собой последовательность бесконечно коротких импульсов, амплитуды которых и расположение на временной оси соответствуют амплитудам и относительным задержкам лучей, приходящих в точку приема. В этом случае формирование оценки ИХК сводится к следующим этапам:

нахождение оценки стандарта шума  $\sigma_{\rm m}$  в реализации  $\hat{y}_1(n)$ ;

вычисление величины порога обнаружения сигнала в луче  $\Pi = k \hat{\sigma}_{\mathfrak{m}} (k - \mathsf{регули-}$ руемая константа);

фиксация всех отсчетов массива  $y_1(n)$ , превышающих порог П (т. е. принятие решений об обнаружении сигналов в лучах);

оценивание амплитуд этих отсчетов и их положения на оси времени (т. е. амплитуд и положения на оси времени сигналов, приходящих в точку приема в отдельных лучах).

Эмпирически установлена целесообразная величина константы: k = 4,5. Оцениванию стандарта шума предшествует отбор 10 % наибольших по уровню отсчетов из массива  $\hat{y}_1(n)$  и дальнейшее их удаление из этого массива. Затем искомая оценка стандарта шума  $\hat{\sigma}_{\rm m}$  классически вычисляется по массиву оставшихся отсчетов. Оценивание амплитуд  $h_i$  и временного положения  $t_i$ лучей (отсчет времени выполняется относительно середины ИХК) производится на основе соответствующей параболической интерполяции следующим образом [6]:

$$h_{i} = y_{1}(n_{i}) - 0,25[y_{1}(n_{i}+1) - y_{1}(n_{i}-1)]\Delta t;$$
$$t_{i} = \frac{(n_{i}+\Delta t)}{f_{A}};$$

$$\Delta t = 0, 5[\hat{y}_1(n_i - 1) - \hat{y}_1(n_i + 1)] / [\hat{y}_1(n_i + 1) - \hat{y}_1(n_i) + \hat{y}_1(n_i - 1)],$$
(3)

где  $n_i$  — номер временного отсчета, соответствующего моменту обнаружения сигнала в *i*-м луче.

Алгоритм 2. Это алгоритм, следующий из соотношений (1) с учетом теоремы о свертке [7]. При сформированной оценке УИХК1  $\hat{y}_1(n)$  вычисление искомой оценки УИХК2  $y_2(n)$  реализуется следующим образом:

$$\hat{y}_{1\to 2}(n) = O \Box \Pi \Phi \{ Y_2(k) \};$$
(4)  
$$Y_2(k) = S_1(k) \hat{y}_1(k) / S_2(k),$$

где ОДПФ{ $Y_2(k)$ } — результат выполнения операции обратного дискретного преобразования Фурье над массивом спектральных отсчетов  $Y_2(k)$ ;  $S_1(k)$ ,  $S_2(k)$ ,  $\hat{y}_1(k)$  — результаты вычисления операции дискретного преобразования Фурье от реализаций сигналов  $S_1(n)$  и  $S_2(n)$ , а также оценки УИХК1  $\hat{y}_1(n)$ .

Все спектры, входящие в соотношения (4), — это спектры соответствующих комплексных огибающих.

Следует отметить, что этот вариант алгоритма (в отличие от двух остальных) не связан с ограничением модели многолучевого канала. Ограничение вызвано предположением, что ИХК представляет собой решетчатую функцию.

Алгоритм 3. Этот вариант представляет собой комбинацию двух остальных. Он предусматривает вычисление оценки  $y_{1\rightarrow 2}(n)_{np}$  по формуле (3), но эта оценка рассматривается только как промежуточная (в отличие от алгоритма 2). Далее над ней выполняются все операции, которые в алгоритме 1 выполняются над оценкой  $y_1(n)$  с получением оценки ИХК  $\hat{h}(n)$ . После этого искомая оценка  $y_{1\rightarrow 2}(n)$  формируется по формуле (2).

#### Методика эмпирического анализа качества алгоритмов трансформации рабочего диапазона частот

Критерием качества алгоритма трансформации служит величина отношения K = k1 / k0. Величины k0 и k1 определяются как

$$k1 = \frac{\sum_{n} \hat{y}_{1 \to 2}(n) \hat{y}_{2 \ 0}(n)}{\sqrt{\sum_{n} \hat{y}_{1 \to 2}^{2}(n) \sum_{n} \hat{y}_{2 \ 0}^{2}(n)}};$$

$$k0 = \frac{\sum_{n} \hat{y}_{2}(n) \hat{y}_{2}^{*}(n)}{\sqrt{\sum_{n} \hat{y}_{2}^{*}(n) \sum_{n} \hat{y}_{2}^{*}(n)}}.$$
(5)

Здесь k1 — значение нормированной корреляции между оценкой УИХК2  $\hat{y}_{1\to 2}(n)$ , пересчитанной из диапазона частот сигнала  $S_1(n)$  в диапазон частот сигнала  $S_2(n)$ , и ее условно эталонной формой  $\hat{y}_{20}(n)$ , которая бы имела место при оценивании непосредственно в диапазоне частот сигнала  $S_2(n)$ . (Условно эталонная величина оценки УИХК2  $\hat{y}_{20}(n)$  формируется путем вычисления свертки

$$y_{2,0}(n) = AK\Phi_2(n) \otimes h(n)$$

и добавления к ней реализации аддитивного шума); k0 — значение нормированной корреляции, вычисляемой (в отличие от значения k1) между двумя ее эталонными формами  $\hat{y'}_2(n)$  и  $\hat{y''}_2(n)$ , совпадающими между собой с точностью до реализаций аддитивного шума.

Все упомянутые реализации аддитивного шума не корреллированы между собой.

В процессе анализа качества задается исходная ИХК h(n), нормированная так, что ее максимум равен единице. Затем вычисляется свертка этой ИХК с АКФ<sub>1</sub> сигнала  $S_1(n)$ . Результат вычисления указанной свертки  $y_1(n)$  суммируется с реализацией шума, и в итоге получается оценка  $\hat{y}_1(n)$ УИХК1 в диапазоне частот сигнала  $S_1(n)$ . Уровень (стандарт) шума  $\sigma_{\mu}$  варьируется. Далее моделируется собственно алгоритм пересчета, в результате чего формируется искомая оценка УИХК2, приведенная к диапазону частот сигнала  $S_2(n)$  (т. е. оценка  $\hat{y}_{1\rightarrow 2}(n)$ ).

Представленное выше определение критерия качества алгоритмов трансформации рабочего диапазона частот обосновывается однозначной связью указанной величины *К* применительно к СИИП (в широком круге

вариаций этого метода передачи данных) с потерями в помехоустойчивости. Последние определяются выражением 10 lg K. Под потерями в данном случае подразумевается разница в пороговом отношении сигнал/ шум на входе приемника (декодера); она имеет место при оценивании УИХК непосредственно в требуемом диапазоне частот сигнала  $S_{2}(n)$  (в случае передачи испытательного импульса или сигнала  $S_2(n)$ , а также при использовании одного из рассматриваемых алгоритмов пересчета этой оценки из диапазона частот сигнала (испытательного импульса) S<sub>1</sub>(n) в требуемый диапазон частот испытательного импульса  $S_{2}(n)$ . Актуальность такого пересчета как альтернативы оценивания УИХК непосредственно в требуемом диапазоне частот оговорена во введении.

## Результаты анализа качества алгоритмов трансформации

Анализ качества алгоритмов трансформации ИХК произведен в соответствии с изложенной выше методикой для двух вариантов исходной ИХК.

Рассматриваемые варианты исходной ИХК служат примерами, характеризующими сравнительно простую (рис. 1, а) и сложную с точки зрения решаемой задачи (рис. 1, б) ситуации. При этом вариант импульсной характеристики канала, типичной для сравнительно простой ситуации и содержащей малое количество лучей, выбран произвольно; при этом он вполне возможен на практике. Вариант же указанной характеристики, типичной для сравнительно сложной ситуации и содержащей большое количество лучей, был сформирован на основе реальных данных при временном разрешении примерно 3 мс, ввиду разнообразия возможного сочетания амплитуд и задержек сигналов в лучах.

Результаты вычисления критерия качества K применительно к исходным ИХК (см. рис. 1) приведены на рис. 2. Здесь и далее отношение сигнал/шум определяется как  $-20 \cdot \lg \sigma_m$  (дБ).

На основании анализа графиков на рис. 2 можно сделать следующие выводы.

Алгоритмы 1 и 3 дают идентичные ре-



Рис. 1. Варианты исходной импульсной характеристики канала при малом (*a*) и большом (*б*) количестве лучей, приходящих в точку приема

зультаты, с точки зрения указанного выше критерия качества.

Алгоритм 2 при малом количестве лучей дает результат несколько хуже, чем алгоритмы 1 и 3, за исключением области очень низких (ниже -15 дБ) отношений сигнал/шум.

Алгоритм 2 при малых отношениях сигнал/шум значительно более эффективен, чем алгоритмы 1 и 3.

В случае большого количества лучей в области больших отношений сигнал/шум соотношение эффективностей рассматриваемых алгоритмов то же самое, что и при малом количестве лучей.

Для выбора предпочтительного алгорит-

ма для конкретных «промежуточных» случаев (типов ИХК) целесообразно провести соответствующие расчеты по предложенной методике.

#### Заключение

Разработаны варианты алгоритма оценивания импульсной характеристики многолучевого канала связи с трансформацией рабочего диапазона частот, т. е. пересчета оценки указанной характеристики в ее узкополосном представлении из одного диапазона частот в другой. Разработка позволяет реализовать передачу данных в соответствии с принципом СИИП при чередовании (скачкообразном изменении)



Рис. 2. Результаты вычисления критерия качества K применительно к исходным ИХК, показанным на рис. 1, a(a) и  $\delta(b)$ . Номера кривых соответствуют номерам алгоритмов

диапазонов частот передачи испытательных импульсов. Применение такого преобразования, как известно, позволяет исключать искажения формы этих импульсов из-за межсимвольной интерференции.

Приведены методика анализа качества алгоритмов трансформации и примеры расчетов по предложенной методике. Показано, что соотношение эффективностей рассмотренных алгоритмов определяется

1. Гольденберг Л.М., Кловский Д.Д. Метод приема импульсных сигналов, основанный на использовании вычислительных машин // Труды ЛЭИС. 1959. Вып.VII. С. 17–26.

2. Кловский Д.Д. Передача дискретных сообщений по радиоканалам; 2-е изд. М.: Радио и связь, 1982. 304 с.

3. Скляр Б. Цифровая связь. Теоретические основы и практическое применение; 2-е изд. М.: ИД «Вильямс». 2003. 1105 с.

4. **Кейлос Т.** Каналы с параметрами, изменяющимися во времени. Лекции по теории связи. Под ред. Е.Дж. Багдади. М.: Мир, 1964. С. 68–122. как формой импульсной характеристики канала, так и отношением сигнал/шум, при котором осуществляется указанная трансформация. Установлено, что в зависимости от конкретных условий (количество принимаемых лучей и отношение сигнал/шум) предпочтительными могут быть как алгоритм 2, так и эквивалентные между собой (в свете рассмотренного критерия качества) алгоритмы 1 и 3.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

5. Ван-Трисс Г. Теория обнаружения, оценок и модуляции. Т. 3. М.: Сов. радио, 1975. 664 с.

6. **Оппенгейм** Э. Применение цифровой обработки сигналов. М.: Мир, 1980. 552 с.

7. Голд Б., Рейдер Ч. Цифровая обработка сигналов. М.: Сов радио, 1973. 368 с.

8. **Кловский Д.Д.** Системы оптимального приема в каналах с эхо-сигналами // Труды учебных институтов связи. 1963. Вып.18.

9. **Прокис Д.Д.** Цифровая связь. М.: Радио и связь, 2000. 800 с.

10. Зюко А.Г., Кловский Д.Д., Назаров М.В., Финк Л.М. Теория передачи сигналов. М.: Связь, 1980. 288 с.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ГОЛУБЕВ Анатолий Геннадиевич** — доктор технических наук, заместитель по научной работе генерального директора OAO «Камчатский гидрофизический институт».

197183, Россия, г. Санкт-Петербург, Липовая аллея, 9 agg300@mail.ru

МОЛЧАНОВ Павел Александрович — кандидат физико-математических наук, начальник отдела комплексного проектирования ОАО «Камчатский гидрофизический институт». 684090, Россия, Камчатский край, г. Вилючинск, Академическая ул., 3 pasha@kgfi.ru

### *Golubev A.G., Molchanov P.A.* ESTIMATION ALGORITHMS FOR IMPULSE RESPONSE OF MULTIBEAM COMMUNICATION CHANNEL WITH TRANSFORMATION OF THE WORKING FREQUENCY BAND.

In transmission messages, the prediction about the form of every information signal, as a rule, is carried out using response of communication channel on test impulses. To avoid errors in predictions of intersymbol interference it is useful to apply the jump of carrier frequencies from one test impulse to another one. In this case it is necessary to make an estimate of channel impulse response in frequency band of information signals from channel response on series of test impulses, which transmitted in different frequency bands. Our article focuses on the algorithms for this estimation.

MULTIBEAM COMMUNICATION CHANNEL, TEST PULSE, ESTIMATION ALGORITHM, ESTIMATION ERROR, PULSE RESPONSE, CORRELATION, AUTOCORRELATION FUNCTION.

#### REFERENCES

1. Goldenberg L.M., Klovsky D.D. Method computers. *Proceeding of LEIC*, 1959. No.VII. of receiving of impulse signals based on using of pp. 17-26 (rus).

2. **Klovsky D.D.** Transmission of discrete messages in radio channels. 2 edition, M.: Mir Publishers: Radio and communication. 1982. 304 p. (rus)

3. **Sclyar B.** Digital communication. Theoretical basis and practice. 2 edition., Moscow: «Viliams» Publishers. 2003. 1105 p. (rus)

4. **Keilos T.** Channels with time-varying parameters. Lectures on communication theory. Ed. E.D. Bagdady. Moscow: Mir Publishers, 1964. pp. 68-122. (rus)

5. **Van-Triss G.** Theory of detection, estimation and modulation. Vol. 3. Moscow: Soviet Radio Publishers, 1975. 664 p. (rus)

6. **Oppengeim E.** Implementation of digital signal processing. Moscow: Mir Publishers, 1980. 552 p. (rus)

7. Gold B., Reider C. Digital signal processing. Moscow: Soviet Radio Publishers, 1973, 368 p. (rus)

8. Klovsky D.D. System of optimal receiving in eho-channels. *Proceeding of educational communica-tion institutes.* 1963. Vol.18. (rus)

9. **Proakis J.G.** Digital communications. Moscow: Radio and communication, 2000, 800 p. (rus)

10. Zyko A.G., Klovsky D.D., Nazarov M.V., Fink L.M. The theory of signal transmission. Moscow: Communication, 1980. 288 p. (rus)

#### THE AUTHORS

**GOLUBEV** Anatoly G.

Kamchatka Hydrophysical Institute JSC 197183, Lipovaya Ave. 9, St. Petersburg, Russia agg300@mail.ru

#### **MOLCHANOV** Pavel A.

Kamchatka Hydrophysical Institute JSC 684090, Akademicheskaya Str. 3, Vilyuchinsk, Kamchatka Krai, Russia pasha@kgfi.ru

## Конференции

УДК 621

М.А. Васильева, Т.А. Гаврикова, В.А. Зыков, В.И. Ильин, В.А. Шалыгин

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

### АКТУАЛЬНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ ФИЗИКИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ И НАНОСТРУКТУР, ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ОПТО- И НАНОЭЛЕКТРОНИКИ (по материалам 15-й Всероссийской молодежной конференции)

Статья подводит краткие итоги конференции, отмечены наиболее актуальные результаты, представленные на всех секциях конференции, работы, награжденные дипломами и премиями, и работы, представленные для участия в программе «УМНИК».

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ, НАНОЭЛЕКТРОНИКА, ОПТОЭЛЕКТРОНИКА, КОН-ФЕРЕНЦИЯ.

В Санкт-Петербурге с 25 по 29 ноября 2013 г. прошла 15-я Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике. Организаторами конференции выступили Санкт-Петербургский государственный политехнический и Санкт-Петербургский академический университеты, а также Санкт-Петербургский государственный университет и Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН. Конференция проведена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, Фонда некоммерческих программ «Династия» и ЗАО «Полупроводниковые приборы». Председатель Программного комитета конференции – академик РАН Р.А. Сурис, председатель Организационного комитета – профессор Л.Е. Воробьев.

В научном форуме приняли участие около 200 человек, представлявших 24 вуза и научных центра из 13 городов России, включая крупные научно-образовательные центры Сибири (Новосибирск, Красноярск, Барнаул, Томск), Урала (Екатеринбург, Оренбург) и Европейской части России (Москва, Санкт-Петербург, Нижний Новгород, Воронеж, Пенза, Ульяновск).

В ходе работы конференции приглашенными ведущими учеными России были прочитаны доклады, знакомящие молодых исследователей с современными проблемами физики, состоянием исследований в области физики полупроводников и наноструктур, проводниковой опто- и наноэлектроники. Доктор физико-математических наук Г.С. Соколовский (ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН) представил доклад о нелинейной динамике лазеров на полупроводниковых наноструктурах, а кандидат физикоматематических наук А.Н. Поддубный из того же института познакомил студентов и аспирантов с физикой фотонных кристаллов и метаматериалов, рассказал о таких уникальных объектах, как топологические изоляторы. Доктор физико-математических наук В.Т. Ким из ПИЯФ им. Б.П. Константинова посвятил свою презентацию международным исследованиям на Большом адронном коллайдере и вопросам физики бозона Хиггса. Доклады приглашенных ученых задавали высокий тон каждому рабочему дню конференции. Представление и обсуждение этих докладов сыграло роль мастер-класса для молодых участников.

На пленарных заседаниях было представлено 47 устных докладов студентов и аспирантов. Кроме того, состоялась стендовая сессия, и на ней было представлено 39 докладов молодых ученых. Сборник тезисов [1], а также программа конференции [2] изданы тиражом 200 экземпляров

Среди работ, представленных на секции «Объемные свойства полупроводников», заслуживают внимания исследования радиационно-стимулированного лефектообразования в структурах с барьерами Шоттки Cr-6H-SiC при облучении быстрыми тяжелыми ионами; разработка оригинального варианта метода модуляционной фурье-спектроскопии (позволяет сохранять истинный знак спектра) и его проверка на структурах с эпитаксиальным слоем InSb и с квантовой ямой InGaAs/GaAs. За цикл исследований по изучению влияния одноосной деформации на магнитооптические свойства ферромагнитного полупроводника (Ga,Mn)Аз Программный комитет удостоил аспиранта Г.С. Димитриева (ФТИ им. А.Ф. Иоффе) премии имени Е.Ф. Гросса. Аспирант К.А. Барышников из того же института награжден дипломом 1-й степени и премией за теоретические исследования примесного комплекса CrSe, в кристалле ZnSe в магнитном поле и влияния эффекта Яна – Теллера на поглощение ультразвука в кристалле.

Работы, представленные на секции «Процессы роста, поверхность, границы раздела», охватывают широкий круг исследований, посвященных изучению морфологии поверхности, рельефа и распределения поверхностного потенциала, образования нанокластеров, изучению на атомном уровне начальных стадий роста, формированию границ раздела в МДП- и гетероструктурах. В работах использованы современные технологические методы: молекулярнопучковая эпитаксия, газофазная эпитаксия, выращивание структур по механизму пар – жидкость – кристалл, магнетронное осаждение, электрохимическое анодное оксидирование.

Наиболее яркие работы в этом направлении посвящены изучению процессов пассивации поверхностей на атомарном уровне, например, поверхности InAs(111) А тонким фторсодержащим анодным слоем либо путем нитридизации поверхности (0001)Al<sub>2</sub>O<sub>2</sub>(сапфир) аммиаком; исследованию свойств переходного слоя между кубическим (3С) и гексагональным (6Н) политипами SiC; изучению локальной трибоэлектризации поверхности эпитаксиальных слоев GaN и GaAs при сканировании их поверхности зондом атомно-силового микроскопа в контактном режиме; исследованию оптических явлений в сильнолегированном *n*-GaN, связанных с рассеянием горячих поверхностных плазмон-поляритонов на дифракционной решетке на поверхности эпитаксиального слоя; изучению возможных механизмов интеркаляции атомов рубидия, нанесенных на поверхность Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>; теоретическому исследованию морфологической устойчивости в многокомпонентных системах, растущих при диффузии отдельных компонентов из окружающей среды; модернизации технологии получения нанопористого алюминия; теоретическому и экспериментальному исследованию поведения основных и неосновных носителей в структурах с приповерхностным дельталегированием. Работа студента М.А. Василенко (Новосибирский ГТУ), посвященная Монте-Карло-моделированию роста нитевидных нанокристаллов арсенида галлия по механизму пар - жидкость - кристалл при использовании в качестве катализатора капель галлия, а также исследования транспортных свойств окисленных пленок селенида свинца, выполненные студенткой МГУ С.Г. Егоровой, отмечены дипломами 3-й степени и премиями.

Среди исследований по технологии новых полупроводниковых материалов следует выделить работы, посвященные выращиванию слоев азотсодержащих твердых растворов GaPN, GaPNAs, InGaPN на кремниевых подложках. Работа аспиранта М.С. Соболева (Академический университет, Санкт-Петербург) «Молекулярно-пучковая эпитаксия GaP на подложке Si» рекомендована для участия в конкурсе по Программе «Участник молодежного научноинновационного конкурса» («УМНИК») в номинации «Научные результаты, обладающие существенной новизной и сверхсрочной перспективой их коммерциализации».

Наибольшее количество докладов было представлено на секции «Гетероструктуры, сверхрешетки, квантовые ямы». Первостепенное внимание уделяется получению, диагностике и исследованию структур на основе кремния, а также полупроводниковых соединений  $A_3B_5$  и  $A_2B_6$ , изучению их энергетического спектра. Приводятся данные о структурах с сегнетоэлектрическими слоями, теоретические и экспериментальные исследования графена и мультиграфенов. Изучены также фотонные системы.

Среди теоретических работ следует отметить численный расчет влияния анизотропных деформаций на излучающий элемент; изучение внутри- и межзонных переходов в асимметричной квантовой яме со спин-орбитальным взаимодействием, разработку динамической теории адмиттанса квантоворазмерных структур. Экспериментально и теоретически изучены поглощение, отражение и эмиссия излучения, фотоэлектрические свойства, магнитооптические явления. Ряд работ посвящен оптимизации параметров наноструктур для различных приборных приложений. Среди экспериментальных работ следует отметить исследования терагерцовой люминесценции на состояниях акцепторов бериллия (Be) в квантовых ямах GaAs/AlGaAs; вольтфарадных характеристик гетероструктур с множественными квантовыми ямами InGaN/GaN; переноса энергии в двойных связанных квантовых ямах ZnCdSe с самоорганизованными квантовыми точками; изучение эволюции спектра излучения квантовых ям InGaN/GaN при увеличении тока накачки и влияния латеральной делокализации носителей тока в квантовых ямах на эффективность светодиодов при высоких уровнях инжекции.

Отдельно отметим оригинальные работы, посвященные исследованию люминесцентных свойств спиновых светоизлучающих диодов с дельта-слоями марганца, в

которых поляризация носителей по спину происходит непосредственно в активной области путем обменного взаимодействия между магнитными ионами марганца в дельта-легированном слое и носителями в квантовой яме InGaAs. Практический интерес представляют результаты изучения влияния дефектообразования при гамманейтронном облучении гетеронаноструктур In(Ga)AlAs/ GaAs на их оптоэлектронные свойства. Вызывает также интерес многогранное изучение графенов: экспериментальные исследования рентгеностимулированного восстановления оксида графена; теоретические исследования электронной структуры мультиграфенов; дисперсионного взаимодействия различных атомов с графеном.

Работа студента СПбГПУ И.С. Махова «Фотолюминесценция дальнего и ближнего ИК диапазона, связанная с примесными донорными состояниями в квантовых ямах *n*-GaAs/AlGaAs», а также проект аспиранта СПбГПУ В.П. Пащенко «Формирование индуцированной электрическим полем акустической сверхрешетки в сегнетоэлектрической тонкой пленке» рекомендованы для участия в конкурсе по Программе «УМНИК» с последующим финансированием проектов-победителей Фондом содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере.

Дипломами 2-й степени и денежными премиями Программный комитет наградил аспиранта ИФМ РАН (Нижний Новгород) В.В. Румянцева за экспериментальные исследования длинноволновой инфракрасной фотолюминесценции и фотопроводимости в узкозонных твердых растворах HgCdTe и квантовых ям на слоях HgCdTe разного состава, а также аспирантку СПбГЭТУ М.С. Миронову за теоретический расчет энергетического спектра и волновых функций в структурах с квантовой ямой SiGe/ Si/SiGe. Дипломов 3-й степени и премий удостоены студентка СПбГУ Н.Е. Коптева за экспериментальное исследование фотоиндуцированного керровского вращения в микрорезонаторе с квантовой ямой, а также студент МГУ Е.П. Кубашевский за теоретическую работу, посвященную переключению поляризационных мод излучения лазерных полупроводниковых диодов на основе твердых растворов  $A^3B^5$  при одноосном сжатии.

Значительное число работ, представленных на секции «Квантовые точки, квантовые нити и другие низкоразмерные системы», посвящено исследованию электрических, оптических, фотоэлектрических свойств наноструктур различной размерности, а также методам и условиям их приготовления. Заслуживают внимания экспериментальные исследования фотолюминесценции нанокристаллов кремния в матрице аморфного гидрогенизированного кремния; особенностей фототока массива квантовых нитей GaAs/InGaAs со структурой ядро-оболочка; люминесценции в коллоидных квантовых точках CdSe; гетероструктур с квантовыми точками InAs/GaAs методом высокоразрешающей просвечивающей электронной микроскопии; изучению прямоугольных и круговых призматических петель дислокаций несоответствия в наногетероструктурах (композитных наночастицах и радиальнонеоднородных нанопроволоках типа ядро-оболочка); безызлучательной ожерекомбинации в нанокристаллах кремния, легированных мелкими донорами; синтезу и исследованию металлических наночастиц с плазмонным резонансом в матрице арабиногалактана.

Среди представленных теоретических работ следует упомянуть исследования процесса передачи энергии от экситонов полупроводниковой квантовой нити к матрице из органических молекул; магнетизма и стабильности кластеров силицидов переходных металлов; расчет упругих напряжений, зонной диаграммы и положения основных уровней квантования электрона и тяжелой дырки в квантовых точках InAs; электронной структуры ограниченных по длине закрытых одностенных кресельных и зигзагообразных углеродных нанотрубок; работы выхода с графеновых наноструктур.

Среди экспериментальных работ следует отметить исследования фотопроводимости массивов квантовых точек Ge/Si в среднем инфракрасном диапазоне (аспирант СПбГПУ Р.М. Балагула получил за них диплом 3-й степени и премию); среди теоретических — исследование краевых состояний в топологическом изоляторе висмут на кремнии (аспирант Нижегородского ГУ А.А. Чубанов, диплом 3-й степени и премия) и изучение возможности применения функционалов плотности к расчету электронной структуры и колебательных спектров молекул-оснований ДНК и РНК (студентка МГУ А.В. Виккулова, поощрительный диплом).

В докладах, представленных на секции «Приборы опто- и наноэлектроники», отражен широкий спектр прикладных исследований. С точки зрения практического применения наиболее значимыми представляются работы по исследованию приборных структур на основе широкозонных полупроводниковых нитридов третьей группы периодической системы Д.И. Менделеева. Исследованы фотодетекторы на твердых растворах AlGaN с резким длинноволновым краем чувствительности в заданной области ультрафиолета, в том числе нечувствительные к солнечному свету (солнечнослепые и видимослепые фотоприемники). Представлены результаты численного моделирования светодиодных структур на основе GaN/InGaN. Экспериментальная работа аспиранта Академического университета (Санкт-Петербург) А.В. Бабичева, посвященная исследованию возможности использования графена в качестве прозрачного контакта к поверхности массива GaN-пирамид в светодиодных структурах, рекомендована для участия в конкурсе по Программе «УМНИК». Исследованные в работе структуры демонстрируют электролюминесценцию в длинноволновой области видимого спектра и, в сочетании с множественными квантовыми ямами InGaN/ GaN, перспективны для создания источников белого света нового поколения.

Ряд работ посвящен проблеме преобразования солнечной энергии. На предыдущих конференциях при решении проблем ее фотоэлектрического преобразования основное внимание было сконцентрировано на многокаскадных преобразователях,

представляющих комбинацию резких гетеропереходов. На настоящей конференции обсуждался альтернативный вариант: фотоприемник с варизонной структурой. Студентом СПбГЭТУ А.Н. Свистуновым разработана технология получения слоев твердых растворов на основе GaSb с изменяющейся по толщине шириной запрещенной зоны, отмечено увеличение напряжения холостого хода за счет градиента ширины запрещенной зоны. Важное практическое значение имеют также разработки полупрозрачных солнечных модулей на основе аморфного и микрокристаллического кремния, представленные на конференции аспирантом Г.М. Аблаевым из Академического университета (Санкт-Петербург). Безусловный практический интерес представляют разработки фотоприемников лазерного излучения на основе гетероструктур InGaAsP/InP для беспроводной передачи электроэнергии (аспирант СПбГЭТУ А.Е. Маричев) и малоинерционного пироэлектрического приемника субмиллиметрового диапазона. Кроме того, на конференции обсуждались разработки датчиков разнообразных физических величин и газочувствительных сенсоров. Доклад студентки СПбГПУ Е.Д. Карпенко был посвящен исследованиям волноводных свойств стекол с наночастицами серебра на поверхности. Эти исследования нацелены на создание биосенсоров.

Указанные работы участников конференции А.Н. Свистунова, Г.М. Аблаева, А.Е. Маричева и Е.Д. Карпенко рекомендованы Программным комитетом для участия в конкурсе по Программе «УМНИК».

На секции «Новые материалы» в основном представлены работы, посвященные исследованию органических, полимерных и композиционных материалов с нано- и микровключениями: изучению характеристик переключений на микромасштабах в образцах с резистивной памятью на базе полимерных и композитных материалов; исследованию оптических свойств металлополупроводниковых метаматериалов на основе матрицы AlGaAs с хаотическими и упорядоченными массивами нановключений As и Sb; разработке резистивных материалов для создания новых элементов фазовой памяти в системах ионных стеклообразных проводников Cu-Ag-Ge-As-Se; методов создания нанокомпозитных материалов на основе фуллеренсодержащих молекулярных комплексов C<sub>60</sub>-CdTe, C<sub>60</sub>-CdS для преобразователей солнечной энергии. Большой интерес вызвали результаты исследований формирования гексагональной структурной модификации кремния на сапфире.

Проблематика проектов, доклады по которым представлены на конференции, соответствует перечню актуальных проблем современной физики полупроводников и поддержана различными фондами и программами. В частности, 14 работ поддержаны Российским фондом фундаментальных исследований, 8 работ – Министерством образования и науки РФ, в том числе 2 в рамках Федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России». Ряд участников конференции получили финансовую поддержку за счет других фондов, правительственных и ведомственных программ (8 работ), 4 работы выполнены в рамках программ по международному сотрудничеству.

Следует отметить высокий уровень докладов и подчеркнуть, что многие лучшие доклады явились результатом совместных исследований представителей вузов и Российской академии наук. Участники конференции констатируют важность проведения научной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике для студентов и аспирантов как с точки зрения представления и обсуждения научных результатов, так и с точки зрения установления научных контактов и организации совместных научных исследований.

Очередную Всероссийскую молодежную конференцию по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой оптои наноэлектронике предполагается провести в г. Санкт-Петербурге в октябре-ноябре 2014 г. Соответствующая информация будет размещена на сайте www.semicond.spbstu.ru

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 15-я Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике: Тезисы докладов. 25–29 ноября 2013 года. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2013. 96 с. 2. 15-я Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике: Программа конференции. 25–29 ноября 2013 года. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2013. 12 с.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ВАСИЛЬЕВА Мария Александровна — старший научный сотрудник, заместитель заведующего кафедрой физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 vilyin@rphf.spbstu.ru

**ГАВРИКОВА Татьяна Андреевна** — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 zykov@rphf.spbstu.ru

ЗЫКОВ Валерий Андреевич — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 zykov@rphf.spbstu.ru

**ИЛЬИН Владимир Иванович** — доктор физико-математических наук, профессор кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 vilyin@rphf.spbstu.ru

ШАЛЫГИН Вадим Александрович — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 zykov@rphf.spbstu.ru

Vasil'eva M.A., Gavricova T.A., Zykov V.A., Ilyin V.I., Shalygin V.A. ACTUAL DIRECTIONS OF SEMICONDUCTOR PHYSICS AND NANO-STRUCTURES. SEMICONDUCTOR NANO-AND **OPTOELECTRONICS** (on the 15th All Russian Youth Conference).

Short review of results of the conference is done. The works, recommended to practical using, are mentioned.

SEMICONDUCTOR PHYSICS, NANOELECTRONICS, OPTOELECTRONICS, CONFERENCE.

#### REFERENCES

1. The 15th All-Russian Youth Conference on Semiconductor and Nanostructure Physics and Semiconductor Opto- and Nanoelectronics: Conference Paper Summaries. St. Petersburg, Polytechnical University Publishing House, 2013. 96 p. (rus)

2. The 15th All-Russian Youth Conference on Semiconductor and Nanostructure Physics

and Semiconductor Opto- and Nanoelectronics: Conference Programme. St. Petersburg, Polytechnical University Publishing House, 2013. 12 p. (rus)

#### THE AUTHORS

#### VASIL'EVA Maria A.

St. Petersburg State Polytechnical University.29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia vilyin@rphf.spbstu.ru

#### GAVRICOVA Tatiana A.

St. Petersburg State Polytechnical University.29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia

#### **ZYKOV** Valery A.

St. Petersburg State Polytechnical University.29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia zykov@rphf.spbstu.ru

#### **ILYIN Vladimir I.**

St. Petersburg State Polytechnical University.29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia vilyin@rphf.spbstu.ru

#### SHALYGIN Vadim A.

St. Petersburg State Polytechnical University.29 Politekhnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russia zykov@rphf.spbstu.ru

# хроника

УДК 001 + 54

### А.Г. Морачевский, Е.Г. Фирсова

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

### ПРОФЕССОР ВЛАДИМИР ЕФИМОВИЧ ГРУМ-ГРЖИМАЙЛО (к 150-летию со дня рождения)

Очерк посвящен жизни и творческой деятельности В.Е. Грум-Гржимайло (1864 – 1928) – выдающегося российского и советского изобретателя, инженера-металлурга, педагога и организатора производства. Являлся членом-корреспондентом АН СССР по отделению физико-математических наук (избран в 1927 году). Одиннадцать лет преподавал в Петербургском (Петроградском) политехническом институте.

ИНЖЕНЕР-МЕТАЛЛУРГ, ГРУМ-ГРЖИМАЙЛО, ЧЛЕН-КОРРЕСПОНДЕНТ АН СССР, САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ.



Владимир Ефимович Грум-Гржимайло (1864 — 1928) Фотография предоставлена из фондов Историкотехнического музея СПбГПУ Владимир Ефимович Грум-Гржимайло был профессором Металлургического отделения Санкт-Петербургского (Петроградского) политехнического института с 1907 по 1918 год. Он проявил себя выдающимся ученым-металлургом и оригинальным мыслителем; это был человек, не допускавший компромиссов с собственной совестью. Его классический труд «Пламенные печи» (1925) [1] получил мировое признание. Высокую оценку заслужили написанные им учебники по производству стали и прокатному производству.

В.Е. Грум-Гржимайло родился 12 февраля 1864 года в Санкт-Петербурге в дворянской семье, корни которой уходят к одному из древнейших европейских родов. Его отец Е.Г. Грум-Гржимайло, юрист, скончался в 1870 году, не достигнув и пятидесяти лет. Большая семья, включавшая шестерых детей, осталась практически без средств к существованию. В.Е. Грум-Гржимайло окончил в Петербурге военную гимназию (его мать была дочерью генерала) в возрасте шестнадцати лет и четырех месяцев [2]. Тяжелое материальное положение семьи вызывало у него желание скорее завершить образование и иметь собственный заработок. Выпускник гимназии решил поступать

в Горный институт в Санкт-Петербурге, в единственное в те годы высшее учебное заведение в России, где готовились специалисты по горному делу и металлургии.

В 1880 году, несмотря на большой конкурс, В.Е. Грум-Гржимайло поступил в Горный институт и уже со второго курса начал получать стипендию, что позволило ему не заниматься репетиторством и все время посвящать учебе. Все годы обучения этот одаренный юноша был в числе лучших студентов; в 1885 году успешно закончил институт, получив премию за выполненный дипломный проект. В процессе обучения В.Е. Грум-Гржимайло посещал металлургические предприятия и каменноугольные шахты, принимал участие в геологических экспедициях. К моменту окончания института, несмотря на ряд лестных предложений, у него созрело твердое желание стать заводским инженером. В очень краткой автобиографии, написанной в 1921 году, говорится: «Языков я не знал, книг не любил, решил, что буду работать на заводе. Я не считал себя способным быть ученым. Мой идеал того времени практический деятель». Во время учебы в Горном институте В.Е. Грум-Гржимайло принял для себя решение – никогда не заниматься политикой. С раннего возраста ему было присуще умение ценить время.

По окончании института молодой инженер принял приглашение на работу в Нижнем Тагиле, на одном из заводов, принадлежащих наследникам только что скончавшегося известного русского промышленника П.П. Демидова (1839 – 1885). На нижне-тагильском заводе В.Е. Грум-Гржимайло прошел стажировку и в октябре 1886 года был назначен начальником прокатного цеха и помощником управителя Нижне-Салдинского завода. Управителем завода был опытный и талантливый специалист К.П. Поленов (1835 - 1908); при нем на заводе был освоен и усовершенствован процесс бессемерования при производстве стали. В.Е. Грум-Гржимайло детально изучил этот процесс, дал ему объяснение с физико-химических позиций, показал его экономическую целесообразность и опубликовал статью «Бессемерование на Нижне-Салдинском заводе» [3]. В дальнейшем описанный в этой работе процесс получил название «русское бессемерование». После совершенной в 1892 году поездки по Западной и Северной Европе, включая Швецию, В.Е. Грум-Гржимайло написал новую статью «Бессемерование в Швеции» о конвертерном производстве стали [4].

В 1894 году Владимир Ефимович получил приглашение занять должность главного инженера на Александровском сталелитейном заводе в Петербурге. Завод представлял собой филиал французского предприятия и поставлял флоту лучшее в России котельное железо. Однако надежда выдающегося ученого-металлурга на получение новых знаний и опыта не оправдалась, и уже в августе 1895 года Грум-Гржимайло с семьей вернулся на Урал, на заводы Демидовых, фактически став помощником управляющего Нижне-Тагильским горным округом. В мае 1897 года его назначили управителем завода в Верхней Салде: одновременно он занимается строительством рельсопрокатного стана на Нижне-Салдинском заводе. Летом 1902 года, после выхода К.П. Поленова в отставку, В.Е. Грум-Гржимайло становится управителем завода в Нижней Салде, где его главным делом является пуск и наладка прокатного стана. Вскоре прокатное производство в Нижней Салде начало выпуск отличных рельсов марки «старый соболь» для строящейся Транссибирской магистрали. Сразу же после пуска прокатного стана В.Е. Грум-Гржимайло получил приглашение занять место управляющего всеми заводами Алапаевского горного округа. Летом 1902 года Владимир Ефимович с семьей переехал в Алапаевск, расположенный примерно в 100 км от Нижней Салды. В Алапаевский горный округ входило пять заводов. Революционные события 1904 – 1907 гг. существенно изменили обстановку в Алапаевске, где было большое число политических ссыльных. Пришлось объявить в городе военное положение и вызвать войска для охраны заводов. К этому времени В.Е. Грум-Гржимайло уже получил приглашение из Петербургского политехнического института занять должность профессора металлургии. Необходимо было только дождаться на старой должности, когда ему найдут заместителя.

Вся большая семья (у Владимира Ефимовича было пять сыновей и две дочери) в начале сентября 1907 года переехала в Петербург. 20 ноября того же года Совет политехнического института присудил В.Е. Грум-Гржимайло звание адъюнкта по металлургии без представления им диссертации, без экзаменов и пробных лекций («ввиду выдающейся технической деятельности»). 24 марта 1908 года решение Совета утвердил министр торговли и промышленности («в виде особого, на сей случай, исключения»). 14 мая 1908 года Совет политехнического института единогласно избрал адъюнкта В.Е. Грум-Гржимайло на должность экстраординарного профессора по кафедре металлургии. 5 июня того же года это решение было утверждено министром торговли и промышленности. 7 июля 1908 года последовало Высочайшее согласие.

В.Е. Грум-Гржимайло быстро выдвинулся в число ведущих, наиболее авторитетных профессоров Политехнического института, принял участие в основании Русского металлургического общества, активно публиковал свои труды в журнале этого общества; статьи профессора переиздают французские металлургические журналы. В 1911 году Совет политехнического института избирает его ординарным профессором.

После переезда в Петербург Владимир Ефимович не порывает связей с заводами, а, наоборот, эти связи упрочились, поскольку ученый, активно публикующий свои работы, быстро приобрел европейскую известность не только как специалист в области производства стали, но и как конструктор печей различного назначения. После начала первой мировой войны В.Е. Грум-Гржимайло был буквально завален заказами на проектную документацию для строительства и реконструкции нагревательных печей для прокатных станов и горячей штамповки, а также печей для термической обработки инструмента, орудийных стволов и снарядов. В 1915 году совместно с инженерами Путиловского завода было создано «Металлургическое бюро В.Е. Грум-Гржимайло». К концу 1916 года это бюро выполнило не менее 400–500 рабочих чертежей агрегатов различного назначения, преимущественно для заводов, связанных с военной продукцией. В 1918 году, в связи с общим расстройством финансовой системы в стране, бюро было ликвидировано.

Занятия в Политехническом институте практически прекратились, и прокормить большую семью стало невозможным для профессора. В июне 1918 года он выехал опять на Урал, в Алапаевск. Кругом бушевала гражданская война; В.Е. Грум-Гржимайло состоял тогда в должности консультанта на одном из уральских заводов. При отступлении на восток армии адмирала Колчака, Владимир Ефимович вместе с семьей и служащими завода летом 1919 года был вывезен в Томск. Однако пребывание в этом сибирском городе оказалось недолгим. Уже в июне 1920 года вся семья возвращается на Урал, в Екатеринбург. Там Грум-Гржимайло принимает активное участие в организации Уральского университета, в восстановлении металлургической промышленности Урала, пострадавшей в период гражданской войны.

Попытка вернуться в Петроградский политехнический институт оказалась неудачной, поскольку руководство института не могло гарантировать ни предоставления ему квартиры, соответствующей размерам семьи, ни продовольственных пайков. Осенью 1920 года В.Е. Грум-Гржимайло принял решение обосноваться в Екатеринбурге, на уральской земле, где он начинал свою трудовую деятельность, где получил широкую известность и был очень нужен. В связи с этим принятым решением В.Е. Грум-Гржимайло назначили руководителем Комиссии по восстановлению промышленности Урала. В Уральском государственном университете он начал читать сразу несколько специальных курсов металлургической направленности. Однако политическая обстановка в университете и вне его стен была, мяг-

ко говоря, не вполне благоприятной. Непосредственной причиной, заставившей ученого изменить свое решение и уехать в Москву, были нападки на него в газете «Уральский рабочий» и других средствах массовой информации, развернувшиеся после выступления В.Е. Грум-Гржимайло в качестве свидетеля защиты в «деле профессора Клера». Известный на Урале геолог и краевед М.О. Клер обвинялся в передаче сведений о состоянии платиновых приисков на Урале французской стороне (иначе говоря, в шпионаже), несмотря на то, что эти сведения были опубликованы в печати, а самого понятия государственной тайны применительно к экономическим вопросам еще не было.

В июне 1924 года Владимир Ефимович с семьей переезжает в Москву, где на хозрасчетной основе было создано «Бюро металлургических и теплотехнических конструкций» (БМТК); он становится во главе этого бюро. К тому времени созданная ученым гидравлическая теория, лежащая в основе конструирования и расчета пламенных печей, уже получила широкое распространение. В январе 1927 года В.Е. Грум-Гржимайло был избран членом-корреспондентом АН СССР по отделению физико-математических наук (по специальности «химия и ее технические приложения»). Тем самым ученый получил официальное признание своих заслуг перед отечественной наукой. Однако тяжелая обстановка тех лет, нападки в прессе на его

гражданскую позицию привели к тому, что физические и душевные силы этого выдающегося человека были уже на исходе. В.Е. Грум-Гржимайло скончался 30 октября 1928 года на шестьдесят пятом году жизни от заболевания печени. Многие газеты и журналы в нашей стране и за рубежом опубликовали некрологи.

Член-корреспондент АН СССР, профессор Ленинградского политехнического института А.А. Байков на Общем собрании Русского металлургического общества в Ленинграде, выступая с речью, посвященной памяти В.Е. Грум-Гржимайло, высоко оценил заслуги ученого: «Вся его жизнь представляла собой непрерывный труд, всю жизнь он учился, мыслил и творил, и во всех областях, в которых он работал, он достиг выдающихся и крупных результатов. Мыслитель, творец-техник – он совмещал в себе гармоническим образом все то, что практическую деятельность может сделать наиболее плодотворной, и сама жизнь его была так же прекрасна и замечательна, как те труды его, благодаря которым имя В.Е. Грум-Гржимайло навсегда останется гордостью русской металлургии».

Значительно подробнее об инженерной, научной и педагогической деятельности Владимира Ефимовича Грум-Гржимайло, его гражданской позиции рассказывается в работах [2, 5]. Большое число различных документов и воспоминаний об ученом и его семье содержится в сборниках [6, 7].

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Грум-Гржимайло В.Е. Пламенные печи. Ч. 1 и 2. М.: Изд-во Теплотехнического ин-та, 1925.

2. Морачевский А.Г. Профессор Владимир Ефимович Грум-Гржимайло. Жизнь и деятельность. 1864–1928. Под ред. акад. РАН Ю.С. Васильева. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2011. 88 с.

3. **Грум-Гржимайло В.Е.** Бессемерование на Нижне-Салдинском заводе // Горный журнал. 1889. Т. 3. № 7-8.

4. **Грум-Гржимайло В.Е.** Бессемерование в Швеции // Горный журнал. 1895. Т. 1. № 3.

5. Морачевский А.Г. Химия и химики в Политехническом институте. Санкт-Петербург-Петроград-Ленинград. 1902 – 1930 гг. Под ред. акад. РАН Ю.С. Васильева. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2012. 288 с.

6. Грум-Гржимайло В. Хочу быть полезным Родине. Сост. П. Андреев и др. Под ред. М.Е. Главацкого. Екатеринбург: ИПП «Уральский рабочий», 1996. 324 с.

7. Грум-Гржимайло Владимир и Софья. Секрет счастливой жизни. Книга для семейного чтения /Под ред. М.Е. Главацкого. Екатеринбург: Изд-во Уральск. ун-та, 2001. 296 с.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**МОРАЧЕВСКИЙ** Андрей Георгиевич — доктор технических наук, заслуженный деятель науки и техники РФ, профессор кафедры физико-химии и технологии микросистемной техники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 tmet@ftim.spbstu.ru

ФИРСОВА Елена Германовна — кандидат технических наук, доцент кафедры физико-химии и технологии микросистемной техники Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

195251, Россия, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29 tmet@ftim.spbstu.ru

## *Morachevskiy A.G., Firsova E.G.* PROFESSOR VLADIMIR EFIMOVICH GRUM-GRZHIMAILO (on the occasion of his 150th birthday)

The article is dedicated to the life and creative work of V.E. Grum-Grzhimailo (1864 - 1928), who was an outstanding Russian and Soviet inventor, a metallurgical engineer, a pedagogue and a production organizer. He also was a corresponding member of the Academy of Science of the USSR (elected in 1927). For 11 years he was a lecturer at St. Petersburg Polytechnical Institute.

METALLURGICAL ENGINEER, GRUM-GRZHIMAILO, CORRESPONDING MEMBER OF ACADEMY OF SCIENCE OF THE USSR, SPBSPU.

#### REFERENCES

THE AUTHORS

1. **Grum-Grzhimaylo V.E.** Plamennye pechi. Ch. 1 i 2. Moscow, Izd-vo Teplotekhnicheskogo in-ta, 1925. (rus)

2. **Morachevskiy A.G.** Professor Vladimir Efimovich Grum-Grzhimaylo. Zhizn' i deyatel'nost'. 1864–1928. Pod red. akad. RAN Yu.S. Vasil'eva. St. Petersburg, Izd-vo Politekhn. un-ta, 2011. 88 p. (rus)

3. **Grum-Grzhimaylo V.E.** Bessemerovanie na Nizhne-Saldinskom zavode. *Gornyy zhurnal*, 1889, Vol. 3, No. 7-8. (rus)

4. Grum-Grzhimaylo V.E. Bessemerovanie v Shvetsii. *Gornyy zhurnal*, 1895, Vol. 1, No. 3. (rus)

5. **Morachevskiy A.G.** Khimiya i khimiki v Politekhnicheskom institute. Sankt-Peterburg-Petrograd-Leningrad. 1902–1930 gg. Pod red. akad. RAN Yu.S. Vasil'eva. St. Petersburg, Izd-vo Politekhn. un-ta, 2012. 288 p. (rus)

6. **Grum-Grzhimaylo V.** Khochu byť poleznym Rodine. Sost. P. Andreev i dr. Pod red. M.E. Glavatskogo. Ekaterinburg, IPP «Ural'skiy rabochiy», 1996. 344 p. (rus)

7. **Grum-Grzhimaylo Vladimir i Sof'ya.** Sekret schastlivoy zhizni. Kniga dlya semeynogo chteniya. Pod red. M.E. Glavatskogo. Ekaterinburg, Izd-vo Ural'sk, un-ta, 2001. 296 p. (rus)

### **MORACHEVSKIY** Andrey G.

St. Petersburg State Polytechnical University, 195251, Politechnicheskaya Str. 29, St. Petersburg, Russia tmet@ftim.spbstu.ru

**FIRSOVA Elena G.** *St. Petersburg State Polytechnical University,* 195251, Politechnicheskaya Str. 29, St. Petersburg, Russia tmet@ftim.spbstu.ru

### АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Андронов А.Н	6
Арефьев К.М	1
Безпрозванный И.Б	7
Безрукова А.Г	9
Васильева М.А	15
Ведяйкин А.Д.	10
Власова О.Л	79, 9
Гаврикова Т.А.	15
Гарсиа А.М.	6
Головков О.Л.	48, 5
Голубев А.Г.	144, 15
Горобей Н.Н	
Закревский В.А.	3
Зацепин П.М	13
Зыков В.А	15
Иванищев Д.А	10
Иванов А.Е.	10
Ильин В.И	15
Канунникова Е.А	3
Кондрашков А.В.	12
Котов Д.О.	10
Криницкий Я.А.	6
Купцова Г.А.	48, 5
Лебедев Н.Г.	2
Лебедева О.С	2

67	Лукьяненко А.С.	9
16	Молчанов П.А.	150
79	Морачевский А.Г.	164
91	Пахотин В.А	39
57	Петриченко М.Р	118
)1	Петров В.М	61
91	Пичугин Ю.А	124
57	Плотникова П.В.	91
61	Побегалов Г.Е.	101
55	Попугаева Е.А.	79
50	Рыкшин А.Ю	136
9	Сабанцев А.В	101
39	Серов Д.В	118
36	Смирнов А.С	144
57	Смирнов С.Л.	101
)8	Степанов В.А	48, 55
)8	Уланов П.Н	136
57	Федечкин С.О.	101
35	Фирсова Е.Г.	164
24	Харалдин И.А.	39
)8	Ходорковский М.А.	101
61	Хоменко А.В.	61
55	Хрущенко А.А.	16
26	Шалыгин В.А	157
26		

Научное издание

### НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ВЕДОМОСТИ САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ПОЛИТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ «ST. PETERSBURG STATE POLYTECHNICAL UNIVERSITY JOURNAL. PHYSICS AND MATHEMATICS» № 1 (189) 2014

Учредитель — Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

Журнал зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор). Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-51457 от 19.10.2012 г.

#### Редакция

д-р физ.-мат. наук, профессор В.К. Иванов — председатель ред. коллегии д-р физ.-мат. наук, профессор А.Э. Фотиади — зам. председателя ред. коллегии канд. физ.-мат. наук, доцент В.М. Капралова — ответственный секретарь канд. физ.-мат. наук О.А. Ящуржинская — научный редактор, корректор А.С. Колгатина — технический секретарь

Телефон редакции 294-22-85

E-mail: physics@spbstu.ru

Компьютерная верстка А.Н. Смирнова

Директор Издательства Политехнического университета А.В. Иванов

Лицензия ЛР № 020593 от 07.08.97

Подписано в печать 27.03.2014. Формат 60×84 1/8. Бум. тип. № 1. Печать офсетная. Усл. печ. л. 21,46. Уч.-изд. л. 21,46. Тираж 1000. Заказ

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет Издательство Политехнического университета

член Издательско-полиграфической ассоциации университетов России

Адрес университета и издательства: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.

#### УСЛОВИЯ ПУБЛИКАЦИИ СТАТЕЙ

в журнале «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки»

#### ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Журнал «Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физикоматематические науки» является периодическим печатным научным рецензируемым изданием. Зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере информационных технологий и массовых коммуникаций (Свидетельство ПИ №ФС77-52144 от 11 декабря 2012 г.) и распространяется по подписке агентства «Роспечать» (индекс издания 71823).

С 2008 г. выпускается в составе сериального периодического издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ» (ISSN 1994-2354). Сохраняя преемственность и продолжая научные и публикационные традиции сериального издания «Научно-технические ведомости СПбГПУ», издается под сдвоенными международными стандартными сериальными номерами ISSN 1994-2354, (сериальный) ISSN 2304-9782. С 2012 г. начат выпуск журнала в двуязычном оформлении.

Издание входит в Перечень ведущих научных рецензируемых журналов и изданий (перечень ВАК) и принимает для печати материалы научных исследований, а также статьи для опубликования основных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора наук и кандидата наук по следующим основным научным направлениям: **Физика, Математика, Механика, Астрономия**. Научные направления журнала учитываются ВАК Минобрнауки РФ при защите докторских и кандидатских диссертаций в соответствии с Номенклатурой специальностей научных работников.

Журнал представлен в Реферативном журнале ВИНИТИ РАН и включен в фонд научно-технической литературы (НТЛ) ВИНИТИ РАН, а также в международной системе по периодическим изданиям «Ulrich's Periodicals Directory». Индексирован в базе данных «Российский индекс научного цитирования» (РИНЦ).

Периодичность выхода журнала – 4 номера в год.

Редакция журнала соблюдает права интеллектуальной собственности и со всеми авторами научных статей заключает издательский лицензионный договор.

#### 2. ТРЕБОВАНИЯ К ПРЕДСТАВЛЯЕМЫМ МАТЕРИАЛАМ

#### 2.1. Оформление материалов

1. Рекомендуемый объем статей – 12-20 страниц формата А-4 с учетом графических вложений. Количество графических вложений (диаграмм, графиков, рисунков, фотографий и т.п.) не должно превышать шести.

2. Число авторов статьи, как правило, не должно превышать пяти человек.

3. Авторы должны придерживаться следующей обобщенной структуры статьи: вводная часть (актуальность, существующие проблемы – объем 0,5 – 1 стр.); основная часть (постановка и описание задачи, методика исследования, изложение и обсуждение основных результатов); заключительная часть (предложения, выводы – объем 0,5 – 1 стр.); список литературы (оформление по ГОСТ 7.0.5-2008).

4. УДК (UDC) оформляется и формируется в соответствии с ГОСТ 7.90-2007.

5. Набор текста осуществляется в редакторе MS Word 2007 – 2010, формул – в редакторе MS Equation или MathType. Таблицы набираются в том же формате, что и основной текст.

Шрифт – Times New Roman, размер шрифта основного текста – 14, интервал – 1,5. Таблицы большого размера могут быть набраны кеглем 12. Параметры страницы: поля слева – 3 см, сверху и снизу – 2 см, справа – 1,5 см. Текст размещается без переносов. Абзацный отступ – 1 см.

#### 2.2. Представление материалов

1. Представление всех материалов осуществляется в электронном виде через электронную редакцию (http://journals.spbstu.ru). После регистрации в системе электронной редакции автоматически формируется персональный профиль автора, позволяющий взаимодействовать как с редакцией, так и с рецензентом.

2. Вместе с материалами статьи должно быть представлено экспертное заключение о возможности опубликования материалов в открытой печати.

3. Файл статьи, подаваемый через электронную редакцию, должен содержать только сам текст без названия, списка литературы, аннотации и ключевых слов, фамилий и сведений об авторах. Все эти поля заполняются отдельно через электронную редакцию.

#### 2.3. Рассмотрение материалов

Предоставленные материалы (п. 2.2) первоначально рассматриваются редакционной коллегией и передаются для рецензирования. После одобрения материалов, согласования различных вопросов с автором (при необходимости) редакционная коллегия сообщает автору решение об опубликовании статьи. В случае отказа в публикации статьи редакция направляет автору мотивированный отказ.

При отклонении материалов из-за нарушения сроков подачи, требований по оформлению или как не отвечающих тематике журнала материалы не публикуются и не возвращаются.

Редакционная коллегия не вступает в дискуссию с авторами отклоненных материалов.

При поступлении в редакцию значительного количества статей их прием в очередной номер может закончиться ДОСРОЧНО.

Более подробную информацию можно получить по телефону редакции: (812) 294-22-85 с 10.00 до 18.00 – Александра Сергеевна или по e-mail: physics@spbstu.ru