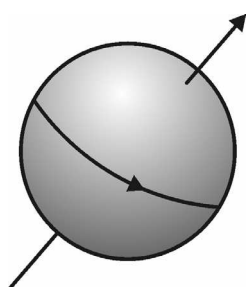




**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ
И ПРИКЛАДНЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ
2002–2009 гг.**





**BELARUS STATE UNIVERSITY
INSTITUTE FOR NUCLEAR PROBLEMS**

**BASIC AND APPLIED
PHYSICAL RESEARCH
2002–2009**

Collected Papers

Editor: Professor V. G. Baryshevsky

**MINSK
2009**

**БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ПРОБЛЕМ**

**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ
И ПРИКЛАДНЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ
2002–2009 гг.**

Сборник научных трудов

Под редакцией
профессора В. Г. Барышевского

**МИНСК
2009**

УДК 53(082)
ББК 22.3я43
Ф94

Редакционная коллегия:
доктор физико-математических наук,
профессор *В. Г. Барышевский* (отв. редактор);
кандидат физико-математических наук
С. Н. Сытова (отв. секретарь);
доктор физико-математических наук *М. В. Коржик*;
доктор физико-математических наук *А. С. Лобко*;
доктор физико-математических наук *С. А. Максименко*;
доктор физико-математических наук *В. В. Тихомиров*

Ф94 **Фундаментальные** и прикладные физические исследования. 2002–2009 гг. :
сб. науч. тр. / редкол. : В. Г. Барышевский (отв. ред.) [и др.] ; под ред. проф. В. Г. Барышевского. – Минск : БГУ, 2009. – 415 с. : ил.
ISBN 978-985-518-147-8.

В сборнике представлены результаты научных исследований, выполненных сотрудниками НИИ ЯП БГУ за 2002–2009 гг. в области ядерной и теоретической физики, прикладной физики и приборостроения.

Предназначено для научных работников, а также студентов и аспирантов физических специальностей вузов.

УДК 53(082)
ББК 22.3я43

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОБЪЕМНОГО ЛАЗЕРА НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ С СЕТОЧНЫМ РЕЗОНАТОРОМ

**В. Г. Барышевский, Н. А. Белоус, А. А. Гуринович, В. А. Евдокимов,
А. С. Лобко, П. В. Молчанов, А. В. Оськин, В. И. Столярский**

Генерация объемного лазера на свободных электронах (ОЛСЭ) с сеточным фотонным кристаллом, созданным из натянутых металлических нитей, была исследована в режиме лампы обратной волны. Исследования порога генерации были проведены для различных сеточных фотонных кристаллов и получена зависимость порога генерации от длины фотонного кристалла.

1. Введение

В настоящее время широко распространены генераторы, использующие излучение электронного пучка в периодической замедляющей структуре (лампы бегущей волны, лампы обратной волны, лазеры на свободных электронах) [1]. Дифракционное излучение [2] в периодической структуре лежит в основе работы лампы бегущей волны [3, 4], лампы обратной волны и лазеров, использующих излучение Смит – Парсела [5–7], а также объемных лазеров на свободных электронах, использующих двух- или трехмерную распределенную обратную связь [8–11]. Использование смит-парселовских лазеров и подобных им устройств ограничено необходимостью точной проводки электронного пучка над замедляющей структурой (электронный пучок должен проходить на расстоянии $\delta \leq \frac{\lambda\beta\gamma}{4\pi}$ над дифракционной структурой, здесь λ – длина волны излучения, $\beta = v/c$, где v – скорость электронного пучка, γ – Лоренц-фактор). Электрическая стойкость резонатора ограничивает мощность излучения и ток электронного пучка. Длина волны излучения обычных волноводных систем существенно ограничивается требованием на поперечные размеры резонатора, которые не могут существенно превосходить длину волны.

Большая часть указанных проблем может быть преодолена в ОЛСЭ [8–12]. В ОЛСЭ благодаря объемному характеру взаимодействия с электромагнитной волной взаимодействует большая часть электронного пучка. Поперечные размеры резонатора ОЛСЭ могут существенно превосходить длину волны $D \gg \lambda$. Кроме того, электронный пучок и мощность излучения распределены по всему объему, что улучшает электрическую прочность системы. Один из типов ОЛСЭ [11] может быть создан на основе объемного сеточного резонатора (сеточного фотонного кристалла), который образован периодически натянутыми диэлектрическими или металлическими нитями. Сеточная структура из диэлектрических

нитей была исследована в [13], где было продемонстрировано, что добротность такого фотонного кристалла может быть достаточно высокой (10^4 – 10^6).

Теоретический анализ [14, 16] показал, что в диапазоне длин волн, в котором толщина скин-слоя меньше радиуса металлической нити, периодическая металлическая сетка слабо поглощает электромагнитное излучение и сеточный фотонный кристалл из металлических нитей оказывается почти прозрачным для такого излучения. Выводы, сделанные в [14], позволили обосновать возможность создания ОЛСЭ с сеточным фотонным кристаллом из металлических нитей.

Первая генерация ОЛСЭ с сеточным фотонным кристаллом из металлических нитей была получена в эксперименте [15] в полном соответствии с выводами [14].

В настоящем сообщении исследуется зависимость интенсивности генерируемого излучения от длины фотонного кристалла в режиме лампы обратной волны.

2. Концепция

Распространение волн через фотонные кристаллы является предметом многочисленных исследований [17–20].

Существует ряд трудностей, возникающих при рассмотрении взаимодействия электромагнитной волны с фотонным кристаллом из металлических нитей. Хорошо известно, что металлическая сетка хорошо отражает электромагнитные волны, поэтому возникает вопрос, будет ли волна проникать в резонатор, внутри которого помещен набор металлических сеток (см. рис. 1). Теоретический анализ [14, 16] показал, что фотонный кристалл из металлических нитей не поглощает электромагнитные волны и почти прозрачен в диапазоне частот от гигагерц до терагерц. В этом диапазоне глубина скин-слоя δ для большинства металлов составляет не больше нескольких микрон (например, для 10 ГГц $\delta_{Cu} = 0.66$ мкм, $\delta_{Al} = 0.8$ мкм, $\delta_W = 1.16$ мкм и т. д.), поэтому металлические нити могут рассматриваться как идеально проводящие.

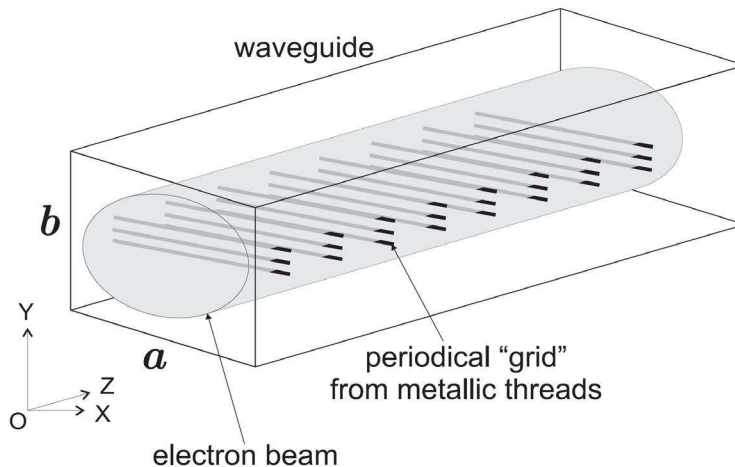


Рис. 1. Сеточный фотонный кристалл

В соответствии с работами [14, 16] показатель преломления фотонного кристалла можно записать в виде

$$n_{||(\perp)}^2 = 1 + \frac{\eta_{||(\perp)}}{k^2}, \quad (1)$$

где

$$\eta_{||(\perp)} = \frac{4\pi}{\Omega_2} \frac{A_0}{1 + i\pi A_0 - 2CA_0}, \quad (2)$$

$n_{||}$ и $n_{\perp}$ – показатели преломления для волн с поляризацией, параллельной и перпендикулярной оси нити соответственно; $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число; R – радиус нити; $\Omega_2 = d_y \cdot d_z$, где d_y и d_z – период фотонного кристалла вдоль оси y и z соответственно, $C = 0.5772$ константа Эйлера. Величины $A_{0(||)}$ и $A_{0(\perp)}$ для идеально проводящего цилиндра определены в [15, 16]:

$$\begin{aligned} A_{0(||)} &= \frac{1}{\pi} \frac{J_0(kR)N_0(kR)}{J_0^2(kR) + N_0^2(kR)} + \frac{i}{\pi} \frac{J_0^2(kR)}{J_0^2(kR) + N_0^2(kR)}, \\ A_{0(\perp)} &= \frac{1}{\pi} \frac{J_0'(kR)N_0'(kR)}{J_0'^2(kR) + N_0'^2(kR)} + \frac{i}{\pi} \frac{J_0'^2(kR)}{J_0'^2(kR) + N_0'^2(kR)}, \end{aligned} \quad (3)$$

где J_0, N_0, J_0' и N_0' – функции Бесселя и Неймана и их производные соответственно.

Для описания нитей с конечной проводимостью следует пользоваться выражениями:

$$\begin{aligned} A_{0(||)} &= \frac{i}{\pi} \frac{J_0(k_t R)J_0'(kR) - \sqrt{\varepsilon_t} J_0'(k_t R)J_0(kR)}{J_0(k_t R)H_0^{(1)'}(kR) - \sqrt{\varepsilon_t} J_0'(k_t R)H_0^{(1)}(kR)}, \\ A_{0(\perp)} &= \frac{i}{\pi} \frac{J_0(k_t R)J_0'(kR) - \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_t}} J_0'(k_t R)J_0(kR)}{J_0(k_t R)H_0^{(1)'}(kR) - \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_t}} J_0'(k_t R)H_0^{(1)}(kR)}, \end{aligned} \quad (4)$$

где ε_t – диэлектрическая проницаемость материала нити, $k_t = \sqrt{\varepsilon_t} k$, $H_0^{(1)}$ – функция Ханкеля нулевого порядка. Выражения (3) могут быть получены из (4) при $\varepsilon_t \rightarrow \infty$.

Разница в показателях преломления для волн с разной поляризацией ($n_{||} \neq n_{\perp}$) свидетельствует о том, что система обладает оптической анизотропией (т. е. двулучепреломлением и дихроизмом). Устранить эту анизотропию можно, чередуя положение нитей в фотонном кристалле, т. е. расположив нити в каждом слое ортогонально нитям в предыдущем и последующем слоях.

Излучение Смит – Парсела (дифракционное излучение) возникает при прохождении электронного пучка через фотонный кристалл при выполнении условия

$$\omega - \vec{k}n(k)\vec{v} = \vec{\tau}\vec{v}, \quad (5)$$

где $\vec{v}$ – скорость электронного пучка, $\vec{\tau}$ – вектор обратной решетки фотонного кристалла и $n(k)$ – показатель преломления (см. выражение (1)). Пусть вектор скорости электронного пучка направлен вдоль оси OZ , тогда (5) можно записать в виде

$$k - \tau_z \beta = k n(k) \beta \cos \theta, \quad (6)$$

где $\beta = \frac{v}{c}$, угол между $\vec{k}$ и скоростью электронного пучка θ , $\tau_z = \frac{2\pi m_h}{d_z}$, а $m_h = 1, 2, \dots$ номер гармоники. Корни этого уравнения определяют спектр частот дифракционного излучения, возникающего при движении электрона в фотонном кристалле.

Согласно [14, 16], дифракционное излучение в металлическом волноводе прямоугольного сечения с сеточным фотонным кристаллом внутри описывается уравнением, подобным (6):

$$\left(\frac{\omega - \tau_z v}{v}\right)^2 = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - (\kappa_{mn}^2 - \eta), \quad (7)$$

где η определяется выражением (2), а собственные значения κ_{mn} определяются поперечными размерами волновода (ширина a и высота b):

$$\kappa_{mn}^2 = \left(\frac{\pi m}{a}\right)^2 + \left(\frac{\pi n}{b}\right)^2. \quad (8)$$

Корни уравнения (7) для $\frac{\eta}{\tau_z^2 \beta^2} \ll 1$ можно записать в виде

$$\begin{aligned} \omega_1(m, n) &= \frac{\tau_z v}{1 - \beta^2} \left(1 - \beta \sqrt{1 - \frac{(\kappa_{mn}^2 - \eta) (1 - \beta^2)}{\tau_z^2 \beta^2}} \right), \\ \omega_2(m, n) &= \frac{\tau_z v}{1 - \beta^2} \left(1 + \beta \sqrt{1 - \frac{(\kappa_{mn}^2 - \eta) (1 - \beta^2)}{\tau_z^2 \beta^2}} \right). \end{aligned} \quad (9)$$

Здесь уместно вспомнить, что $\tau_z = \frac{2\pi m_h}{d_z}$, где $m_h = 1, 2, \dots$ номер гармоники. Из (9) следует, что чем выше номер гармоники, тем выше частота излучения. Например, для электронного пучка с энергией 200 кэВ при $\theta \sim 20^\circ$ и $d_z = 1.6$ см частоты излучения, соответствующие первой гармонике ($m_h = 1$), определяются двумя корнями выражения (7) – это 10 ГГц и 40 ГГц соответственно, а для 30-й гармоники ($m_h = 30$) эти частоты: 230 ГГц и 1 ТГц.

3. Экспериментальная установка

Сеточный фотонный кристалл был изготовлен из вольфрамовых нитей диаметром 100 мкм, натянутых в волноводе прямоугольного сечения с поперечными размерами $a = 35$ мм, $b = 35$ мм и длиной 300 мм (см. рис. 1).

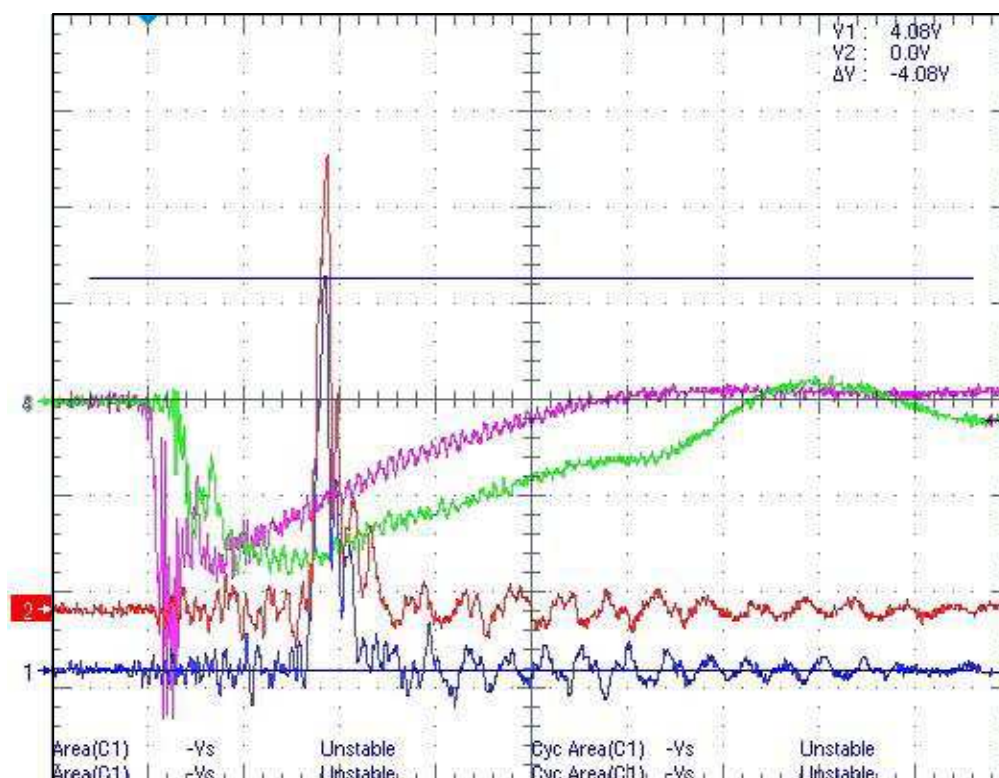


Рис. 2. Пример полученной осциллограммы

Расстояние между нитями в направлении OZ составляло $d_z = 12.5$ мм, выбранный период обеспечивал излучение на частоте ~ 8.4 ГГц. Электронный пучок диаметром 32 мм с энергией электронов ~ 200 кэВ и током ~ 2 кА проводился через сеточную структуру в магнитном поле $\sim 1.55 - 1.6$ Тл.

Сеточная структура была изготовлена в виде отдельных рамок, содержащих 1, 3 или 5 параллельных нитей, отстоящих друг от друга на расстояние $d_y = 6$ мм. Рамки были соединены таким образом, чтобы создать сеточную структуру с периодом d_z . Измерения частоты излучения проводились с использованием волноводных фильтров, перестраиваемых в диапазоне 7.8 – 12.4 ГГц с полосой пропускания 0.25 ГГц, 0.5 ГГц и 1 ГГц. Ослабление излучения в полосе непропускания фильтра ~ 25 дБ.

4. Результаты эксперимента

Целью эксперимента было изучение зависимости интенсивности генерируемого излучения от длины фотонного кристалла.

В этом эксперименте максимальная мощность излучения ОЛСЭ для 1 нити в рамке составляет 1.5 кВт, для 3 нитей – 5 кВт и 10 кВт для 5 нитей. Пример осциллограммы, полученной в эксперименте, приведен на рис. 2. Измери-

тельные каналы 1 и 2 использовались для регистрации формы СВЧ импульса в измерительном канале без фильтра (канал 1) и с частотным фильтром (канал 2), канал 3 для регистрации тока пучка и канал 4 напряжения на диоде. Шаг временной шкалы – 80 нс.

По экспериментальным осциллограммам был получен спектр излучения генератора ОЛСЭ, максимум спектра плотности мощности излучения находится в полосе 8.3–8.6 ГГц (рис. 3).

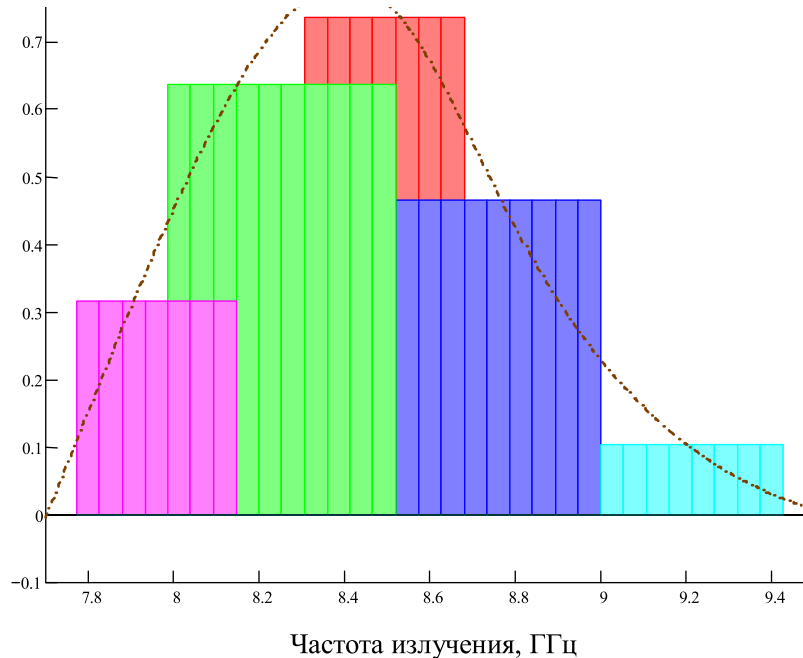


Рис. 3. Частотный спектр излучения ОЛСЭ

В ходе работ была получена зависимость частоты излучения от величины магнитного поля, магнитная перестройка частоты в полосе 8.0–8.9 ГГц. На рис. 4 представлены частотные кривые зависимости пиковой и средней мощности излучения импульса от величины ведущего магнитного поля для двух частотных диапазонов 8.0–8.45 ГГц и 8.45–8.9 ГГц. Максимальная мощность излучения была нормирована на единицу. Характерный минимум в области 1,7 Тл соответствует циклотронному поглощению обратной электромагнитной волны вращающимся электронным пучком.

Были проведены два типа экспериментов для исследования зависимости порога генерации от длины сеточного резонатора.

1. Была исследована зависимость мощности излучения от длины фотонного кристалла для структуры с одной нитью в рамке, равноотстоящей от верхней и нижней стенок волновода (рис. 5). Измерения были проведены для 4, 8, 10 и 24 рамок.

Результаты этих измерений приведены на рис. 6, где мощность излучения нормирована к максимальному значению мощности (1.5 кВт).

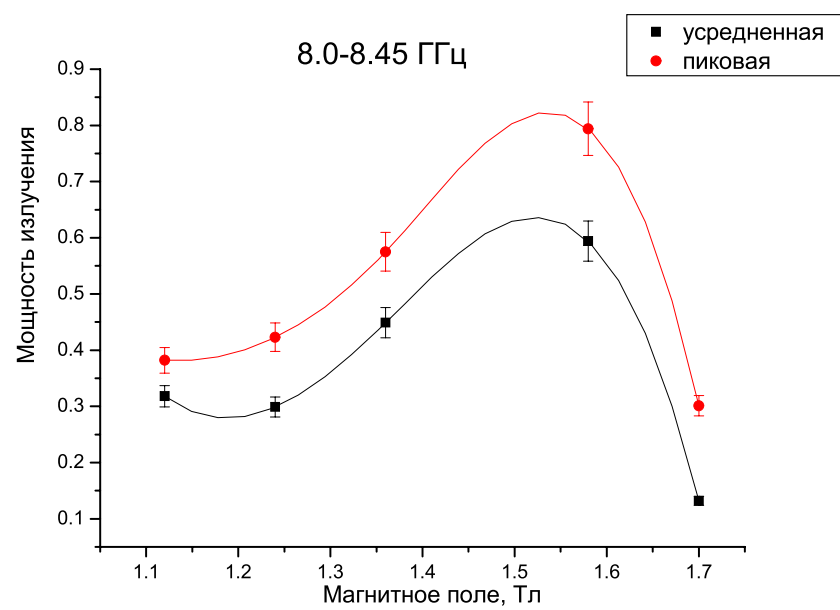
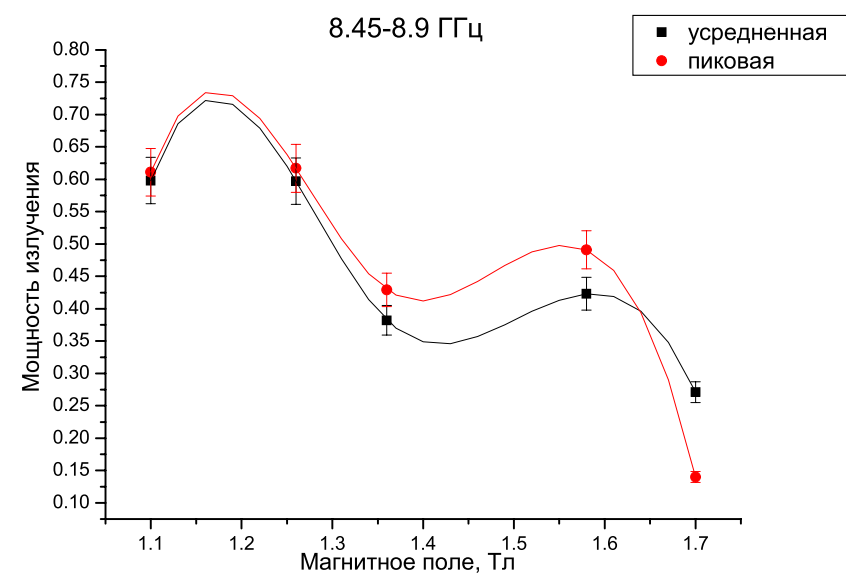


Рис. 4. Магнитная перестройка частоты излучения

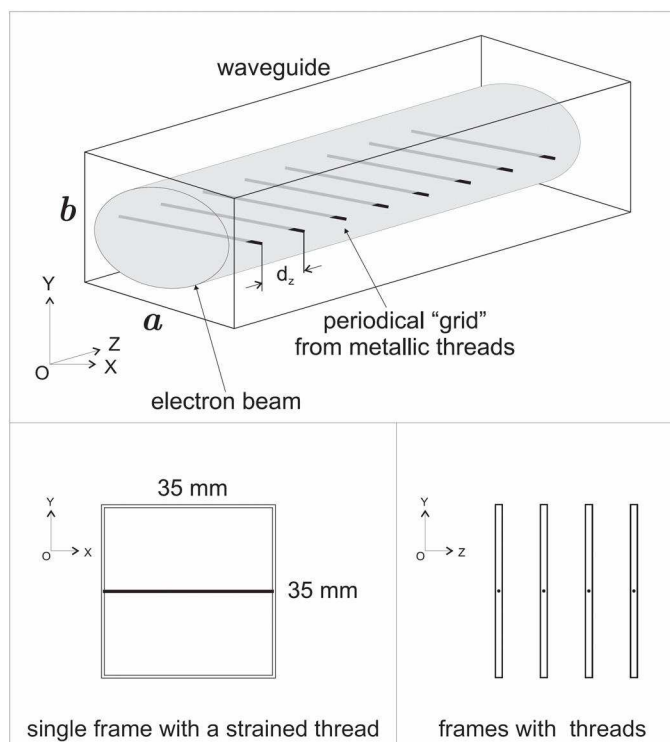


Рис. 5. Фотонный кристалл с одной нитью в рамке, равноотстоящей от верхней и нижней стенок волновода

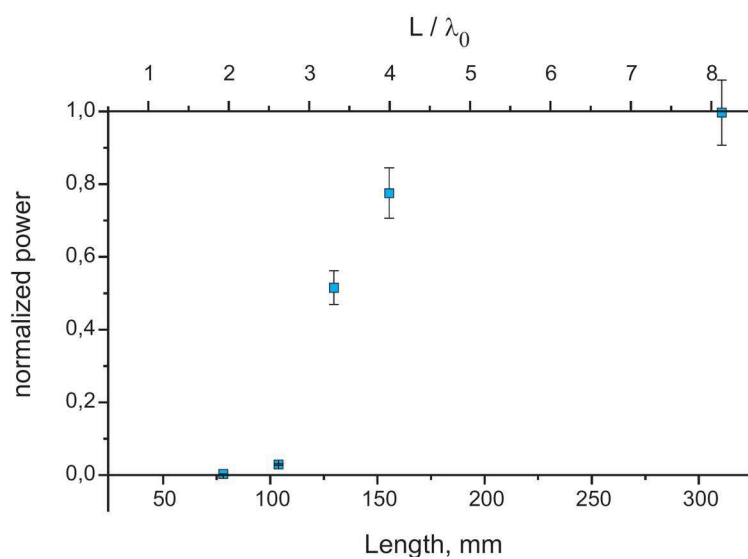


Рис. 6. Зависимость мощности излучения от длины фотонного кристалла с 1 нитью в рамке, верхняя шкала показывает длину кристалла в длинах волн L/λ_0 , где $\lambda_0 = 3.6$ см

2. Была исследована зависимость мощности излучения от длины фотонного кристалла для структуры с пятью нитями в рамке, отстоящими друг от друга на расстоянии $d_y = 6$ мм (рис. 7). Измерения были проведены для 4, 6, 10, 12, 14 и 22 рамок.

Результаты этих измерений приведены на рис. 8, где мощность излучения нормирована к максимальному измеренному значению мощности (10 кВт). Сплошная кривая на этом рисунке – результат численного моделирования.

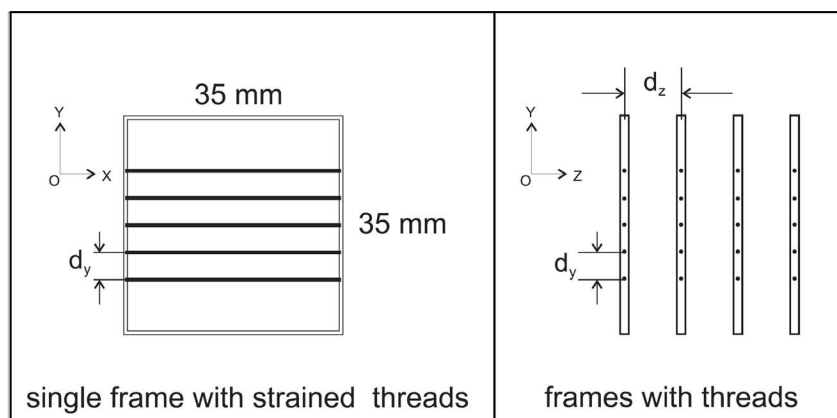


Рис. 7. Фотонный кристалл с пятью нитями в рамке, натянутыми на расстоянии $d_y = 6$ мм друг от друга

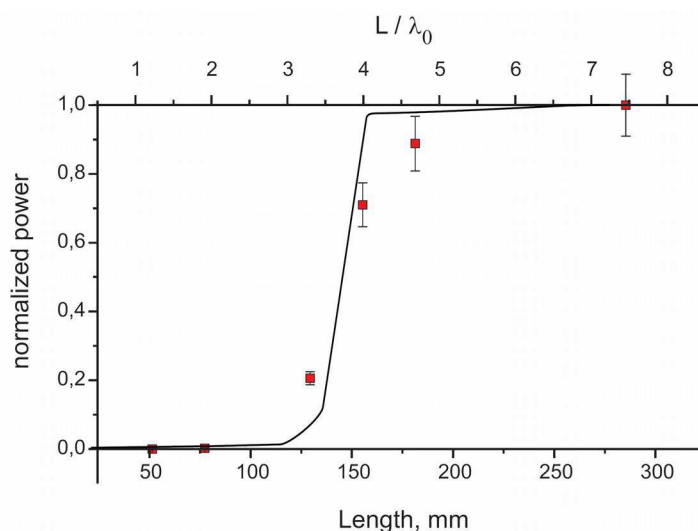


Рис. 8. Экспериментально измеренная зависимость мощности излучения от длины фотонного кристалла с 5 нитями в рамке показана точками и результат моделирования мощности излучения электронного пучка с энергией ~ 200 кэВ и плотностью тока ~ 2 кА/см² (сплошная кривая)

5. Заключение

Генерация объемного лазера на свободных электронах (ОЛСЭ) с сеточным фотонным кристаллом, созданным из натянутых металлических нитей, была исследована в режиме лампы обратной волны. Исследования порога генерации были проведены для различных сеточных фотонных кристаллов и получена зависимость порога генерации от длины фотонного кристалла. Использование объемных резонаторов описанного типа позволяет ослабить требования на форму электронного пучка и точность его проводки, поскольку в данной системе электронный пучок проходит непосредственно сквозь фотонный кристалл.

Литература

1. *Granatstein V. L., Parker R. K., Armstrong C. M.* // Proc. IEEE. 1999. Vol. 87. P. 5.
2. *Болотовский Б. М., Воскресенский Г. В.* // УФН. 1966. Vol. 88. P. 209.
3. *Kompfner R.* // Wireless World. 1946. Vol. 52. P. 369.
4. *Pierce R.* // Proc. IRE. 1947. Vol. 35. P. 111.
5. *Smith S. J., Purcell E. M.* // Phys. Rev. 1953. Vol. 92. P. 1069.
6. *Salisbury W. W.* // US Patent. 1953. 2,634,372; J. Opt. Soc. Am. 1970. Vol. 60. P. 1279.
7. *Doucas G., Mulvey J. H. et al.* // Phys.Rev.Lett. 1992. Vol. 69. P. 1761; *Walsh J. E.* // US Patent 1996. 5,790,585.
8. *Baryshevsky V. G.* // NIM. A. 2000. Vol. 445. P. 281; LANL e-print archive physics/9806039.
9. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G. et al.* // NIM A. 2002. Vol. 483. P. 21.
10. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G. et al.* // NIM A. 2003. Vol. 507. P. 137.
11. *Baryshevsky V. G. et al.* // Eurasian Patent no. 004665.
12. *Baryshevsky V. G., Feranchuk I. D.* // Phys.Lett. A. 1984. 141.
13. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G. et al.* // NIM A. 1997. 71.
14. *Baryshevsky V. G., Gurinovich A. A.* // LANL e-print archive: physics/0409107.
15. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G. et al.* // LANL e-print archive physics/0409125.
16. *Baryshevsky V. G., Gurinovich A. A.* // NIM B. 2006. Vol. 252. P. 92.
17. *Pokrovsky A. L., Efros A. L.* // Phys. Rev. B. 2002. Vol. 65. P. 045110.
18. *Pokrovsky A. L.* // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 69. P. 195108.
19. *Smirnova E. I., Chen C. et al.* // J. Appl. Phys. 2002. Vol. 91(3). P. 960.
20. *Smirnova E. I., Chen C.* // J. Appl. Phys. 2003. Vol. 93(10). P. 5859.
21. *James R. W.* The Optical Principles of Diffraction of X-Rays. 1982.
22. *Chang Shih-Lin.* Multiple diffraction of x-rays in crystals. 1984.
23. *Nikolsky V. V.* Electrodynamics and propagation of radio-wave. 1978.

EXPERIMENTAL STUDY OF A VOLUME FREE ELECTRON LASER WITH A "GRID" RESONATOR

**V. G. Baryshevsky, N. A. Belous, A. A. Gurinovich, V. A. Evdokimov,
A. S. Lobko, P. V. Molchanov, A. V. Oskin, V. I. Stolyarsky**

Operation of Volume Free Electron Laser with a "grid" photonic crystal, built from periodically strained metallic threads, was studied in the backward wave regime. Generation threshold was observed for different "grid" photonic crystals. Dependence of the generation threshold on the resonator length was investigated.

ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОБЪЕМНОГО ЛАЗЕРА НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ С СЕТОЧНЫМ РЕЗОНАТОРОМ С ПЕРЕМЕННЫМИ ПАРАМЕТРАМИ

В. Г. Барышевский, А. А. Гуринович

Рассмотрены электродинамические свойства и генерация излучения в объемном лазере на свободных электронах с сеточным резонатором (сеточным фотонным кристаллом) с изменяющимися в пространстве параметрами. Получены уравнения, описывающие генерацию излучения в объемном лазере на свободных электронах с сеточным резонатором. Показано, что использование фотонного кристалла с переменным периодом увеличивает интенсивность излучения и позволяет создать динамический вигглер с переменным периодом. Это позволяет создать двухкаскадный ЛСЭ с переменными параметрами, эффективность которого может быть значительно выше, чем эффективность обычного ЛСЭ.

1. Введение

Дифракционное излучение [1] в периодических структурах лежит в основе работы лампы бегущей волны (ЛБВ) [2, 3], лампы обратной волны (ЛОВ) и таких устройств, как смит-парселовский лазер [4–6] и объемный лазер на свободных электронах [7–10].

Объемный лазер на свободных электронах (ОЛСЭ) – это генератор излучения, использующий неоднородную распределенную обратную связь, создаваемую брэгговскими дифракционными решетками или фотонным кристаллом.

Один из типов ОЛСЭ [11] может быть создан на основе объемного сеточного резонатора (сеточного фотонного кристалла), который образован периодически натянутыми диэлектрическими или металлическими нитями [1, 12, 13, 15].

В настоящей статье рассмотрены электродинамические свойства и генерация излучения в объемном лазере на свободных электронах с сеточным резонатором (сеточным фотонным кристаллом) с изменяющимися в пространстве параметрами.

Получены уравнения, описывающие генерацию излучения в объемном лазере на свободных электронах с сеточным резонатором. Показано, что использование фотонного кристалла с переменным периодом увеличивает интенсивность излучения и позволяет создать динамический вигглер с переменным периодом. Это позволяет создать двухкаскадный ЛСЭ с переменными параметрами, эффективность которого может быть значительно выше, чем эффективность обычного ЛСЭ.

2. Теория генерации в ОЛСЭ с фотонным кристаллом с переменным периодом

Уравнения, описывающие генерацию ОЛСЭ с фотонным кристаллом (рис. 1), можно получить, рассмотрев систему уравнений Максвелла и уравнений движения для частицы в электромагнитном поле:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{H} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \vec{j}, \operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}, \\ \operatorname{div} \vec{D} &= 4\pi\rho, \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0, \end{aligned} \quad (1)$$

здесь $\vec{E}$ и $\vec{H}$ – электрическое и магнитное поля, $\vec{j}$ и ρ – плотность тока и заряда, электромагнитная индукция $D_i(\vec{r}, t') = \int \varepsilon_{il}(\vec{r}, t-t') E_l(\vec{r}, t') dt'$ и, следовательно, $D_i(\vec{r}, \omega) = \varepsilon_{il}(\vec{r}, \omega) E_l(\vec{r}, \omega)$, индексы $i, l = 1, 2, 3$ соответствуют осям x, y, z .

Плотность тока и заряда определяются выражениями:

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = e \sum_{\alpha} \vec{v}_{\alpha}(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_{\alpha}(t)), \quad \rho(\vec{r}, t) = e \sum_{\alpha} \delta(\vec{r} - \vec{r}_{\alpha}(t)),$$

где e – заряд электрона, $\vec{v}_{\alpha}$ – скорость частицы α (α нумерует частицы пучка);

$$\frac{d\vec{v}_{\alpha}}{dt} = \frac{e}{m\gamma_{\alpha}} \left\{ \vec{E}(\vec{r}_{\alpha}, t) + \frac{1}{c} [\vec{v}_{\alpha} \times \vec{H}(\vec{r}_{\alpha}, t)] - \frac{\vec{v}_{\alpha}}{c^2} (\vec{v}_{\alpha} \vec{E}(\vec{r}_{\alpha}, t)) \right\},$$

здесь $\gamma_{\alpha} = (1 - \frac{v_{\alpha}^2}{c^2})^{-\frac{1}{2}}$ – Лоренц-фактор, $\vec{E}(\vec{r}_{\alpha}, t)$ и $\vec{H}(\vec{r}_{\alpha}, t)$ – электрическое и магнитное поля в точке, где находится частица α , $\vec{r}_{\alpha} = \vec{r}_{\alpha}(t)$.

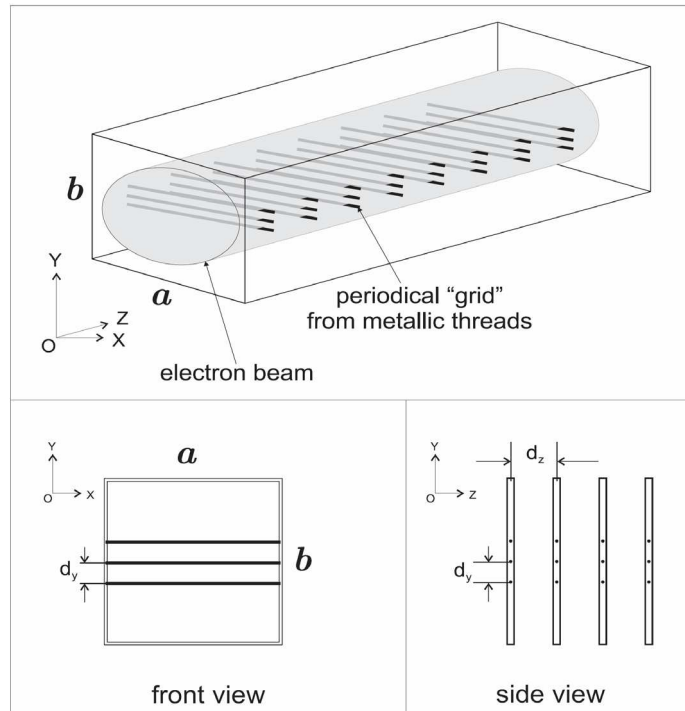


Рис. 1. Сеточный фотонный кристалл

Тензор диэлектрической проницаемости можно записать в виде $\hat{\varepsilon}(\vec{r}) = 1 + \hat{\chi}(\vec{r})$, где $\hat{\chi}(\vec{r})$ – диэлектрическая восприимчивость. При $\hat{\chi} \ll 1$ систему (1) можно записать:

$$\Delta \vec{E}(\vec{r}, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \int \hat{\varepsilon}(\vec{r}, t - t') \vec{E}(\vec{r}, t') dt' = 4\pi \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{j}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \rho(\vec{r}, t) \right). \quad (2)$$

Для идеальной дифракционной решетки $\hat{\chi}(\vec{r}) = \sum_{\vec{\tau}} \hat{\chi}_{\vec{\tau}}(\vec{r}) e^{i\vec{\tau}\vec{r}}$, где $\vec{\tau}$ – вектор обратной решетки [16, 17].

Пусть период дифракционной решетки (фотонного кристалла) плавно меняется на расстоянии, значительно превосходящем период дифракционной решетки (фотонного кристалла). В этом случае удобно представить восприимчивость $\hat{\chi}(\vec{r})$ в форме, в которой ее используют в теории дифракции рентгеновских лучей в искаженных кристаллах [18]:

$$\hat{\chi}(\vec{r}) = \sum_{\vec{\tau}} e^{i\Phi_{\vec{\tau}}(\vec{r})} \hat{\chi}_{\vec{\tau}}(\vec{r}), \quad (3)$$

где $\Phi_{\vec{\tau}}(\vec{r}) = \int \vec{\tau}(\vec{r}') d\vec{l}'$, $\vec{\tau}(\vec{r}')$ – вектор обратной решетки вблизи точки $\vec{r}'$. Выражения для восприимчивости $\hat{\chi}$ сеточного фотонного кристалла получены в [1, 12]:

$$\chi_{\parallel(\perp)} = \frac{4\pi}{\Omega_2 k^2} \frac{A_{0\parallel(\perp)}}{1 + i\pi A_{0\parallel(\perp)} - 2CA_{0\parallel(\perp)}}, \quad (4)$$

символы $\parallel$ и $\perp$ обозначают волны с поляризацией параллельной и перпендикулярной оси нитей, образующих сеточный фотонный кристалл соответственно. $k = 2\pi/\lambda$ – волновое число; R – радиус нити; $C = 0.5772$ – постоянная Эйлера; $\Omega_2 = d_y \cdot d_z$, где d_y и d_z – периоды фотонного кристалла вдоль осей y и z соответственно. Значения $A_{0\parallel}$ и $A_{0\perp}$ для нитей с конечной проводимостью получены в работе [1]:

$$A_{0\parallel} = \frac{i}{\pi} \frac{J_0(k_t R) J'_0(kR) - \sqrt{\varepsilon_t} J'_0(k_t R) J_0(kR)}{J_0(k_t R) H_0^{(1)'}(kR) - \sqrt{\varepsilon_t} J'_0(k_t R) H_0^{(1)}(kR)},$$

$$A_{0\perp} = \frac{i}{\pi} \frac{J_0(k_t R) J'_0(kR) - \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_t}} J'_0(k_t R) J_0(kR)}{J_0(k_t R) H_0^{(1)'}(kR) - \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_t}} J'_0(k_t R) H_0^{(1)}(kR)},$$

где ε_t – диэлектрическая проницаемость материала нити, $k_t = \sqrt{\varepsilon_t} k$, $H_0^{(1)}$ – функция Ханкеля нулевого порядка, J_0 и J'_0 – функции Бесселя и их производные.

В рассматриваемом случае, в отличие от теории дифракции рентгеновских лучей, $\hat{\chi}_{\vec{\tau}}$ зависит от $\vec{r}$ благодаря тому, что выражение для $\hat{\chi}_{\vec{\tau}}$ зависит от объема элементарной решетки Ω_2 фотонного кристалла, который, в отличие от случая естественного кристалла, может существенно меняться в пространстве. Следует напомнить, что для идеального кристалла без искажений, волна,

распространяющаяся в кристалле, может быть представлена в виде суперпозиции плоских волн:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{\tau}=0}^{\infty} \vec{A}_{\vec{\tau}} e^{i(\vec{k}_{\vec{\tau}} \vec{r} - \omega t)}, \quad (5)$$

где $\vec{k}_{\vec{\tau}} = \vec{k} + \vec{\tau}$.

В рассматриваемом случае решение (2) можно записать в виде (сравните с [18]):

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \text{Re} \left\{ \sum_{\vec{\tau}=0}^{\infty} \vec{A}_{\vec{\tau}} e^{i(\phi_{\vec{\tau}}(\vec{r}) - \omega t)} \right\}, \quad (6)$$

где $\phi_{\vec{\tau}}(\vec{r}) = \int_0^{\vec{r}} k(\vec{r}') d\vec{l}' + \Phi_{\vec{\tau}}(\vec{r})$ и $k(\vec{r})$ могут быть найдены как решения дисперсионного уравнения вблизи точки с координатами $\vec{r}$, интегрирование ведется по квазиклассической траектории, которая описывает движение волнового пакета в фотонном кристалле с искажениями решетки.

Рассмотрим случай, когда все волны, участвующие в процессе дифракции, лежат в одной плоскости (двухволновая дифракция, многоволновая дифракция [17, 16]), т. е. все вектора обратной решетки $\vec{\tau}$ компланарны. Пусть вектор поляризации волны ортогонален плоскости дифракции.

Запишем (6) в виде $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{e} E(\vec{r}, t)$, где

$$E(\vec{r}, t) = \text{Re} \left\{ \vec{A}_1 e^{i(\phi_1(\vec{r}) - \omega t)} + \vec{A}_2 e^{i(\phi_2(\vec{r}) - \omega t)} + \dots \right\}, \quad (7)$$

$$\phi_1(\vec{r}) = \int_0^{\vec{r}} \vec{k}_1(\vec{r}') d\vec{l}', \quad (8)$$

$$\phi_2(\vec{r}) = \int_0^{\vec{r}} \vec{k}_1(\vec{r}') d\vec{l}' + \int_0^{\vec{r}} \vec{\tau}(\vec{r}') d\vec{l}'. \quad (9)$$

Умножение (2) на $\vec{e}$ дает

$$\Delta E(\vec{r}, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \int \hat{\epsilon}(\vec{r}, t - t') E(\vec{r}, t') dt' = \quad (10)$$

$$= 4\pi \vec{e} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{j}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \rho(\vec{r}, t) \right). \quad (11)$$

Подставляя (7) в (11), можно получить

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} e^{i(\phi_1(\vec{r}) - \omega t)} [2i \vec{k}_1(\vec{r}) \vec{\nabla} A_1 + i \vec{\nabla} \vec{k}_1(\vec{r}) A_1 - k_1^2(\vec{r}) A_1 + \\ & + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_0(\omega, \vec{r}) A_1 + i \frac{1}{c^2} \frac{\partial \omega^2 \epsilon_0(\omega, \vec{r})}{\partial \omega} \frac{\partial A_1}{\partial t} + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_{-\tau}(\omega, \vec{r}) A_2 + \\ & + i \frac{1}{c^2} \frac{\partial \omega^2 \epsilon_{-\tau}(\omega, \vec{r})}{\partial \omega} \frac{\partial A_2}{\partial t}] + \text{сопряженные члены} = \\ & = 4\pi \vec{e} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{j}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \rho(\vec{r}, t) \right), \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} e^{i(\phi_2(\vec{r}) - \omega t)} [2i \vec{k}_2(\vec{r}) \vec{\nabla} A_2 + i \vec{\nabla} \vec{k}_2(\vec{r}) A_2 - k_2^2(\vec{r}) A_2 + \\ & + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_0(\omega, \vec{r}) A_2 + i \frac{1}{c^2} \frac{\partial \omega^2 \varepsilon_0(\omega, \vec{r})}{\partial \omega} \frac{\partial A_2}{\partial t} + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_r(\omega, \vec{r}) A_1 + \\ & + i \frac{1}{c^2} \frac{\partial \omega^2 \varepsilon_r(\omega, \vec{r})}{\partial \omega} \frac{\partial A_1}{\partial t}] + \text{сопряженные члены} = 4\pi \vec{e} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{j}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \rho(\vec{r}, t) \right), \end{aligned}$$

где $\vec{k}_2(\vec{r}) = \vec{k}_1(\vec{r}) + \vec{\tau}$, $\varepsilon_0(\omega, \vec{r}) = 1 + \chi_0(\vec{r})$ и использовано обозначение $\chi_0(\vec{r}) = \chi_{\tau=0}(\vec{r})$, $\varepsilon_r(\omega, \vec{r}) = \chi_r(\vec{r})$. Заметим, что для численного анализа (12) при $\chi_0 \ll 0$ удобно использовать $\vec{k}_1(\vec{r})$ в виде $\vec{k}_1(\vec{r}) = \vec{n} \sqrt{k^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \chi_0(\vec{r})}$.

Пусть период решетки фотонного кристалла изменяется только вдоль одной оси и это ось z .

Рассмотрим правую часть (2) и примем во внимание, что микроскопические токи и плотности представимы в виде суммы членов, содержащих дельта-функции, следовательно, правая часть может быть записана в виде

$$\begin{aligned} & e^{-i(\vec{k}_\perp \vec{r}_\perp + \phi_z(z) - \omega t)} 4\pi \vec{e} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{j}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \rho(\vec{r}, t) \right) = \\ & = -\frac{4\pi i \omega e}{c^2} \vec{e} \sum_\alpha \vec{v}_\alpha(t) \delta(\vec{r} - \vec{r}_\alpha(t)) e^{-i(\vec{k}_\perp \vec{r}_\perp + \phi_z(z) - \omega t)} \theta(t - t_\alpha) \theta(T_\alpha - t), \end{aligned} \quad (13)$$

где t_α — время влета частицы α в резонатор, T_α — время вылета частицы из резонатора, θ — функции в (13) отражают тот факт, что в моменты времени, предшествующие t_α и следующие за T_α , частица α не дает вклада в процесс.

Предположим, что для проводки электронного пучка через зону генерации используется сильное поле. Тогда задача становится одномерной (компоненты v_x и v_y подавлены). Усредняя правую часть (13) по положениям частицы в пучке, точкам влета частицы в резонатор $r_{\perp 0\alpha}$ и времени влета частицы в резонатор t_α , мы можем получить

$$\begin{aligned} & e^{-i(\vec{k}_\perp \vec{r}_\perp + \phi_z(z) - \omega t)} 4\pi \vec{e} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{j}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \rho(\vec{r}, t) \right) = \\ & = -\frac{4\pi i \omega \rho \mathcal{G}_1 u(t) e}{c^2} \frac{1}{S} \int d^2 \vec{r}_\perp \frac{1}{T} \int_0^t e^{-i(\phi_1(\vec{r}, \vec{r}_\perp, t, t_0) + \vec{k}_\perp \vec{r}_\perp - \omega t)} dt_0 = \\ & = -\frac{4\pi i \omega \rho \mathcal{G}_1 u(t) e}{c^2} \left\langle \left\langle e^{-i(\phi_1(\vec{r}, \vec{r}_\perp, t, t_0) + \vec{k}_\perp \vec{r}_\perp - \omega t)} dt_0 \right\rangle \right\rangle, \end{aligned} \quad (14)$$

где ρ — плотность электронного пучка, $u(t)$ — средняя скорость электронов, зависящая от времени из-за потерь энергии на излучение, $\mathcal{G}_1 = \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{\rho^2 k_1^2 c^2}}$,

$\beta^2 = 1 - \frac{1}{\gamma^2}$, $\langle \langle \dots \rangle \rangle$ означает усреднение по поперечной координате точки влета частицы в резонатор $r_{\perp 0\alpha}$ и времени влета t_α .

Согласно [19], процедуру усреднения в (14) можно упростить, рассматривая случайные фазы (они входят в (14) в виде разностей), обусловленные случайными значениями поперечной координаты и времени влета. Поэтому двойное интегрирование по $d^2 \vec{r}_{\perp 0} dt_0$ можно заменить одиночным [19].

Система (12) в этом случае преобразуется к виду:

$$2ik_{1z}(z) \frac{\partial A_1}{\partial z} + i \frac{\partial k_{1z}(z)}{\partial z} A_1 - (k_\perp^2 + k_{1z}^2(z)) A_1 + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_0(\omega, z) A_1 + i \frac{1}{c^2} \frac{\partial \omega^2 \varepsilon_0(\omega, z)}{\partial \omega} \frac{\partial A_1}{\partial t} +$$

$$+ \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_{-\tau}(\omega, z) A_2 + i \frac{1}{c^2} \frac{\partial \omega^2 \varepsilon_{-\tau}(\omega, z)}{\partial \omega} \frac{\partial A_2}{\partial t} = i \frac{2\omega}{c^2} J_1(k_{1z}(z)),$$
(15)

$$2ik_{2z}(z) \frac{\partial A_2}{\partial z} + i \frac{\partial k_{2z}(z)}{\partial z} A_2 - (k_\perp^2 + k_{2z}^2(z)) A_2 + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_0(\omega, z) A_2 + i \frac{1}{c^2} \frac{\partial \omega^2 \varepsilon_0(\omega, z)}{\partial \omega} \frac{\partial A_2}{\partial t} +$$

$$+ \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_\tau(\omega, z) A_1 + i \frac{1}{c^2} \frac{\partial \omega^2 \varepsilon_\tau(\omega, z)}{\partial \omega} \frac{\partial A_1}{\partial t} = i \frac{2\omega}{c^2} J_2(k_{2z}(z)),$$

где токи J_1 , J_2 определяются выражениями

$$J_m = 2\pi j \mathcal{G}_m \int_0^{2\pi} \frac{2\pi - p}{8\pi^2} (e^{-i\phi_m(t, z, p)} + e^{-i\phi_m(t, z, -p)}) dp,$$

$$\mathcal{G}_m = \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{\beta^2 k_m^2 c^2}}, \quad m = 1, 2, \quad \beta^2 = 1 - \frac{1}{\gamma^2},$$
(16)

$j = en_0 v$ – плотность тока, $A_1 \equiv A_{\tau=0}$, $A_2 \equiv A_\tau$, $\vec{k}_1 = \vec{k}_{\tau=0}$, $\vec{k}_2 = \vec{k}_1 + \vec{\tau}$. Выражения для J_1 для k_1 независимых от z были получены в работе [19].

Если в процессе дифракции участвуют больше двух волн, то система уравнений (15) должна быть дополнена уравнениями для A_m , имеющими вид, подобный A_1 и A_2 .

Получим теперь уравнение для фазы. Из выражений (8, 9) следует, что

$$\frac{d^2 \phi_m}{dz^2} + \frac{1}{v} \frac{dv}{dz} \frac{d\phi_m}{dz} = \frac{dk_m}{dz} + \frac{k_m}{v^2} \frac{d^2 z}{dt^2}.$$
(17)

Введем новую функцию $C(z)$ таким образом, что

$$\frac{d\phi_m}{dz} = C_m(z) e^{-\int_0^z \frac{1}{v} \frac{dv}{dz} dz'} = \frac{v_0}{v(z)} C_m(z),$$
(18)

$$\phi_m(z) = \phi_m(0) + \int_0^z \frac{v_0}{v(z')} C_m(z') dz'.$$

Тогда

$$\frac{dC_m(z)}{dz} = \frac{v(z)}{v_0} \left(\frac{dk_m}{dz} + \frac{k_m}{v^2} \frac{d^2 z}{dt^2} \right).$$
(19)

В одномерном случае уравнение движения можно записать:

$$\frac{d^2 z_\alpha}{dt^2} = \frac{e\mathcal{G}}{m\gamma(z_\alpha, t, p)} \operatorname{Re} E(z_\alpha, t), \quad (20)$$

следовательно,

$$\begin{aligned} \frac{dC_m(z)}{dz} &= \frac{v(z)}{v_0} \frac{dk_m}{dz} + \\ &+ \frac{k_m}{v_0 v(z)} \frac{e\mathcal{G}_m}{m\gamma^3(z, t(z), p)} \operatorname{Re}\{A_m(z, t(z))e^{i\phi_m(z, t(z), p)}\}, \\ \frac{d\phi_m(t, z, p)}{dz} \Big|_{z=0} &= k_{mz} - \frac{\omega}{v}, \quad \phi_m(t, z, p) \Big|_{z=0} = p, \end{aligned} \quad (21)$$

$$A_1|_{z=L} = E_1^0, \quad A_2|_{z=L} = E_2^0, \quad A_m|_{t=0} = 0, \quad m = 1, 2, \quad t > 0, \quad z \in [0, L], \quad p \in [-2\pi, 2\pi],$$

L – длина фотонного кристалла.

Эти уравнения должны быть дополнены уравнениями для $\gamma(z, p)$. Хорошо известно, что

$$mc^2 \frac{d\gamma}{dt} = e\vec{v}\vec{E}. \quad (22)$$

Следовательно,

$$\frac{d\gamma(z, t(z), p)}{dz} = \sum_l \frac{e\mathcal{G}_l}{mc^2} \operatorname{Re}\left\{\sum_l A_l(z, t(z))e^{i\phi_l(z, t(z), p)}\right\}.$$

Уравнения (15, 18, 21, 22) позволяет описать процесс генерации в ЛСЭ с переменными параметрами фотонного кристалла. Анализ системы (21) может быть упрощен заменой $\gamma(z, t(z), p)$ его значением, усредненным по начальной фазе

$$\langle \gamma(z, t(z)) \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \gamma(z, t(z), p) dp.$$

Следует заметить, что закон изменения параметров может быть как плавный, так и ступенчатый. Анализ такой системы показывает, что ее эффективность существенно превосходит эффективность системы с постоянными параметрами. Применение фотонных кристаллов позволяет создать разные конструкции ОЛСЭ (рис. 2).

Следует заметить, что в ЛСЭ (ЛБВ, ЛОВ) с резонатором (дифракционной решеткой, фотонным кристаллом), параметры которого меняются по длине (например, вдоль оси z), возникает электромагнитная волна с зависящим от z пространственным периодом (см. (6)). Это означает, что в резонаторе образуется динамический ондулятор с зависящим от z периодом. Хорошо известно, что такой ондулятор может существенно увеличить эффективность ондуляторного ЛСЭ. Предлагаемый динамический ондулятор с изменяющимся по длине периодом может использоваться для создания двухкаскадного ЛСЭ, который заметно эффективнее обычных систем. Более того, период динамического ондулятора

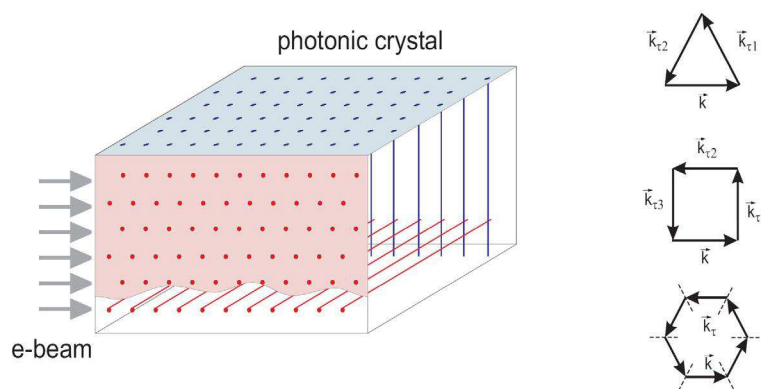


Рис. 2. Пример фотонного кристалла с расположением нитей, обеспечивающим многоволновую распределенную обратную связь. Нити расположены так, чтобы связать несколько (три, четыре, шесть,) волн, возникающих в результате дифракции, и в вертикальной и в горизонтальной плоскостях. Электронный пучок занимает весь объем кристалла

может быть заметно меньше, чем это возможно сделать в обычных ондуляторах. К тому же, благодаря зависимости фазовой скорости электро-магнитной волны от времени, в предлагаемой системе возможно сжатие импульса излучения.

3. Заключение

Рассмотрены электродинамические свойства и генерация излучения в объемном лазере на свободных электронах с сеточным резонатором (сеточным фотонным кристаллом) с изменяющимися в пространстве параметрами. Получены уравнения, описывающие генерацию излучения в объемном лазере на свободных электронах с сеточным резонатором. Показано, что использование фотонного кристалла с переменным периодом увеличивает интенсивность излучения и позволяет создать динамический вигглер с переменным периодом. Это позволяет создать двухкаскадный ЛСЭ с переменными параметрами, эффективность которого может быть значительно выше, чем эффективность обычного ЛСЭ.

Литература

1. Болотовский Б. М., Воскресенский Г. В. // УФН. 1966. Т. 88. С. 209.
2. Kompfner R. // Wireless World. 1946. Vol. 52. P. 369.
3. Pierce R. // Proc. IRE. 1947. Vol. 35. P. 111.
4. Smith S. J., Purcell E. M. // Phys. Rev. 1953. Vol. 92. P. 1069.
5. Salisbury W. W. // US Patent 1953. 2,634,372; J. Opt. Soc. Am. 1970. Vol. 60. P. 1279.
6. Doucas G., Mulvey J. H. et al. // Phys. Rev. Lett. 1992. Vol. 69. P. 1761; Walsh J. E. // US Patent 1996. 5,790,585.
7. Baryshevsky V. G. // NIM A. 2000. Vol. 445. P. 281; LANL e-print archive physics/9806039.
8. Baryshevsky V. G., Batrakov K. G. et al. // NIM A. 2002. Vol. 483. P. 21.
9. Baryshevsky V. G., Batrakov K. G. et al. // NIM A. 2003. Vol. 507. P. 137.

10. *Granatstein V. L., Parker R. K., Armstrong C. M.* // Proc. IEEE. 1999. Vol. 87, №5.
11. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G.* et al. // NIM Vol. 393A. 1997. 71.
12. *Baryshevsky V. G., Gurinovich A. A.* // LANL e-print archive: physics/0409107
13. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G.* et al. // LANL e-print archive: physics/0409125.
14. *Baryshevsky V. G., Gurinovich A. A.* // NIM B. 2006. Vol. 252. P. 92.
15. *Baryshevsky V. G., Belous N. A.* et al. // LANL e-print arXiv: physics/0605122.
16. *James R. W.* The Optical Principles of Diffraction of X-Rays. 1982.
17. *Chang S.-L.* Multiple diffraction of x-rays in crystals. 1984.
18. *Takagi S.* // Acta Crystall. 1962. Vol. 15. P. 1311.
19. *Batrakov K. G., Sytova S. N.* // Comp. Math. Math. Phys. 2005. Vol. 45, № 4. P. 666.

ELECTRODYNAMICAL PROPERTIES OF A VOLUME FREE ELECTRON LASER WITH A "GRID" RESONATOR WITH VARIABLE PARAMETERS

V. G. Baryshevsky, A. A. Gurinovich

The electrodynamic properties and lasing in Volume Free Electron Laser with a "grid" resonator ("grid" photonic crystal) with changing in space parameters are considered. The equations describing lasing of VFEL with such a resonator are obtained. It is shown that use of diffraction gratings (photonic crystal) with variable period increases radiation intensity and provide to create the dynamical wiggler with variable period. This makes possible to develop a double-cascaded FEL with variable parameters, which efficiency can be significantly higher then that of conventional system.

ПЕРВЫЕ ШАГИ В ИССЛЕДОВАНИИ ХАОТИЧЕСКОЙ ДИНАМИКИ ОБЪЕМНЫХ ЛАЗЕРОВ НА СВОБОДНЫХ ЭЛЕКТРОНАХ

С. Н. Сытова

Использование открытой учеными НИИ ЯП закономерности возрастания инкремента неустойчивости пучка частиц, пролетающего через пространственно-периодическую мишень, от числа волн, возбуждаемых в решетке, в условиях дифракции Брэгга легло в основу создания принципиально новых генераторов электромагнитного излучения – объемных лазеров на свободных электронах (ОЛСЭ). Принципы и теоретические основы функционирования ОЛСЭ были заложены в работах [1], [2] как основа создания рентгеновского лазера и продолжены в [3–8]. Первое экспериментальное наблюдение генерации ОЛСЭ в миллиметровом диапазоне было проведено в НИИ ЯП БГУ в 2001 г. [9–10]. Подтверждено, что с использованием объемной распределенной обратной связи (ОРОС) могут работать не только ОЛСЭ, но и лампы обратной волны (ЛОВ), лампы бегущей волны (ЛБВ) и др. типы электромагнитных усилителей и генераторов. В 2004 г. в НИИ ЯП создана ЛОВ и ОЛСЭ с сеточным резонатором, работающие в сантиметровом диапазоне длин волн [11]. Такого рода генераторы в различных диапазонах необходимы для создания нового поколения ускорителей элементарных частиц, передачи электромагнитной энергии на большие расстояния, нагрева термоядерной плазмы, высокостабильных передатчиков для систем связи в СВЧ-диапазоне и т. д.

Отличительной особенностью ОЛСЭ является использование в качестве объемных резонаторов одно-, двух- и трехмерных дифракционных решеток, обеспечивающих объемную распределенную обратную связь и, как следствие, возможность плавной перестройки частоты в широком диапазоне частот, получения высокой мощности излучения и генерации излучения одновременно на нескольких частотах. Двух- или трехмерные дифракционные решетки позволяют распределить взаимодействие по большому объему и снизить ограничения на мощность в резонаторе, что дает возможность получать на многие порядки большие мощности излучения благодаря отсутствию электрических пробоев по сравнению с другими системами, например, лазерами на свободных электронах (ЛСЭ).

Линейный режим работы ОЛСЭ изучен достаточно хорошо [3–7], но он быстро сменяется нелинейной стадией, на которой происходит основная генерация излучения. Математические модели, описывающие эту стадию работы, представляют собой системы многомерных нелинейных интегро-дифференциальных уравнений. Очевидно, что нелинейный режим работы может быть исследован только с использованием численных методов, поскольку аналитически получить решения таких систем уравнений не представляется возможным.

Проведенное математическое моделирование нелинейной стадии работ ОЛСЭ [12–19] подтвердило все основные физические закономерности и прин-

ципы работы ОЛСЭ, в частности, радикальное изменение пороговых условий генерации ОЛСЭ, предсказанные в работах [1, 2]. В ходе численных экспериментов были исследованы:

- пороги генерации по плотности тока пучка, длине мишени, поглощению мишени, факторам асимметрии дифракции для двух- и трехволновых ОЛСЭ;
- ширина режима усиления по плотности тока пучка для двух- и трехволновых ОЛСЭ включая геометрию Лауэ;
- режим SASE (self-amplified stimulated emission) в геометрии Лауэ и Лауэ – Лауэ;
- электродинамическая картина в геометрии Брэгга с внешними зеркалами для различных коэффициентов отражения;
- режим генерации в геометрии Лауэ с внешними зеркалами;
- различные режимы в области вырождения корней для трехволновых геометрий Брэгг – Брэгг и Брэгг – Лауэ в зависимости от параметра отстройки от точного выполнения черенковского условия, системных параметров и факторов асимметрии дифракции.

Показано, что существует оптимальный набор параметров для эффективной генерации излучения в каждом из вышеперечисленных случаев.

При моделировании ОЛСЭ мы столкнулись с хаотическим характером нелинейных режимов работы ОЛСЭ [13–19]. Их исследование очень важно, поскольку изменение управляющих параметров ведет через бифуркации к изменению режимов работы ОЛСЭ. В работах [14–16] продемонстрирован переход с ростом тока от стадии стационарного нелинейного насыщения к колебательной динамике с последовательным удвоением периода и далее к хаотическому поведению. В работах [17–19] приведены карты динамических режимов осцилляций ОЛСЭ на параметрических плоскостях: плотность тока – фактор асимметрии, плотность тока – отклонение от условия синхронизма, плотность тока – длина резонатора.

Данная работа посвящена дальнейшему исследованию хаотической динамики ОЛСЭ. Проведено сравнение работы ОЛСЭ в режиме усиления и режиме генерации при прочих равных условиях, а также чувствительность решений к малым возмущениям начальных данных, что является хорошей верификацией используемых численных алгоритмов и программных средств. Получены карты динамических режимов перехода к хаосу в ОЛСЭ в зависимости от изменения плотности тока и диэлектрической проницаемости резонатора, а также одного из системных параметров.

1. Физическая и математическая модели ОЛСЭ

Резонатор установки ОЛСЭ-10 [9] был сформирован двумя дифракционными решетками с различными периодами и двумя гладкими боковыми стенками. Взаимодействие первой дифракционной решетки (возбуждающей) с электронным пучком генерирует излучение Смит – Парсела. Вторая (резонансная) решетка обеспечивает распределенную обратную связь между полем и электронным пучком посредством динамической дифракции Брэгга. Конструкция

резонатора позволяет изменять его параметры в течение эксперимента (вращать и изменять расстояние между дифракционными решетками и электронным пучком). Это обеспечивает возможность настройки условий двухволновой дифракции.

Электродинамические свойства объемного резонатора [11], который сформирован периодической структурой, построенной из металлических нитей в прямоугольном волноводе, зависят от условий дифракции. В этом случае возникает эффект аномальной передачи электромагнитных волн подобно эффекту Бормана, хорошо известному из динамической теории рентгеновской дифракции [2]. Вторая (резонансная) решетка обеспечивает распределенную обратную связь между излучением и электронным пучком посредством динамической брэгговской дифракции.

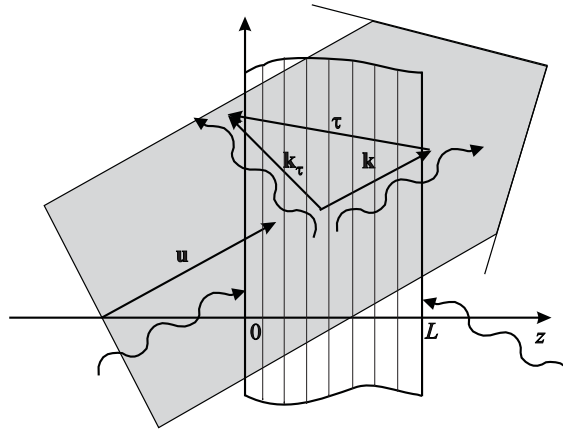


Рис. 1. Объемная схема ОЛСЭ в геометрии Брэгга

Обе эти схемы ОЛСЭ могут быть сведены к следующей простой модели аккуратным определением диэлектрической проницаемости среды. На рис. 1 изображена объемная схема двухволнового ОЛСЭ в геометрии Брэгга. Электронный пучок со скоростью u «падает» под некоторым углом на полубесконечную трехмерную пространственно-периодическую мишень толщиной L . Электроны пучка в мишени начинают испускать спонтанное излучение, которое при одновременном выполнении условий дифракции [20]

$$2\mathbf{k}\boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau}^2 \approx 0$$

и условия синхронизма – условия Вавилова – Черенкова:

$$\omega - \mathbf{k}\mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

преобразуется в коллективное квазичеренковское излучение с частотой ω и волновыми векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}_t = \mathbf{k} + \boldsymbol{\tau}$, где $\boldsymbol{\tau}$ – вектор обратной решетки мишени. Таким образом, реализуется т. н. режим генератора (осциллятора) в ОЛСЭ. При наличии падающих на мишень внешних электромагнитных волн с волновыми векторами $\mathbf{k}$ и (или) $\mathbf{k}_t$ может реализоваться режим усиления.

В геометрии Брэгга могут быть реализованы несколько различных режимов работы: 1) величина тока меньше критической и коллективное излучение отсутствует; 2) при достижении критической величины тока становится возможен

режим усиления электронным пучком внешних падающих электромагнитных волн; 3) при дальнейшем увеличении тока и превышении им порогового значения j_{th} реализуется режим генерации.

Уравнения, описывающие нелинейную стадию работы ОЛСЭ, получаются из уравнений Максвелла в приближении медленно меняющихся амплитуд:

$$\Delta \mathbf{E} - \nabla(\nabla \mathbf{E}) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = \frac{\partial \mathbf{j}_b}{\partial t},$$

где $\mathbf{E}$ – напряженность электрического поля, $\mathbf{j}_b$ – плотность тока электронного пучка.

В случае двухволновой дифракции решение ищется в виде

$$\mathbf{E} = \mathbf{e} (E e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} + E_\tau e^{i(\mathbf{k}_\tau \mathbf{r} - \omega t)}),$$

$$\mathbf{j}_b = \mathbf{e} j e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)},$$

где i – мнимая единица, $\mathbf{e}$ – вектор поляризации [20].

Пучок моделируется усреднением по фазам влета электронов в область взаимодействия [21]. Этот метод хорошо известен и широко применяется для расчета ЛБВ, ЛОВ, ЛСЭ и других электронных приборов. Как было показано в наших исследованиях, этот метод также хорошо работает при моделировании динамики пучка в ОЛСЭ [14]. Более того, поскольку уравнение для пучка имеет более сложный вид, чем обычно используемый в литературе [25], [28], это позволило учесть тонкие эффекты, связанные со взаимодействием пучка и электромагнитного поля в условиях ОРОС. Итак, система, моделирующая двухволновой ОЛСЭ, выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \gamma c \frac{\partial E}{\partial z} + 0.5i\omega l E - 0.5i\omega \chi_\tau E_\tau = F(j), \quad (2)$$

$$\frac{\partial E_\tau}{\partial t} + \gamma_1 c \frac{\partial E_\tau}{\partial z} - 0.5i\omega \chi_{-\tau} E + 0.5i\omega l_1 E_\tau = 0,$$

$$F(j) = 2\pi j \Phi \int_0^{2\pi} \frac{2\pi - p}{8\pi^2} (\exp(-i\Theta(t, z, p)) + \exp(-i\Theta(t, z, -p))) dp, \quad (3)$$

$$\frac{d^2 \Theta(t, z, p)}{dz^2} = \frac{e\Phi}{m\gamma^3 \omega^2} \left(k - \frac{d\Theta(t, z, p)}{dz} \right)^3 \text{Re}(E(t - z/u, z) \exp(i\Theta(t, z, p))), \quad (4)$$

$$\Theta(t, 0, p) = p, \quad \frac{d\Theta(t, 0, p)}{dz} = k_z - \omega/u, \quad (5)$$

$$E|_{z=0} = E_0, \quad E_\tau|_{z=L} = E_{\tau 0}.$$

где $\gamma_{0,1}$ – направляющие косинусы, $\Phi = \sqrt{l_0 + \chi_0 - 1/(u/c\gamma)^2}$, $\beta_1 = \gamma_0 / \gamma_1$ – фактор асимметрии, $l = l_0 + \delta$, δ – отклонение от точного выполнения условия Черенкова, γ – Лоренц-фактор пучка, $\epsilon_0 = 1 + \chi_0$ – диэлектрическая проницаемость

резонатора, $\chi_0, \chi_{\pm\tau}$ – коэффициенты разложения диэлектрической восприимчивости резонатора в ряд по векторам обратной решетки. Функция $\Theta(t, z, p)$ описывает фазу электронов относительно электромагнитной волны.

Системные параметры l_0 и l_1 имеют вид

$$l_0 = \frac{\mathbf{k}^2 c^2 - \omega^2 \varepsilon_0}{\omega^2}, \quad l_1 = \frac{\mathbf{k}_\tau^2 c^2 - \omega^2 \varepsilon_0}{\omega^2}.$$

Дисперсионное уравнение, соответствующее двухволновой системе (2), записывается следующим образом:

$$\begin{vmatrix} l_0 & -\chi_\tau \\ -\chi_{-\tau} & l_1 \end{vmatrix} = 0 \quad \text{или} \quad l_0 l_1 - \chi_\tau \chi_{-\tau} = 0.$$

При задании системного параметра l_0 параметр l_1 определяется из данного дисперсионного уравнения.

Необходимые численные методы для решения системы (2) – (5) были разработаны в [12–14]. Создан комплекс программ VOLC для моделирования ОЛСЭ [16] – «инструмент» для моделирования работы экспериментальной физической установки ОЛСЭ, создаваемой в НИИ ЯП.

2. Хаос в ОЛСЭ

Хаотическая динамика – естественная тенденция широкого класса систем к переходу в состояния, в которых обнаруживается как детерминированное поведение, так и непредсказуемость. Хорошо известны примеры хаотической динамики, например, турбулентность в жидкости, газе и плазме, хаос в биологических и химических системах и т. д. [22]. Известно, что в одно- и двумерных системах существуют только устойчивые состояния равновесия и периодические движения. Только в гладкой дифференцируемой динамической системе с числом степеней свободы большим 2 возможна хаотизация движений. Система, описывающая ОЛСЭ и рассматриваемая в настоящей работе, именно такова.

Бифуркация – качественное изменение поведения динамической системы, ее перестройка, происходящая при переходе управляющего параметра μ через некоторое критическое бифуркационное значение μ_0 – точку бифуркации. В этой точке у системы появляется «выбор» из нескольких возможных моделей поведения, в котором присутствует элемент случайности. Знание основных точек бифуркаций позволяет существенно облегчить исследование реальных систем, в частности предсказать характер новых движений, возникающих в момент перехода системы в качественно другое состояние, оценить их устойчивость и область существования.

Изучение хаотического поведения ЛСЭ занимает немало места в современных исследованиях [23–27], в частности, известны параметризация нелинейных и хаотических колебаний ЛСЭ [23], [27]. В работе [27] было показано, что для ЛСЭ существуют следующие возможные сценарии перехода к хаосу: удвоение периода, квазипериодичность и перемежаемость. Квазипериодичность связана с бифуркациями Хопфа, которые вводят новую частоту в систему. Перемежаемость связана с бифуркациями седловых точек, т. е. столкновением устойчивой

и неустойчивой точек, которые затем исчезают. Здесь после хаоса может появиться вновь регулярное движение.

Аналитическое исследование хаоса в системе (2) – (5) представляется невозможным из-за ее сильной нелинейности. Кроме того, большое количество внешних управляющих параметров, таких как, например, ток пучка, длина системы, направляющие косинусы ОРОС, поглощение мишени, факторы асимметрии дифракции, параметры отстройки, системные параметры l_i и т. д. многократно увеличивает объем работы. Прохождение электронного пучка через пространственно-периодическую мишень в ОЛСЭ ведет к возникновению разнообразных особенностей динамики генерации, которые происходят из-за нелокальной природы взаимодействия между электронным пучком и электромагнитным полем в условиях ОРОС. Так как ОЛСЭ – нелинейная динамическая система, она характеризуется различными режимами работы, а именно – устойчивое состояние, периодичность, квазипериодичность и хаос.

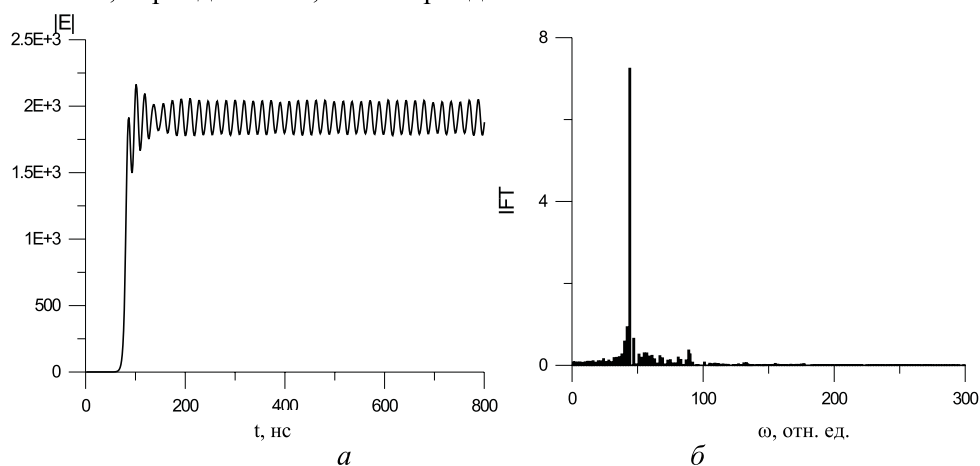


Рис. 2. Периодический режим (а) и его энергетический спектр (б)

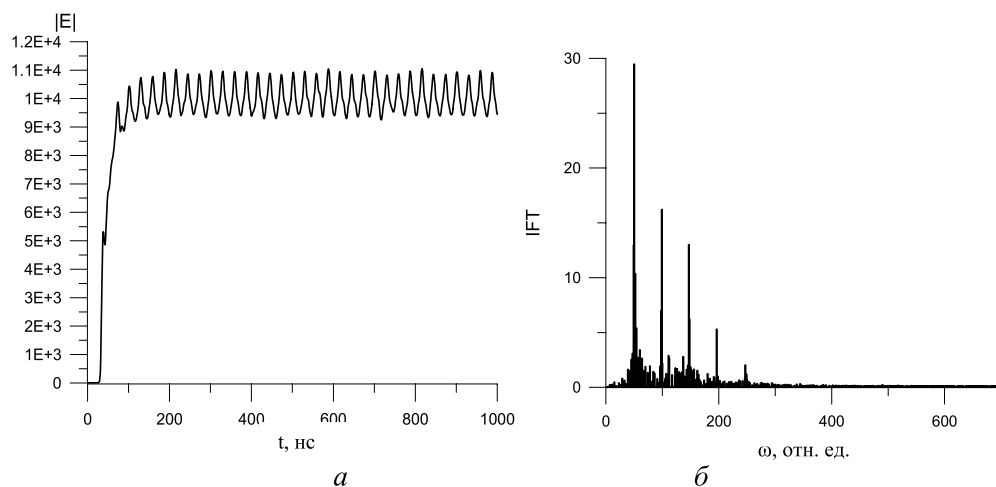


Рис. 3. Периодический режим с одной частотой и ее линейной комбинацией (а), его энергетический спектр (б)

3. Исследование хаоса в режиме генерации

Сначала ограничимся исследованием хаотического поведения в двумерной системе для геометрии Брэгга в режиме генерации. Характерные периодические режимы изображены на рис. 2–8 для следующего набора исходных параметров: $\lambda = 3$ см, $L = 20$ см, $j = 400 \div 3000$ А/см², $\beta = (-20) \div (-1)$, $\delta kL = -20 \div 20$, $l_0 = 1.0$, $\chi_0 = -0.1$, $\chi_\tau = 0.1$.

На рисунках 2 и 3 типичные периодические режимы с одной частотой и ее линейной комбинацией показаны вместе с их энергетическими спектрами (IFT). В некоторых областях параметрической карты перехода к хаосу период удваивается и учетверяется.

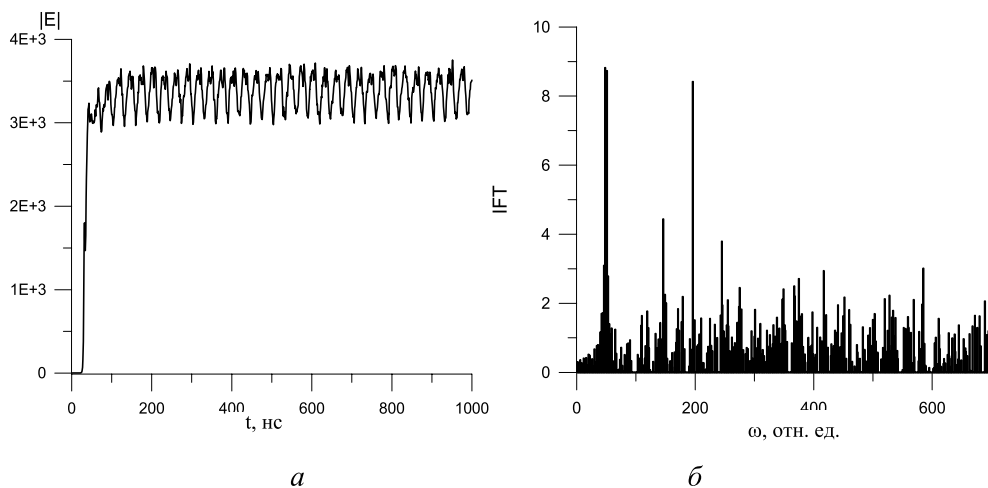


Рис. 4. «Слабый» хаос (а) и его энергетический спектр (б)

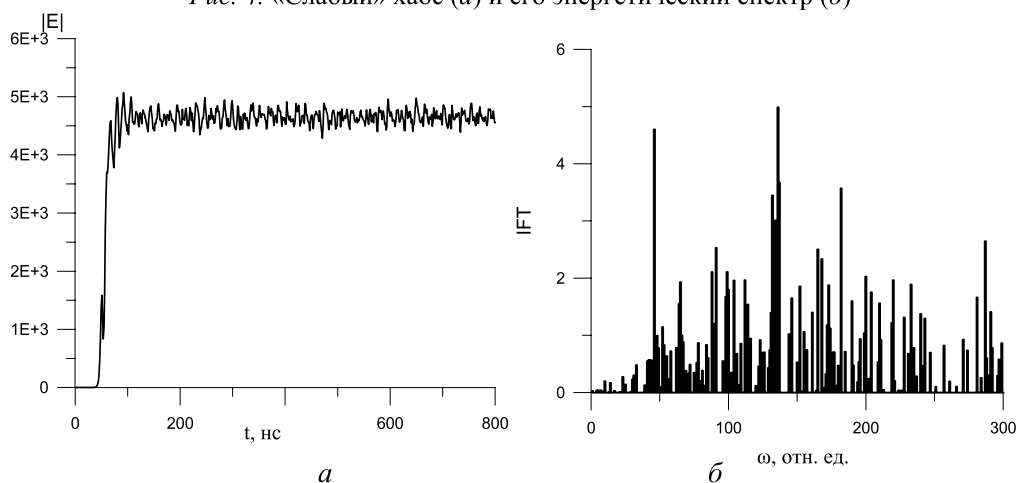


Рис. 5. Хаотические автоколебания (а) и соответствующий энергетический спектр (б)

Другой типичный режим – квазипериодические колебания с несоизмеримыми частотами, возникающими при бифуркациях Хопфа будет приведен ниже на рис. 8 и 10. В некоторых областях этот режим преобразуется в так называемый «слабый» хаос [26], где зависимость амплитуды от времени выглядит как приближительное повторение однопиков близких размеров за приблизительно равные промежутки времени. Этот процесс изображен на рис. 4. «Слабый» хаос и квазипериодичность ведут к стохастическим автоколебаниям или «развитому» хаосу, представленному на рис. 5.

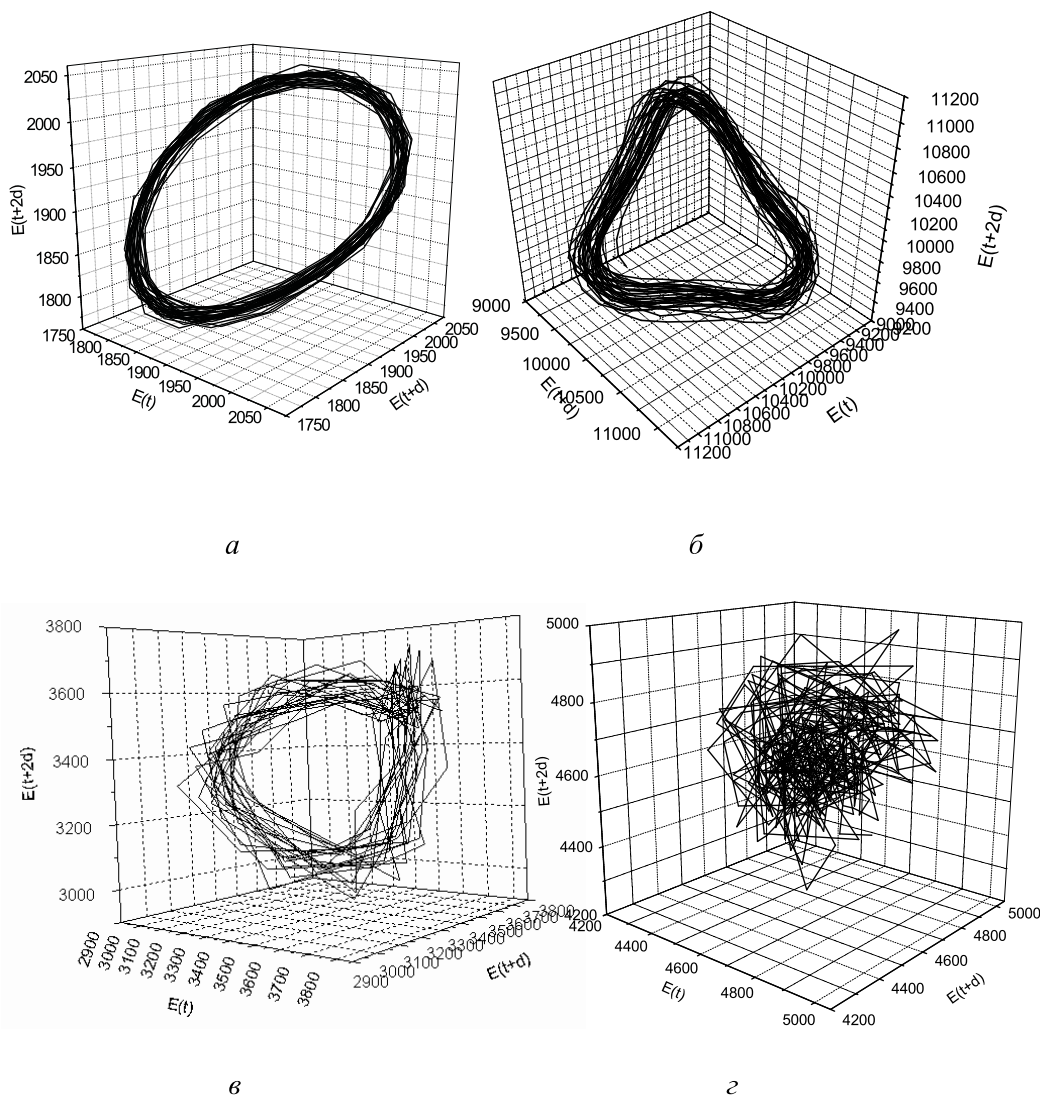


Рис. 6. Аттракторы для периодического (а), периодического с линейной комбинацией частот (б), «слабого» хаотического режима (в) и хаотических автоколебаний (г)

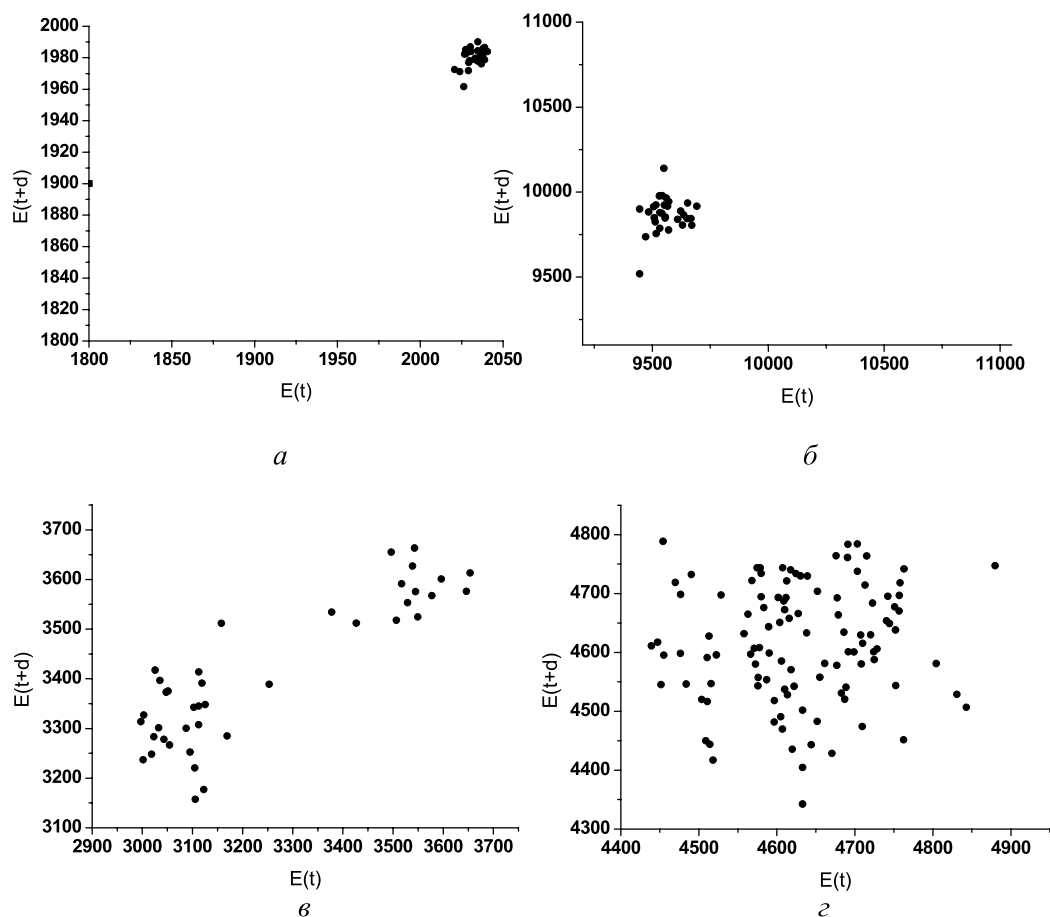


Рис. 7. Сечения Пуанкаре для периодического (*a*), периодического с линейной комбинацией частот (*б*), «слабого» хаотического режима (*в*) и хаотических автоколебаний (*г*), соответствующие рис. 6

Аттракторы – множество точек в фазовом пространстве динамической системы, к которым стремятся траектории системы – являются очень хорошей иллюстрацией периодических и хаотических режимов работы динамических систем. Соответствующие рис. 2–5 аттракторы изображены на рис. 6. Период d для каждого рисунка свой и не превышает 20 нс.

Аттракторы периодических решений расположены приблизительно в одной плоскости в фазовом пространстве, в то время как аттрактор слабого хаоса изогнут как восьмерка. Хаотические автоколебания представлены спутанным клубком линий, в котором не удастся выявить какую-либо упорядоченную структуру. Это хорошо можно продемонстрировать на так называемых сечениях или отображениях Пуанкаре [22], которые изображены на рис. 7. Здесь во всех случаях для удобства площадка S секущей поверхности выбиралась параллельной плоскости (X, Y) (или точнее $(E(t), (E(t+d)))$, поскольку интересующие нас фазовые траектории пересекают ее многократно.

Алгоритм построения сечения Пуанкаре был основан на последовательном просмотре наборов данных, используемых для построения аттракторов, и восстановлении координат точек (x, y, z_0) при пересечении фазовой траектории площадки S с координатой $z = z_0$.

Как и следовало ожидать, сечения Пуанкаре для периодических и хаотических режимов ОЛСЭ имеют соответствующий вид, а именно: для одноперiodических режимов сечения представляют собой односвязные компактные множества, а хаотические – неравномерно распределены в большом объеме. На рис. 11, *в* квазипериодический двухчастотный режим представлен двумя множествами, описывающими обе частоты.

Теперь рассмотрим переход к хаосу через перемежаемость. На рис. 8 показана следующая цепочка бифуркаций при изменении параметра плотности тока $j = 1750 \div 2350$ А/см²:

квазипериодичность ↔ хаос ↔ перемежаемость ↔ периодичность.

Для токов j , меньших 1750 А/см² (как это будет продемонстрировано ниже), наблюдаются области с периодичностью, квазипериодичностью и слабым хаосом. Аттракторы, соответствующие графику 5 на рис. 8, изображены на рис. 9. Энергетический спектр, представляющий квазипериодические колебания с двумя несоизмеримыми частотами, соответствующий рис. 8, *а*, кривая 1, изображен на рис. 10. Здесь же представлен аттрактор, который имеет форму двух изогнутых в пространстве четырехугольников, смещенных друг относительно друга, каждый из которых описывает свою частоту.

При численном решении систем уравнений всегда возникает вопрос, является ли наблюдаемый «хаос» хаосом на самом деле либо результатом некорректного учета ошибок округления или конечного порядка аппроксимации дифференциальных уравнений разностными. Одним из возможных ответов на данный вопрос является исследование чувствительности решений к малым возмущениям начальных данных. Если неустойчивость решений будет наблюдаться именно для хаотических режимов, а для периодических и квазипериодических решение будет устойчивым, то это явится хорошей верификацией используемых численных алгоритмов и программных средств. Аналитически проверить устойчивость и сходимость предложенных разностных методов не представляется возможным в силу сильной нелинейности полученной разностной и исходной дифференциальной системы.

В работе [26] показано, что неустойчивость фазовых траекторий динамического хаоса, проявляющаяся в высокой чувствительности движения к малым возмущениям начальных условий, присуща динамике ЛОВ. Исследуем свойства чувствительности полученных решений к возмущениям стартовой плотности тока пучка j для различных режимов работы ОЛСЭ-генератора. На рис. 11, *а* для слабого хаоса наблюдается отстройка от решения при изменении значения плотности тока на $\delta j = 10^{-8}$ А/см², хотя общая форма решения сохраняется, в то время как для периодического режима заметные отличия в решении наблюдаются при $\delta j = 10$ А/см², которое уже, очевидно, не является малым возмущением. Это же справедливо и для квазипериодического режима (рис. 8, кривая 2), изображенного на рис. 12 в логарифмической шкале.

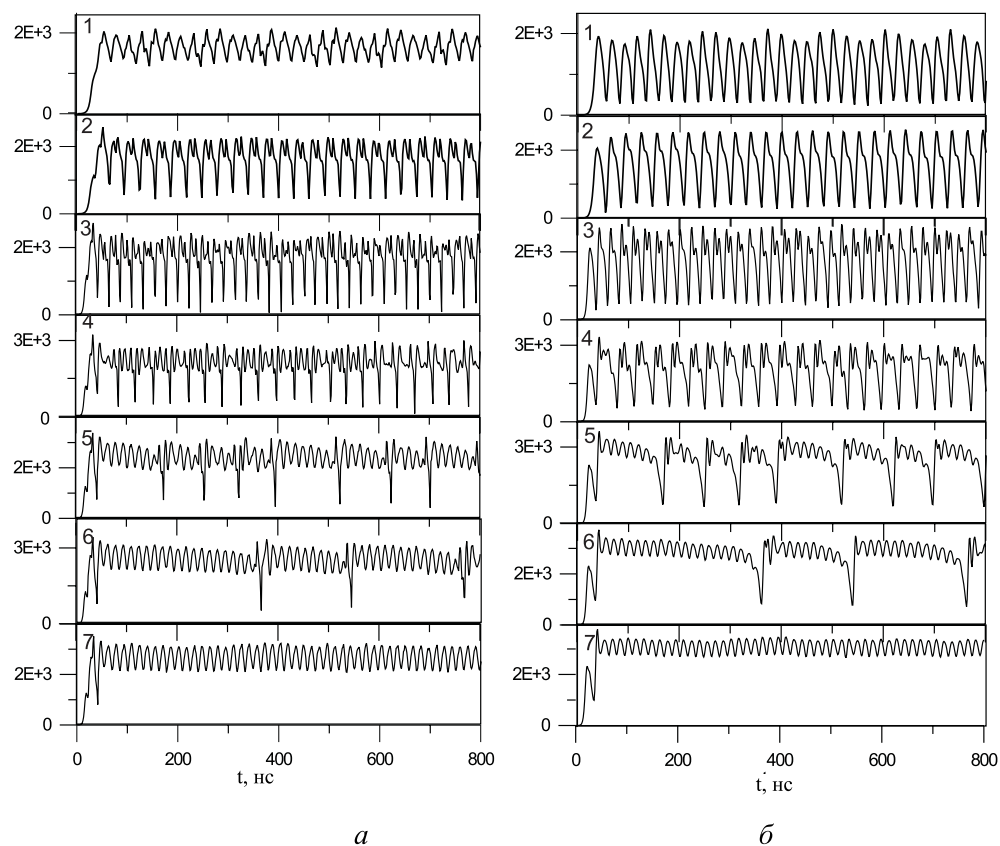


Рис. 8. Переход к хаосу через квазипериодичность и перемежаемость для проходящей (*a*) и дифрагированной (*б*) волн при плотности тока j , равной 1) 1750 A/cm^2 , 2) 1950 A/cm^2 , 3) 2150 A/cm^2 , 4) 2220 A/cm^2 , 5) 2300 A/cm^2 , 6) 2340 A/cm^2 , 7) 2350 A/cm^2

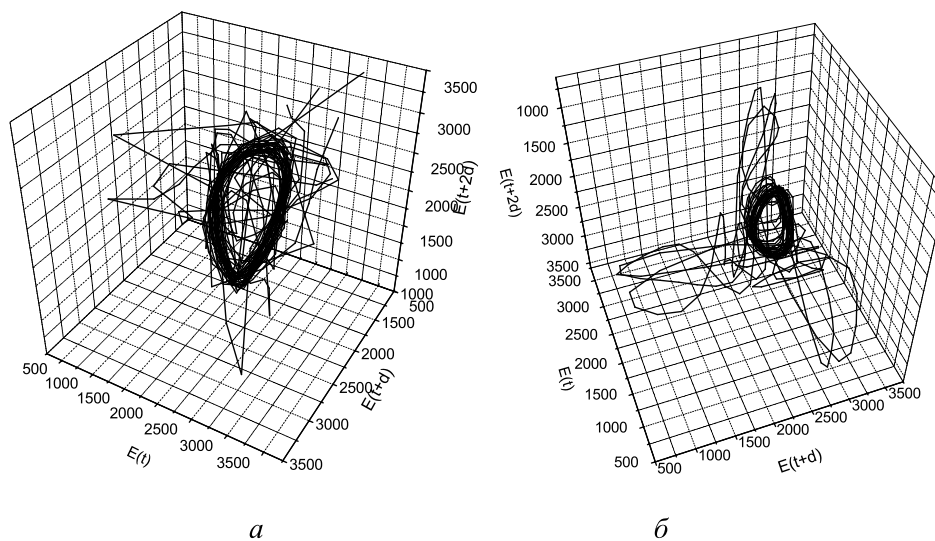


Рис. 9. Аттракторы для проходящей (*a*) и дифрагированной (*б*) волн, $j = 2340 \text{ A/cm}^2$

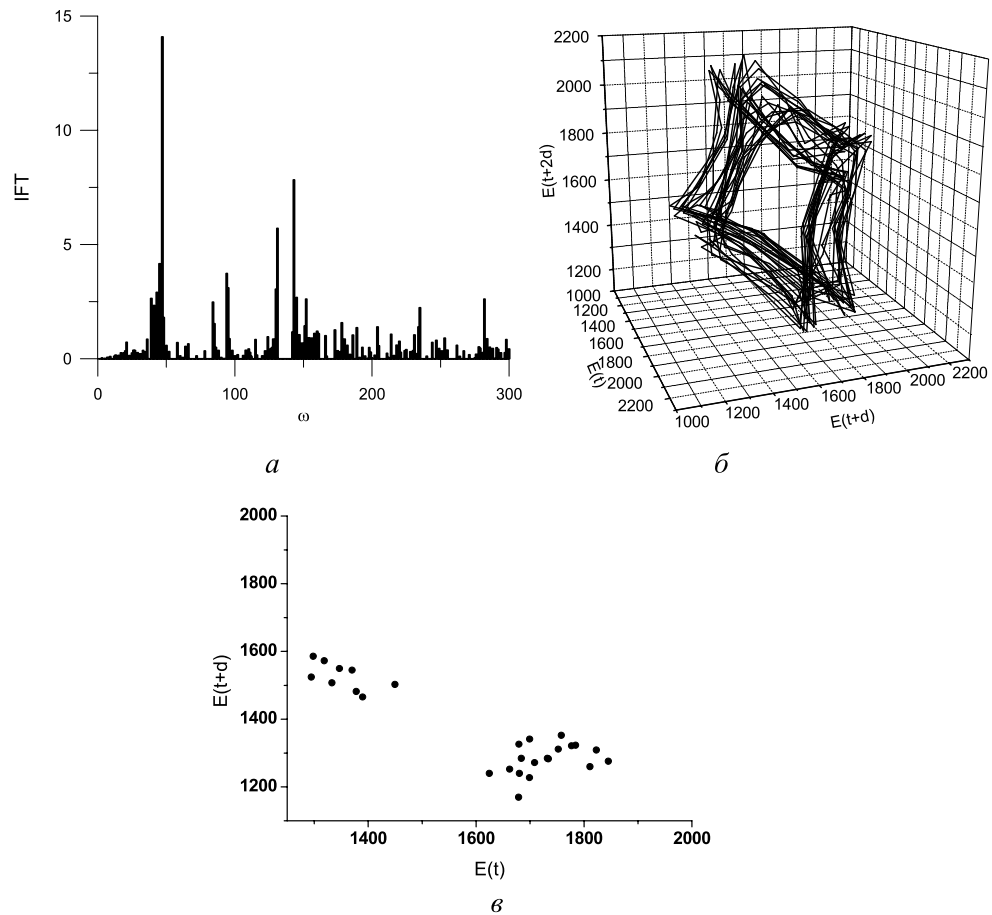


Рис. 10. Энергетический спектр (а), аттрактор (б) и сечение Пуанкаре (в) для квазипериодического режима при $j = 1750 \text{ A/см}^2$

Еще одним важным параметром, характеризующим сложную внутреннюю динамику системы, являются старшие ляпуновские характеристические показатели [22]. Пусть для двух близких начальных условий

$$f(t_1) \approx f(t_2)$$

задано малое возмущение

$$\Delta^0 = f(t_1) - f(t_2).$$

Если обозначить

$$\Delta_t \approx f(t_1 + t) - f(t_2 + t),$$

то можно записать, что

$$\Delta_t \approx \Delta^0 \exp(\lambda t).$$

Здесь показатель Ляпунова λ характеризует среднюю скорость экспоненциального разбегания соседних точек, что ведет к хаосу. Кроме этого, он определяет среднюю потерю информации о состоянии динамической системы с течением

времени. В N -мерной динамической системе существует ровно N ляпуновских показателей. Старший показатель предоставляет наибольшую информацию о системе, поскольку если он положителен, то система является хаотической. В частности, для размерности $N = 3$ набор показателей Ляпунова соответствует следующим вариантам поведения системы: $\langle -, -, - \rangle$ – притягивающая неподвижная точка, $\langle 0, -, - \rangle$ – предельный цикл, $\langle 0, 0, - \rangle$ – двумерный тор, $\langle +, 0, - \rangle$ – странный аттрактор (слабый хаос). В случае большей размерности может существовать вариант $\langle +, +, 0, \dots \rangle$, соответствующий гиперхаосу, когда положительных показателей больше одного.

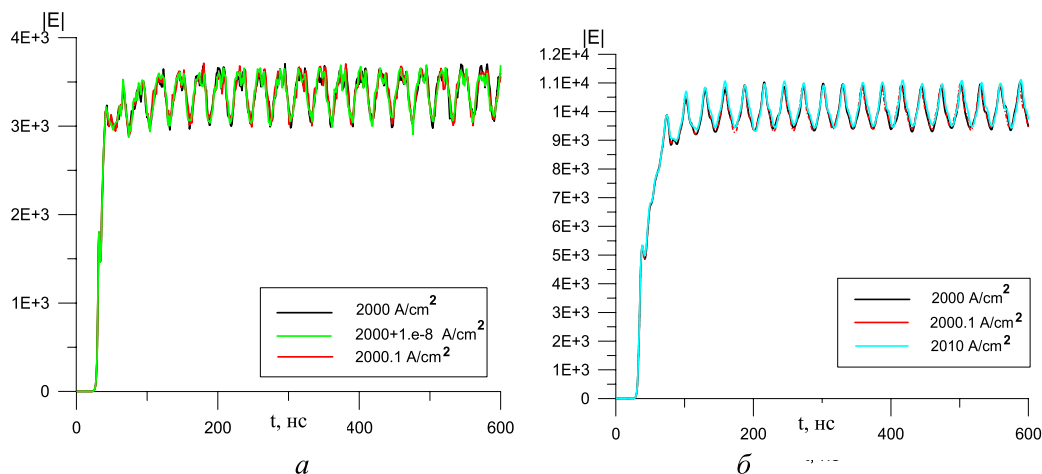


Рис. 11. Чувствительность (а) слабого хаотического решения (рис. 4) и (б) периодического решения (рис. 3) генератора к возмущению плотности тока пучка

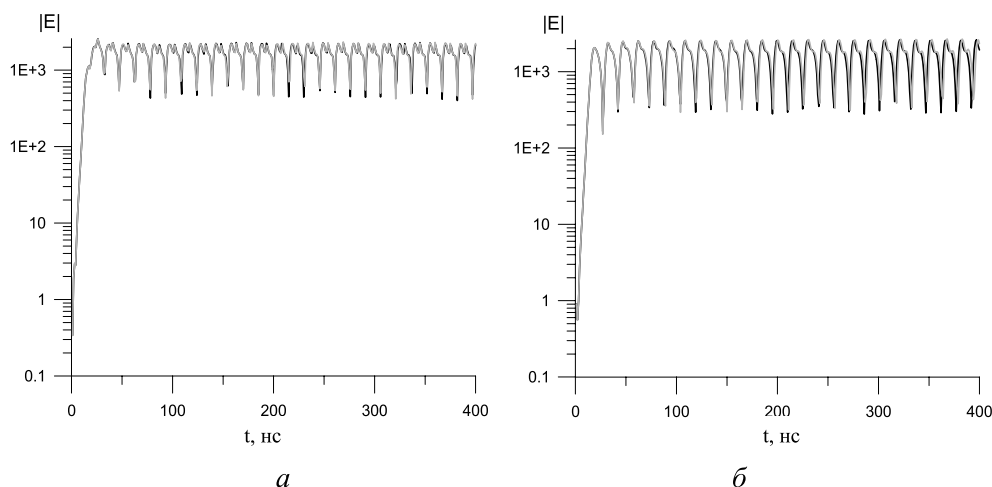


Рис. 12. Чувствительность квазипериодического решения (рис. 8, графики 2) для проходящей (а) и дифрагированной (б) волн к возмущению плотности тока пучка, черная линия $-j = 1950 \text{ A/cm}^2$, серая линия $-j = 1960 \text{ A/cm}^2$

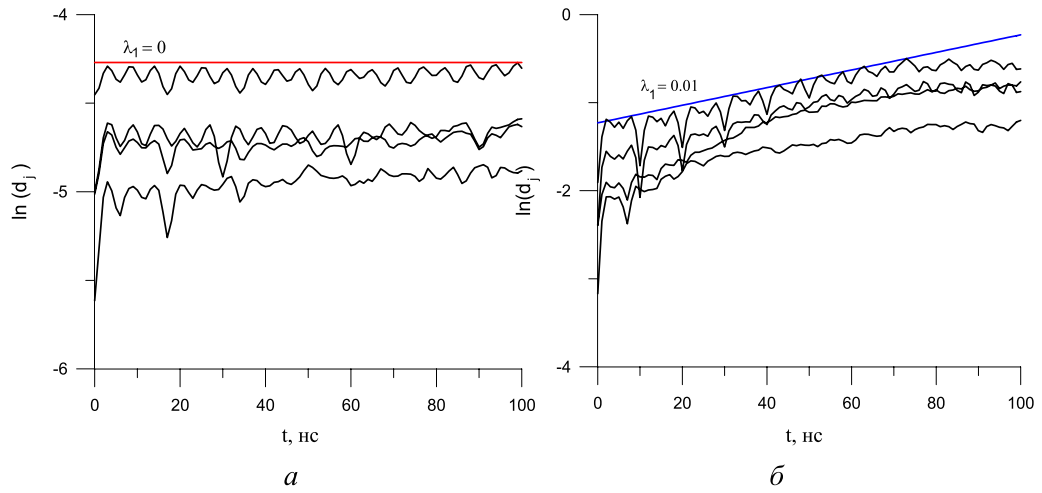


Рис. 13. Старшие показатели Ляпунова для (а) периодического режима (рис. 2) и (б) хаотических автоколебаний (рис. 8, а, кривая 4, $j = 2340 \text{ A/см}^2$)

Преимуществом алгоритма Розенштейна [28], которым мы пользовались, и кода L1D2 [29] является использование только одного набора данных относительно небольшой размерности (вплоть до нескольких сот временных точек). В соответствии с этим алгоритмом рассматривается множество значений функции в зависимости от времени вида:

$$\{f_1, f_2, \dots, f_N\}.$$

Из этого множества значений строятся векторы состояний:

$$F_i = [f_i, f_{i+J}, \dots, f_{i+(m-1)J}],$$

где J есть задержка, а m – размерность вложения.

Из векторов состояний F_i формируется реконструируемая траектория

$$F = [F_1, F_2, \dots, F_M]^T.$$

Если рассмотреть расхожимость в i -й момент времени:

$$d_j(i) = \min_{F_j} \|F_i - F_j\|,$$

где $\|\cdot\|$ есть Евклидова норма, то

$$\ln d_j(i) \approx \ln \Delta_j^0 + \lambda_1(i\Delta t),$$

где Δ_j^0 – начальное малое возмущение, Δt – шаг по времени.

На рисунке 13 приводится аппроксимация старших показателей Ляпунова для периодического режима (рис. 2, а) с $\lambda_1 = 0$ (как и должно быть в случае предельного цикла) и хаотических автоколебаний (рис. 8, а, кривая 1) с $\lambda_1 = 0.01$. Каждая из осциллирующих кривых соответствует проведенным по программе

L1D2 вычислениям (данные были отнормированы) для различных значений задержек J и размерностей вложения m . Как и следовало ожидать, в первом случае старший показатель Ляпунова равен нулю, что полностью соответствует решению с предельным циклом, а во втором – показатель положителен. Здесь можно было бы привести аналогичное рис. 11 и рис. 12 исследование чувствительности решения к малым возмущениям начальных данных – и в первом случае решение было бы устойчиво, а во втором – нет (подобное исследование для случая ОЛСЭ-усилителя и возмущения амплитуды падающей на систему внешней волны $|E|$ при $j = 2340 \text{ A/см}^2$ приведено на рис. 16, б).

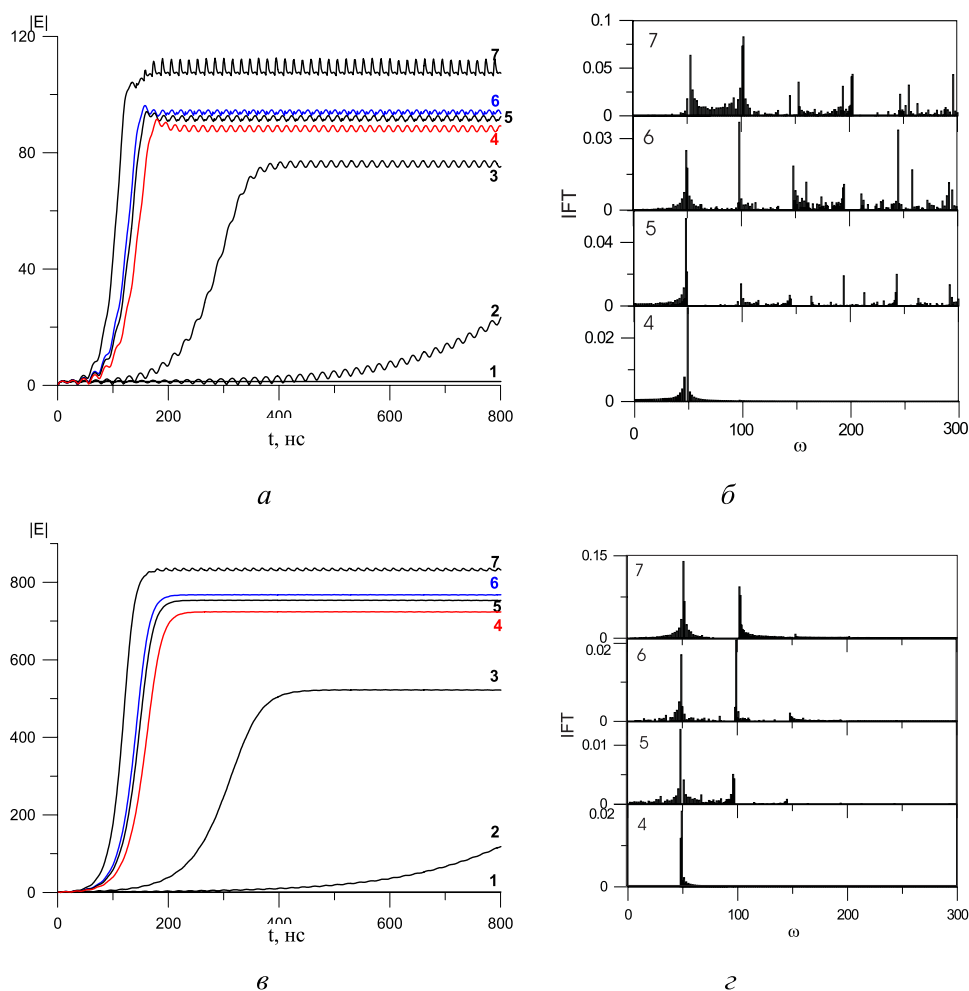


Рис. 14. Режимы периодичности и квазипериодичности для проходящей (а) и дифрагированной (б) волн в режиме усиления с соответствующими (б) и (з) энергетическими спектрами для следующих параметров плотности тока пучка j :
 1) 350 A/см^2 , 2) 450 A/см^2 , 3) 470 A/см^2 , 4) 515 A/см^2 , 5) 525 A/см^2 ,
 6) 528 A/см^2 , 7) 550 A/см^2

4. Хаос в режиме усиления

Помимо режима генерации ОЛСЭ, представленного на рис. 2–11, мы исследовали режим усиления для амплитуды падающей внешней волны $|E| = 1$ при прочих равных условиях. Оказалось, что после преодоления порога генерации в режиме генерации существует область устойчивого состояния, в то время как в режиме усиления реализуется периодический режим. С увеличением тока пучка режим сильного усиления начинает качественно совпадать с режимом генерации. Это иллюстрируется на рис. 14 и 15.

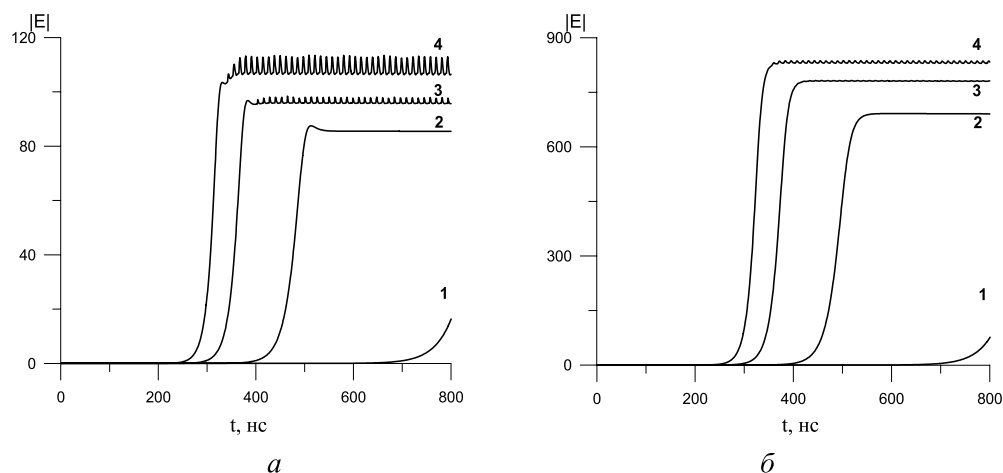


Рис. 15. Режимы устойчивости и периодичности для проходящей (а) и дифрагированной (б) волн в режиме генерации для следующих параметров плотности тока пучка j : 1) 490 A/cm^2 , 2) 505 A/cm^2 , 3) 530 A/cm^2 , 4) 550 A/cm^2

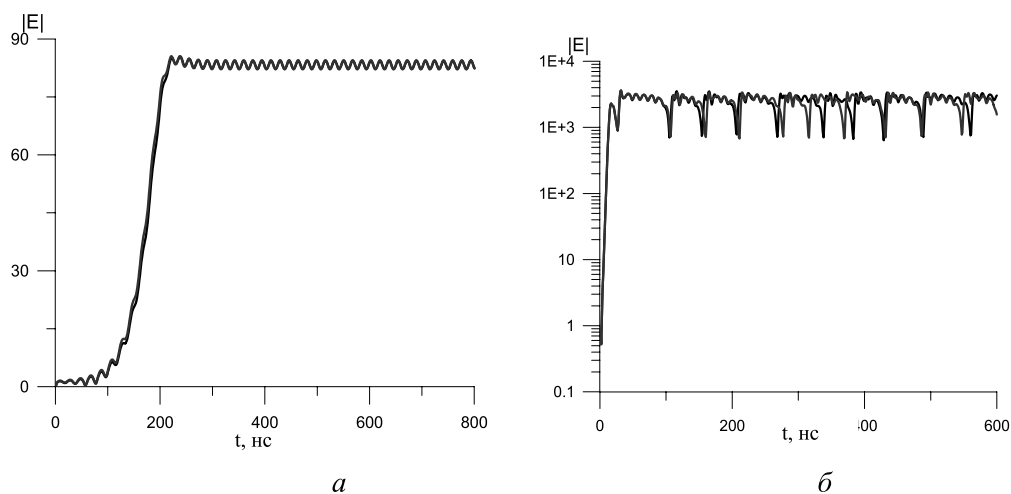


Рис. 16. Решение в случае возмущения начальных данных (а) $j = 500 \text{ A/cm}^2$, $|E| = 1$ (черная кривая) и $|E| = 1.1$ (серая кривая); (б) $j = 2340 \text{ A/cm}^2$, $|E| = 1$ (черная кривая) и $|E| = 1+10^{-15}$ (серая кривая)

Продолжим исследование устойчивости фазовых траекторий динамического хаоса к малым возмущениям начальных условий ОЛСЭ. Исследуем свойства чувствительности полученных решений к возмущениям начального условия $|E| = 1$ для режима усиления ОЛСЭ. На рис.16, *а* приведено решение системы для $j = 500 \text{ A/cm}^2$ для $|E| = 1$ и $|E| = 1.1$. Видно, что периодическое решение устойчиво к возмущению начальных данных, что нельзя сказать о хаотическом решении при $j = 2340 \text{ A/cm}^2$ (рис.16, *б*). Поскольку вычисления проводились с двойной точностью, то даже возмущение 10^{-15} чувствительно проявляется в решении.

5. Параметрические карты осцилляций в ОЛСЭ

В работах [17–19] приведены карты динамических режимов осцилляций ОЛСЭ на параметрических плоскостях: (j, β) , (j, δ) , (j, L) . Полученные картины перехода к хаосу с наличием областей периодичности, квазипериодичности и хаоса продемонстрировали, что среди различных режимов хаоса есть окна периодичности и для прошедших, и для дифрагированных волн, а увеличение плотности тока пучка не приводит к хаосу автоматически.

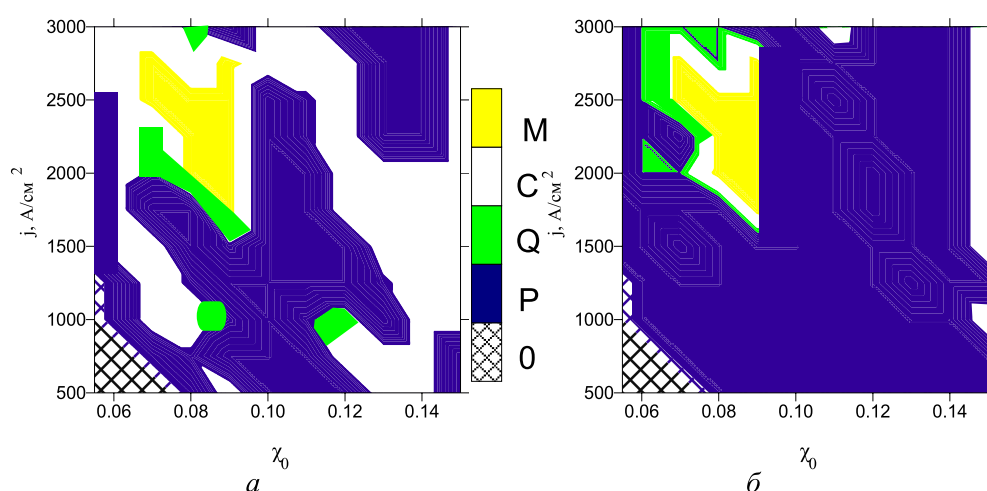


Рис. 17. Параметрическая картина перехода к хаосу в ОЛСЭ при изменении коэффициента $|\chi_0|$ разложения диэлектрической восприимчивости среды в ряд по векторам обратной решетки для прошедшей (*а*) и дифрагированной (*б*) волн.

0 описывает область ниже порога генерации. Р – периодические режимы, Q – квазипериодичность, С – хаос, М – переход между высокоамплитудными и низкоамплитудными режимами

Рассмотрим следующие параметрические карты перехода к хаосу для параметров (j, χ_0) (рис. 17) и (j, l_0) (рис. 18). Изменение диэлектрической проницаемости резонатора может быть вызвано изменением материала и толщины нитей резонатора, а также расстояния между нитями. Анализ диэлектрической проницаемости фотонных кристаллов, используемых в ОЛСЭ в качестве резонаторов, проведен в работе [8]. Системный параметр l_0 описывает волновой вектор проходящей волны внутри резонатора.

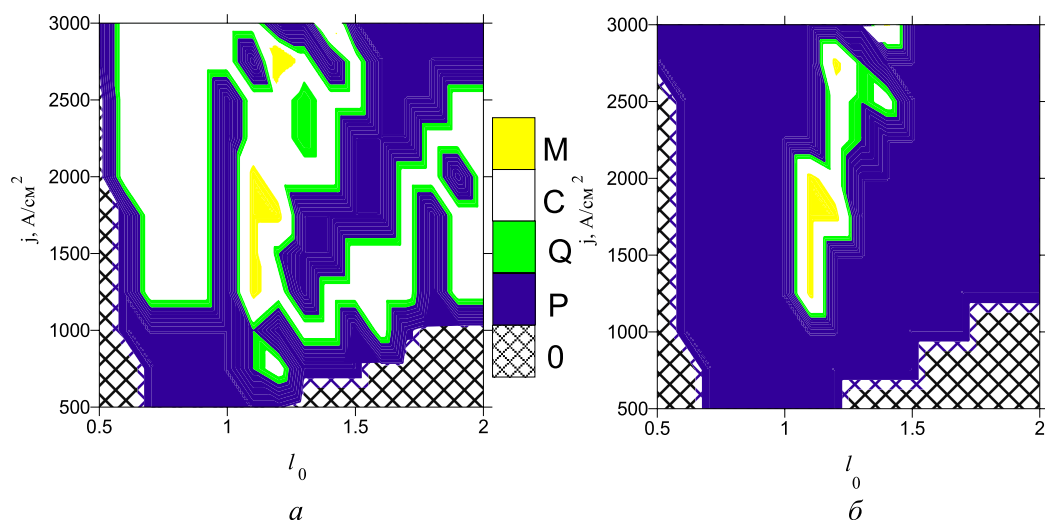


Рис. 18. Сценарий перехода к хаосу в ОЛСЭ при изменении системного параметра l_0 для прошедшей (а) и дифрагированной (б) волн. 0 означает, что плотность тока находится ниже порога. P – периодические режимы, Q – квазипериодичность, C – хаос, M – переход между высокоамплитудными и низкоамплитудными режимами

Из рисунков 17 и 18 видно, что обе параметрические карты достаточно грубы, для их уточнения требуется большая вычислительная работа. Данные параметрические карты не такие «пестрые», как полученные в [17–19]. Однако здесь, как и ранее в [17–19], наблюдается полоса периодичности вдоль порога генерации, которая затем сложным образом трансформируется в различные хаотические режимы через удвоение периода, бифуркации Хопфа, вводящие в систему новые основные частоты, а также через переходы между высокоамплитудными и низкоамплитудными режимами.

6. Заключение

Разработанные вычислительные алгоритмы могут эффективно применяться при моделировании нелинейных режимов работы ОЛСЭ, что было подтверждено численными экспериментами. Численные результаты согласуются с аналитическими оценками, полученными в линейном приближении. На основании проведенного анализа можно сделать вывод о возможности численно моделировать работу ОЛСЭ в будущих экспериментах.

Поскольку имеется свыше десяти управляющих параметров, то проблема исследования перехода к хаосу в ОЛСЭ представляется очень сложной. Однако даже исследование некоторых переходов между режимами «порядок – хаос» является важным в свете проводимых в НИИ ЯП экспериментальных исследований ОЛСЭ.

Литература

1. Baryshevsky V. G., Feranchuk I. D. // Physics Let. A. 1984. Vol.102. P. 141.
2. Барышевский В. Г. // Докл. АН СССР. 1988. Т. 299. С. 1336.
3. Барышевский В. Г., Дубовская И. Я., Феранчук И. Д. // Весці АН БССР. Сер. фіз.-мат. н. 1988, № 1. С. 92.

4. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G., Dubovskaya I. Ya.* // J. Phys. D. 1991. Vol. 24. P. 1250.
5. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G., Dubovskaya I. Ya.* // Phys. Stat. Sol. 1992. Vol. B169. P. 235.
6. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G., Dubovskaya I. Ya.* // NIM. 1994. Vol. A341. P. 274.
7. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G., Dubovskaya I. Ya.* // NIM. 1996. Vol. A375. P. 292.
8. *Baryshevsky V. G., Gurinovich A. A.* // NIM. 2006. Vol. B252, P. 92.
9. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G. et al.* // NIM. 2002. Vol. A483. P. 21
10. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G. et al.* // NIM. 2003. Vol. A507. P. 137.
11. *Baryshevsky V. G., Batrakov K. G. et al.* // NIM. 2006. Vol. B 252. P. 86.
12. *Batrakov K., Sytova S.* // Mathematical Modelling and Analysis. 2005. Vol. 10. P.1.
13. *Батраков К. Г., Сытова С. Н.* // ЖБМ и МФ. 2005. Т. 45, № 4. С. 690.
14. *Batrakov K., Sytova S.* // Nonlin. Phen. Compl. Syst. 2005. Vol. 8. P. 42.
15. *Batrakov K., Sytova S.* // Nonlin. Phen. Compl. Syst. 2005. Vol. 8, N4. P. 359.
16. *Batrakov K., Sytova S.* // Mathematical Modelling and Analysis. 2006. Vol. 11. P. 13.
17. *Sytova S.* // Mathematical Modelling and Analysis, 2008. Vol. 11. P. 263.
18. *Сытова С. Н.* // Вестник БГУ, сер. физ.-мат. н. 2008. N 9. С. 29.
19. *Sytova S.* // Proc. of the 6th Euromech Nonlinear Dynamics Conference (ENOC-2008). 2008. c7p69r4325.pdf
20. *Пинскер З. Г.* Рентгеновская кристаллооптика. 1982.
21. *Вайнштейн Л. А., Солнцев В. А.* Лекции по сверхвысокочастотной электронике. 1973.
22. *Шустер Г.* Детерминированный хаос: введение. 1984.
23. *Hur M. S., Lee H. J., Lee J. K.* // Phys. Rev. 1998. Vol. E58. P. 936.
24. *Coupric M. E.* // NIM. 2003. Vol. A507. P. 1.
25. *Гинзбург Н. С., Зотова И. В. и др.* // ЖТФ. 2002. Т. 7. С. 83.
26. *Кузнецов С. П., Трубецков Д. И.* // Известия вузов. Радиофизика. 2004. Т. XLVII. С. 383.
27. *Hahn S. L., Lee J. K.* // Phys. Rev. 1993. Vol. E48. P. 2162.
28. *Rosenstein M. T. et al.* // Physica. 1993. Vol. D65. P. 117.
29. <http://www.physionet.org/physiotools/lyapunov/l1d2/>

FIRST STEPS IN INVESTIGATION OF CHAOTIC DYNAMICS IN VOLUME FREE ELECTRON LASER

S. N. Sytova

First lasing of Volume Free Electron Lasers (VFEL) in mm wavelength range was obtained recently [9]. So-called multi-wave volume distributed feedback (VDVB) where electromagnetic waves and electron beam spread angularly one to other is the distinctive feature of VFEL. The principles and theoretical foundations of VFEL operation based on mechanism of VDVB were proposed in [1]. The main VFEL characteristic property is that the increment of instability for an electron beam passing through a spatially-periodic target in degeneration points essentially increased in comparison with single-wave system. This means the noticeable reduction of electron beam current density necessary for achievement the generation threshold for all wavelength ranges regardless the spontaneous radiation mechanism.

In VFEL operation the linear stage investigated in [2–7] quickly changes into the nonlinear one where most of the electron beam energy is transformed into electromagnetic radiation. A detailed numerical analysis of this stage is necessary for experiment design, optimal geometry determination and result processing.

Mathematical model and numerical methods for VFEL nonlinear stage simulation were proposed [13], [14]. They are implemented in computer code VOLC [17]. Different VFEL

geometries were investigated [12–19] numerically. All numerical results are in good agreement with analytical predictions.

In electronic generators and amplifiers such as free electron lasers, backward wave tube, travelling wave tube etc. self-oscillations are due to interaction of electron beam and electromagnetic field under distributed feedback. Investigation of chaos in such devices is of great interest in modern physics. In VFEL chaotic dynamics is induced by such interaction too.

Investigation of chaos in VFEL is important in the light of experimental development of VFEL at Research Institute for Nuclear Problems. As more than ten control parameters are in the system it is very complicated to investigate the full picture of possible chaotic behaviour in VFEL. We restricted ourselves to investigate here the chaotic behaviour in two-wave VFEL for Bragg geometry in amplifier and oscillator generation regimes. We considered some cases of possible root to chaos in VFEL for laser intensity with corresponding space portraits and attractors. Solution bifurcation points corresponding to transitions between different regimes of generation are considered. Parametric maps with respect to electron beam current and (1) resonator susceptibility, (2) system parameter present complicated root to chaos with windows of periodicity and quasiperiodicity.

ЭЛЕКТРОДИНАМИКА СПЕЦИАЛЬНЫХ ВЫСОКОДОБРОТНЫХ РЕЗОНАНСНЫХ СИСТЕМ И МИКРОВОЛНОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

**В. А. Карпович, Г. Я. Слепян, В. Н. Родионова, Г. И. Волынец,
А. А. Савук, О. В. Танана, И. А. Гринчук**

Резонансные системы широко применяются в современной радиотехнике для частотной фильтрации электромагнитных колебаний, реализации обратной связи при их усилении и генерации. Явление резонанса и резонансные системы широко используются при измерении характеристик материальных сред, для создания различных промышленных установок и оборудования, в основе которых лежит принцип накопления электромагнитной энергии в резонансном объеме.

Наиболее актуальными задачами, возникающими при теоретическом и экспериментальном исследовании принципов создания резонансных систем в СВЧ диапазоне, являются разработка методик расчета широкополосных элементов связи резонансных систем с одноименными волноводами и техническое приложение полученных результатов для разработки установок для измерения электродинамических характеристик композитных материалов в СВЧ диапазоне, а также технологического оборудования для микроволнового нагрева, стерилизации, сушки различных диэлектрических материалов.

1. Новые типы элементов связи высокодобротных резонансных систем и прямоугольных волноводов

Одним из главных требований, предъявляемых к универсальному измерительному резонатору, является высокая собственная добротность в сочетании с широким диапазоном перестройки частоты. Поэтому весьма важным является вопрос о широкополосном элементе связи этого резонатора с СВЧ-трактом. В настоящее время ведется активный поиск оптимальных устройств связи с линиями передачи [1–6]. Практическая реализация бездиафрагменных элементов связи в коротковолновой части длин радиоволн вызывает технологические трудности изготовления [7, 8]. Совершенствование технологии и конструкции может эти трудности уменьшить, но представляет интерес и поиск новых физических принципов реализации элемента связи резонатора с прямоугольным волноводом в данном диапазоне частот. Один из таких принципов – использование в качестве элемента связи полупрозрачной решетки и разработка устройства связи на основе сужающегося волновода. Одним из главных достоинств таких элементов является возможность управлением добротностью связи $Q_{св}$ в широких пределах путем вариации конструктивных параметров. Другое существенное качество – повышенная технологичность (решетка может быть нанесена на диэлектрическую подложку и изготовлена средствами микроэлектроники), а сужающийся волновод может быть гальванически «наращен» на технологическую оправку.

Конструкция элемента связи на основе полупрозрачной решетки показана на рис.1. Поле в волноводе записывается аналогично [9] в виде

$$\vec{H} = \frac{\vec{x}_0}{W_0} \frac{h_1}{k} \exp(-jh_1 z) A_1 \sin\left(\frac{\pi}{a} x\right), \quad (1)$$

где h_1 – постоянная распространения основной волны; W_0 – волновое сопротивление свободного пространства; k – волновое число волны в среде; x – декартова координата; a – размер широкой стенки волновода; A_1 – амплитудный коэффициент, выражаемый равенством

$$A_1 = -\frac{1}{N_1} \int (\vec{y}_0 \vec{E}) \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) dS, \quad (2)$$

S_0 – апертура решетки (прямоугольник $c \times a'$); $\vec{E}$ – поле в апертуре решетки; N_1 – норма волны; $\vec{x}_0, \vec{y}_0$ – единичные векторы.

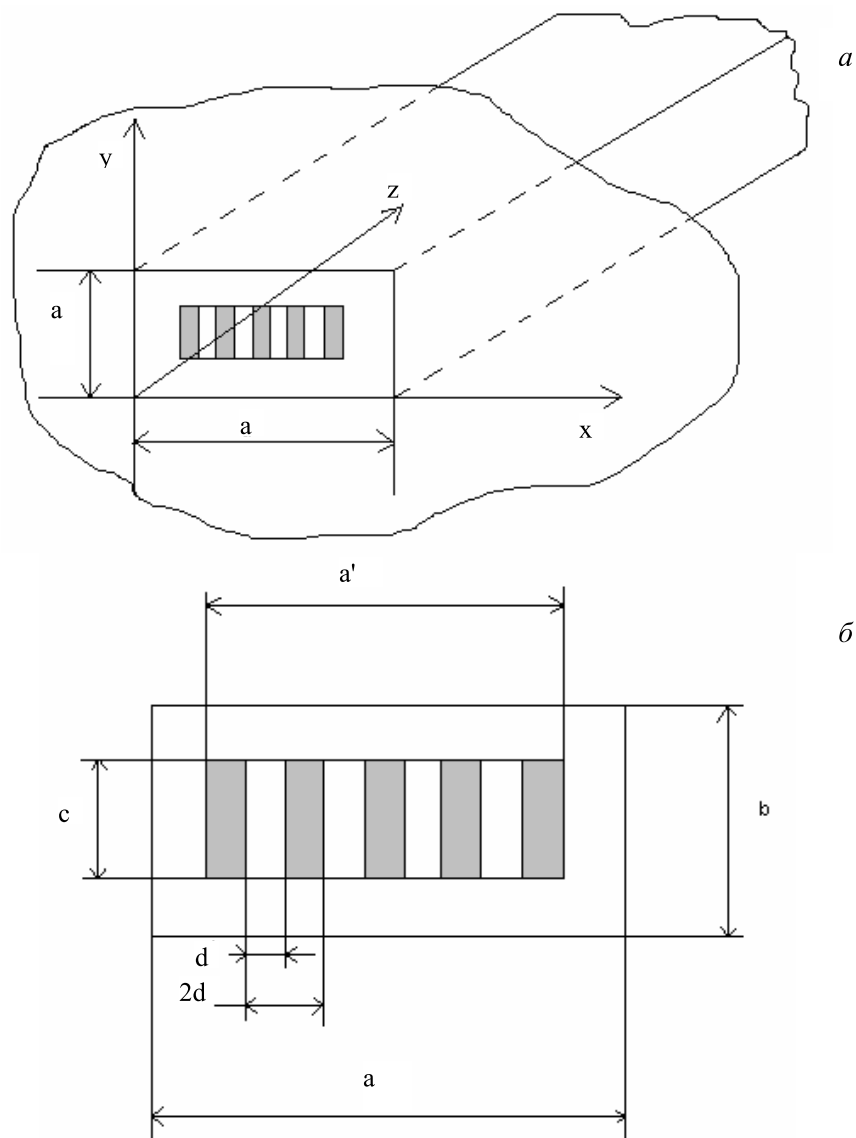


Рис. 1. Конструкция элемента связи: а – решетка связи в прямоугольном волноводе; б – конфигурация решетки связи

Вначале вычислим A_1 в пренебрежении диэлектрической подложкой, а затем выведем поправочный коэффициент, учитывающий ее влияние. Воспользуемся двухсторонними граничными условиями импедансного типа, имеющими в наших обозначениях вид [10]

$$E_y^+ - E_y^- = \frac{jk l_0}{2} W_0 (H_x^+ - H_x^-), \quad (3)$$

$l_0 = \frac{2d}{\pi} \ln\left(\frac{1}{\cos\theta}\right)$, где $\theta = \pi\alpha/2d$, α – полуширина ленты, d – полупериод решетки, индексами $\pm$ обозначены поля внутри резонатора и волновода соответственно.

Особый интерес для элемента связи представляет частный случай редкой решетки, когда $\theta \ll 1$. Тогда $\cos\theta \cong 1 - \theta^2/2$ и для l_0 получаем приближенное равенство $l_0 \approx \pi\alpha^2/4d$. В этом приближении является оправданным использование упрощенного граничного условия (3) вместо более полной системы граничных условий, также приведенной в [10].

Используя (3), получаем

$$|A_1| = \frac{kl_0 W_0 c}{N_s} H_{0x} \int_0^{a'/2} \cos \frac{\pi x'}{a} dx' = \frac{kl_0 W_0 a c H_{0x}}{\pi N_s} \sin\left(\frac{\pi a'}{2a}\right), \quad (4)$$

H_{0x} – поле рабочего колебания резонатора на поверхности решетки. Для сравнения приведем формулу для $|A_1|$ в случае круглого отверстия [7]:

$$|A_1| = \frac{4}{3} r^3 \omega \mu_0 H_{0x} \frac{1}{N_s}, \quad (5)$$

где r – радиус отверстия, $\omega = 2\pi f$, μ_0 – магнитная проницаемость вакуума.

Сравнивая (5) с (4), мы приходим к заключению, что решетка эквивалентна круглому отверстию связи с эффективной магнитной поляризуемостью

$$M_{эф} = l_0 c I = \frac{l_0 a c}{\pi} \sin\left(\frac{\pi a'}{2a}\right). \quad (6)$$

Возможен также и другой способ вычисления $M_{эф}$, основанный на формуле для магнитной поляризуемости одиночной узкой щели с прямоугольной апертурой ($M \approx 4\pi\alpha^2 c/16$). Тогда

$$M_{эф} \cong \frac{\pi}{16} \frac{4\alpha^2 c}{2d} \sum_{p=1}^N 2d \sin\left[\frac{\pi}{a}(x_p + 2pd)\right], \quad (7)$$

где N – число щелей в решетке. Суммируя конечный ряд в (7), приходим к равенству $M_{эф} \approx \pi\alpha^2 c I/4d$, при условии $\theta \ll 1$ совпадающему с (6). Подобное

совпадение формул, полученных из различных исходных предпосылок, является дополнительным свидетельством правильности произведенных выкладок.

Перейдем к учету влияния диэлектрической подложки (рис. 2). Прежде всего отметим, что для поля рассматриваемой поляризации (электрическая компонента параллельна щелям) наличие на поверхности решетки границы раздела сред с различными ε не изменяет граничного условия (3) [12, 13].

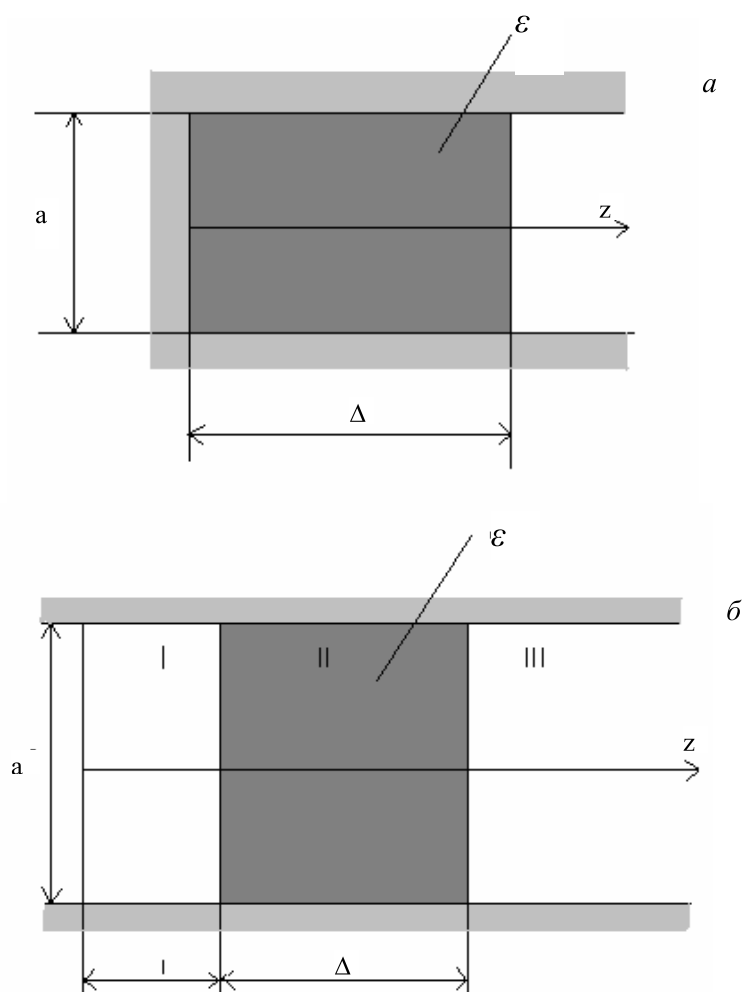


Рис. 2. Геометрия модельной задачи для возбуждения полубесконечного волновода с диэлектрической пластиной магнитным током: *a* – схема возбуждения магнитным током, расположенным на торцевой стенке; *б* – конфигурация частичных областей для решения ключевой задачи

Наличие подложки приводит к изменению амплитуды волн, возбуждаемых элементом связи, за счет эффектов парциального отражения от двух границ подложки. Чтобы учесть этот эффект фактически нам необходимо рассмотреть ключевую задачу о возбуждении полубесконечного прямоугольного волновода с диэлектрической пластиной магнитным током, расположенным на торцевой

стенке (рис. 2, а). Анализ удобно начать с более общей структуры (рис. 2, б) и лишь потом перейти к пределу $l \rightarrow 0$. Используем метод частичных областей; частичные области показаны на рис. 2, б римскими цифрами. Поля n -й собственной волны в каждой из частичных областей представляются в виде

$$\left. \begin{aligned} f_n^I(z) &= A_n \exp(jh_n z) + B_n \exp(-jh_n z), \\ f_n^{II}(z) &= C_n \exp(jh_n^\varepsilon z) + D_n \exp(-jh_n^\varepsilon z), \\ f_n^{III}(z) &= E_n \exp(jh_n z), \end{aligned} \right\}, \quad (8)$$

где B_n, C_n, D_n, E_n – неизвестные коэффициенты, $h_n = \sqrt{k^2 - (n\pi/a)^2}$,

$h_n^\varepsilon = \sqrt{k^2 \varepsilon - (n\pi/a)^2}$, $A_n = \frac{j\varepsilon_0}{h_n} \int_{\Sigma} \vec{f} \vec{F}_n d\Sigma$ – амплитуда n -й волны в волноводе без

пластины, вычисленная по методике [11] ($\vec{f}$ – плотность магнитного тока, $\vec{F}_n$ – n -я собственная функция магнитного вектор-потенциала). Цель проводимых ниже вычислений – выразить E_n через A_n , пользуясь граничными условиями на границах раздела частичных областей. Они элементарны, поэтому сразу приведем окончательный результат. В пределе $l \rightarrow 0$ получаем

$$E_n = A_n \exp[j(h_n^\varepsilon - h_n)\Delta] \left(\frac{a_n - b_n}{a_n - b_n e^{2jh_n^\varepsilon \Delta}} \right), \quad (9)$$

где $a_n = (1 + h_n^\varepsilon/h_n)^2$, $b_n = (1 - h_n^\varepsilon/h_n)^2$.

Из (9) получаем $|E_n|^2 = \beta_n |A_n|^2$, где $\beta_n = \frac{(a_n - b_n)^2}{a_n^2 + b_n^2 - 2a_n b_n \cos(2h_n^\varepsilon \Delta)}$.

Введя обозначение $y_n = \left(\frac{h_n^\varepsilon}{h_n} \right)^2$, можно переписать β_n в виде

$$\beta_n = \frac{1}{1 + \frac{(1 - y_n)^2}{4y_n} \sin^2(h_n^\varepsilon \Delta)}. \quad (10)$$

Равенство (10) фактически решает поставленную задачу. Для нас представляет интерес частный случай его при $n = 1$, характеризующий основную волну. Для него окончательный результат представляется в виде

$$\beta_1 = \beta \approx \left\{ 1 + \frac{(\varepsilon - 1)^2 \sin^2[k\Delta \sqrt{\varepsilon - \left(\frac{\pi}{ka}\right)^2}]}{4[1 - \left(\frac{\pi}{ka}\right)^2][\varepsilon - \left(\frac{\pi}{ka}\right)^2]} \right\}^{-1} \quad (11)$$

Соотношение (11) есть форма решения, наиболее удобная для численных оценок и качественного анализа. В соответствии с ним, учет влияния подложки сводится к замене $M_{эфф} \rightarrow \sqrt{\beta} M_{эфф}$. Далее, для $Q_{св}$ можно применить соотношение, полученное для диафрагменных элементов в [7]:

$$Q_{св} \approx \frac{ab\lambda^2 L^2}{32\pi\beta M_{эфф}^2 \sqrt{1 - \left(\frac{\lambda}{2a}\right)^2} \sqrt{\frac{L}{2r_0} \left(1 - \frac{L}{2r_0}\right)}}, \quad (12)$$

где a и b – размеры выходного волновода, λ – длина волны, r_0 – радиус кривизны зеркал, L – расстояние между зеркалами, $M_{эфф}$ – определяется равенством (6), а коэффициент β – соотношением (11). Проанализируем физический смысл соотношения (12). Из него видно, что управлять величиной $Q_{св}$ в широких пределах можно, варьируя $M_{эфф}$ путем изменения как размеров решетки a', c , так и коэффициента заполнения $\frac{\alpha}{d}$. Последнее остается единственной возможностью, если из конструктивно-технологических соображений решетку целесообразно выполнить занимающей все сечение волновода ($a' = a$, $b = c$). Далее, так как $\beta \leq 1$, влияние подложки приводит к деполяризации решетки и, как следствие, уменьшению связи при тех же геометрических размерах элемента. Для диэлектриков типа «поликор» ($\varepsilon \approx 10$) уменьшение связи может быть существенным, но его можно компенсировать, выбирая толщину подложки в соответствии с условием

$$k\Delta \sqrt{\varepsilon - \left(\frac{\pi}{ka}\right)^2} = \pi.$$

Полная компенсация возможна только на определенной частоте, но частичная компенсация реализуема в достаточно широком диапазоне.

Диэлектрические подложки позволяют существенно повысить рабочие частоты диафрагменных элементов связи, описанных в [7]. Ограничения на их рабочие частоты, как известно, связаны с уменьшением размера отверстия при росте частоты технологическими трудностями их изготовления. Подложка позволяет реализовать заданное $Q_{св}$ при большем размере отверстия и изготовить диафрагменный элемент средствами микроэлектроники. При этом в качестве материала подложки целесообразно использовать вещества со значительными ε (например, поликор), а оптимальную толщину выбирать в соответствии с условием

$$k\Delta_{opt} \sqrt{\varepsilon - \left(\frac{\pi}{ka}\right)^2} = \frac{\pi}{2},$$

где k соответствует средней частоте рабочего диапазона.

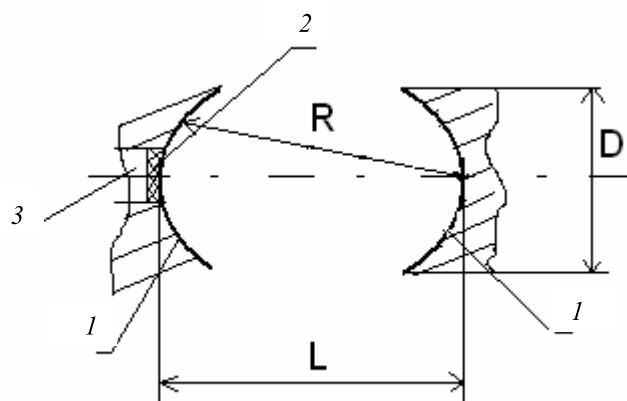


Рис. 3. Конструкция резонатора с элементом связи: 1 – зеркала ОР; 2 – элемент связи; 3 – возбуждающий волновод

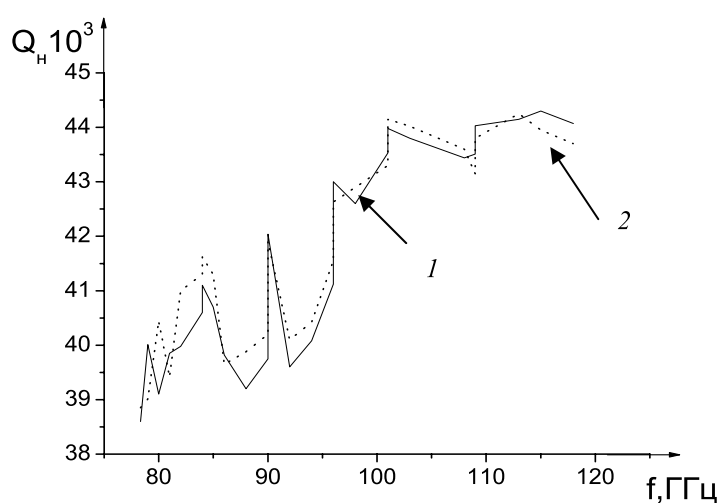


Рис. 4. Экспериментальные данные добротности открытого резонатора с различными устройствами связи: 1 – резонатор с плоской щелевой решеткой; 2 – резонатор с диафрагменным устройством связи

Параметром, характеризующим оптимальное согласование резонатора с СВЧ-трактом, является величина коэффициента стоячей волны (КСВ). Измерение КСВ проводили по стандартной методике [14].

Измерение КСВ производилось для устройства связи на основе дифракционной решетки, которая была установлена в открытый резонатор, в диапазоне частот 78–118 ГГц (рис.3).

Кроме измерения КСВ, экспериментально исследовался также и один из важнейших параметров – добротность резонатора (Q).

Результаты экспериментальных исследований приведены в табл. 1.

Результаты экспериментальных исследований ОР с новым элементом связи

f , ГГц	$L_{пр}$, дел	КСВ	Q_n
78.33	0.01	1.25	38600
79.01	1.38	1.6	40010
80.0	2.96	1.21	39100
81.0	4.82	1.3	39850
82.0	6.43	1.34	39980
84.0	9.7	1.41	40600
84.0	0.78	1.48	41100
85.0	2.42	1.38	40700
86.0	4.07	1.23	39820
88.0	7.34	1.18	39200
90.0	10.38	1.22	39750
90.0	0.68	1.37	42040
92.0	4.0	1.14	39600
94.0	7.16	1.26	40080
96.0	10.81	1.39	41120
96.0	0.42	1.48	43000
98.0	3.93	1.33	42600
101.0	9.75	1.46	43530
101.0	1.05	1.52	43980
103.0	3.7	1.54	43800
108.0	9.85	1.34	43440

На рисунке 4 приведены сравнительные экспериментальные данные нагруженной добротности Q_n резонатора с элементом связи на основе плоской решетки и нагруженной добротности резонатора с диафрагменным элементом связи в диапазоне 78–118 ГГц. Анализируя результаты, можно констатировать, что применение решетки практически не ухудшило нагруженную добротность резонатора.

Представляют также значительный интерес бездиафрагменные элементы связи через плавнонерегулярные волноводные переходы. Такие элементы связи обеспечивают более высокую селекцию возбуждения мод, чем элементы с малыми отверстиями.

Рассматривались два типа резонаторов: резонатор с двумя идентичными сферическими зеркалами (рис. 5) и резонатор, одно из зеркал которого сферическое, а другое – плоский диск (рис. 6).

Элемент связи расположен в центре зеркала и представляет собой узкую щель размером $2a_1 \times b$ ($2a_1 \ll b$). К щели подсоединен плавный волноводный переход к волноводу связи стандартного сечения, ориентированный ортогонально поверхности зеркала. Плавный переход характеризуется законом нерегулярности $a = a(z)$, $b = const$, который в теоретическом анализе мы будем предполагать произвольным.

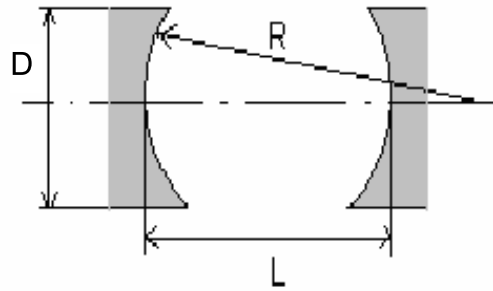


Рис. 5. Геометрия резонатора с двумя сферическими зеркалами

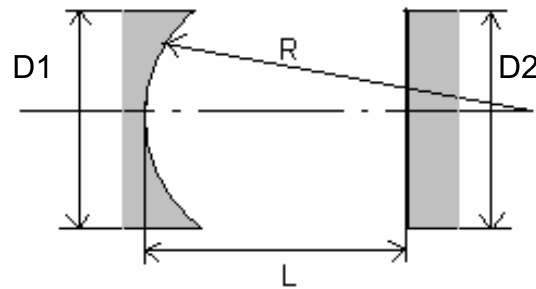


Рис. 6. Геометрия резонатора с одним сферическим и одним плоским зеркалом

Важнейшим физическим параметром элемента связи является добротность связи отдельного собственного колебания TEM_{0nq} , выражаемая соотношением:

$$Q_{CB} = \pi f_0 N / \Sigma, \quad (13)$$

где f_0 – резонансная частота; Σ – средняя за период мощность, поступающая из резонатора в волновод связи; N – норма колебания.

Конфигурация модельной задачи для электродинамического анализа элемента связи показана на рис 7.

В работе [15] приведен расчет добротности такого элемента связи. Предложено перейти от реального элемента связи к его прототипу, в котором узкие «электрические» стенки заменяются «магнитными» стенками. Это позволило перейти от сложной трехмерной электродинамической задачи к ключевой двумерной задаче, решаемой более простыми методами. Такой подход нашел широкое применение при расчете матриц рассеяния различных неоднородностей в микрополосковых линиях (модели Олинера [16]). Оказывается, что пределы его применимости значительно шире интегральных схем СВЧ: в частности, он может быть применен в задачах связи квазиоптических открытых резонаторов с прямоугольными волноводами.

Условие физической эквивалентности прототипа данному элементу связи заключается в равенстве волноводных импедансов рабочих мод в соответствующих сечениях элемента связи и его прототипа. Для этого размер широкой

стенки прототипа должен быть равен $b_{011} = b\nu$, где $\nu = (1 - (\lambda/2b)^2)^{1/2}$. Структура поля рабочих колебаний TEM_{0nq} в резонаторе практически не будет меняться, если «магнитные» стенки будут продолжены в резонатор. В частности, такая олинеровская модель позволяет вычислить Σ в волноводе. Мы представляем колебания в резонаторе, когда трехмерные гауссовские пучки в ключевой задаче переходят в плоские волны: по оси x в виде гауссовского пучка, а по оси y в виде волноводного. Σ будет такой же, как и в случае дифракции одного луча на одном зеркале с элементом связи, т. е.

$$\Sigma = \frac{2a_0 |T_0|^2 E_0^2 b \nu d}{W_0 L}, \quad (14)$$

где $2d$ – фокусное расстояние; $W_0 = 120\pi\Omega$; T_0 – коэффициент передачи.

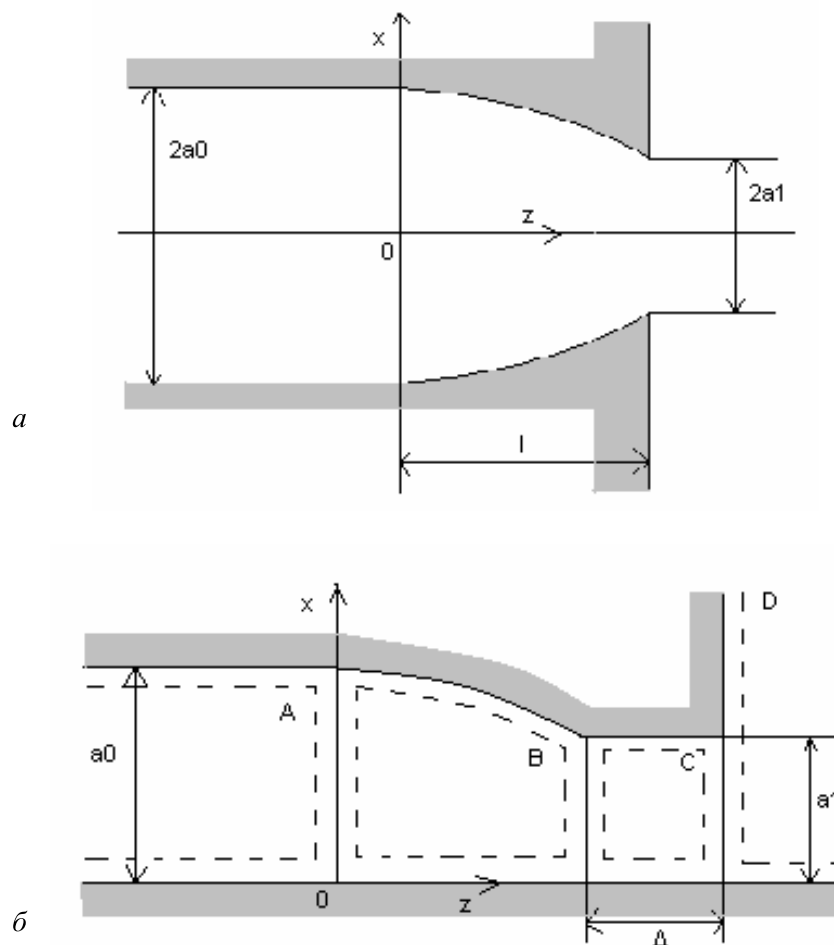


Рис. 7. Модельные задачи для электродинамического анализа элемента связи

Следовательно, для Q_{CB} :

$$Q_{CB} = \frac{\pi L^2}{\alpha \nu a_0 b |T_0|^2} \left(\frac{L}{\alpha R} \left(1 - \frac{L}{\alpha R} \right) \right)^{-1/2}, \quad (15)$$

где L – расстояние между зеркалами; R – радиус кривизны зеркал; α – коэффициент, зависящий от типа резонатора ($\alpha = 2$ для резонатора a ; $\alpha = 1$ для резонатора b).

Индексы собственного колебания n, q входят в $\sum$ через L и T_0 : эти величины вычисляются на резонансных частотах, определяемых индексами n, q . Использование формулы для $\sum$ требует вычисления или оценки $|T_0|^2$ из вспомогательной ключевой задачи. Простые аналитические оценки его затруднительны, но возможен высокоэффективный и строгий численный метод.

Формулы для $\sum$ и Q_{CB} неприменимы в узких окрестностях частот вырождения диагонализированной кратности. Это связано с тем, что их вывод основан на теории малых возмущений (элемент связи мало изменяет величины ω_0 и N).

Для вычисления T_0 было проведено решение ключевой задачи, показанной на рис. 7, а, заключающееся в решении двумерного уравнения Гельмгольца:

$$\nabla_{xz}^2 \varphi + k^2 \varphi = 0,$$

для y – компоненты магнитного поля ($\varphi = H_y$), удовлетворяющей граничному условию Неймана на поверхности структуры, условию излучения на бесконечности и условию Мейкснера на ребре.

Вначале рассматривали модифицированную структуру, показанную на рис. 7, б; к пределу $\Delta \Rightarrow 0$ переходили на заключительной стадии решения.

Подобная модификация рассматриваемой геометрической области часто используется в полуаналитических методах решения краевых задач электродинамики [17, 18] (полуобращение, метод вычетов, метод обобщенных матриц рассеяния и т. д.). Суть ее в том, что она позволяет легко выделить часть полного оператора, подлежащую аналитическому обращению. Применили неполный метод Галеркина с полуобращением сингулярных операторов в граничных условиях. Процедура полуобращения идентична предложенной в работе [19]. В областях A и C применялось разложение по собственным волнам регулярного волновода. В области $D(z > 1 + \Delta)$

$$\varphi(x, z) = \int_0^\infty A(\alpha) \cos \alpha x \exp(-\gamma(z-1-\Delta)) d\alpha + 2A_0 \cos k(z-1-\Delta), \quad (16)$$

где A_0 – амплитуда падающей плоской волны, $\gamma = \sqrt{\alpha^2 - k^2}$; $A(\alpha)$ – неизвестная спектральная амплитуда.

В нерегулярной области B использовали разложение

$$\varphi(x, z) = \sum_{n=0}^\infty P_n(z) \cos \frac{n\pi}{a(z)} (x - a(z)), \quad (17)$$

где $\bar{P} = \{P_n(z)\}$ – неизвестная вектор-функция.

Для нее при помощи стандартной схемы неполного метода Галеркина [20] получили систему собственных дифференциальных уравнений:

$$\vec{P}''(z) + H(z)\vec{P}'(z) + B(z)\vec{P}(z) = 0, \quad (18)$$

где $H(z), B(z)$ – заданные матрицы-функции.

Сшивание полей на границах частичных областей $z = 0, z = L, z = L + \Delta$ приводит к следующей системе равенств:

$$\begin{cases} \vec{P}'(0) + (\zeta_0 - \Gamma_0)\vec{P}(0) = 0, \\ \vec{P}(0) = \vec{T}, \\ \vec{P}'(l) + (\zeta_1 - \Gamma_1)\vec{P}(l) = 2\Gamma_1 E^+ \vec{c}, \\ \vec{P}(l) = E^- \vec{b} + E^+ \vec{c}, \end{cases} \quad (19)$$

$$\int_0^\infty A(\alpha) \cos \alpha x d\alpha + 2A_0 = \sum_{n=0}^\infty (c_n + b_n) \cos \frac{n\pi}{a_1} x, \quad 0 < x < a_1$$

$$\int_0^\infty A(\alpha) \gamma \cos \alpha x d\alpha = \sum_{n=0}^\infty (c_n - b_n) \gamma_n^{(1)} \cos \frac{n\pi}{a_1} x, \quad 0 < x < a_1$$

$$\int_0^\infty A(\alpha) \gamma \cos \alpha x d\alpha = 0, \quad a_1 < x < \infty$$

где $\vec{T}$ – вектор амплитуд собственных волн, уходящих от нерегулярного участка в области A ; $\vec{b} = \{b_n\}, \vec{c} = \{c_n\}$ – векторы амплитуд соответственно прямых и встречных собственных волн в области C ; Γ и E – диагональные матрицы с элементами:

$$\Gamma_{0,1mn} = \delta_{mn} \gamma_n^{(0,1)}, \gamma = \sqrt{\alpha^2 - k^2},$$

$$\gamma_n^{(0,1)} = \sqrt{(n\pi/a_{0,1})^2 - k^2}, E_{mn} \pm = \delta_{mn} \exp(\mp \gamma_n^{(1)} \Delta)$$

δ_{mn} – символ Кронекера. Выражения для элементов матриц $\zeta_0, \zeta_1, H(Z), B(Z)$ приведены в работе [21].

Следующий этап состоял из исключения $\vec{b}$ и $\vec{c}$ из (7) (т. е. выражения их через $\vec{P}(l)$). В результате получается граничное условие для $\vec{P}$ при $z = l$, которое образует двухточечную краевую задачу для вектор-функции $\vec{P}(z)$. Это граничное условие имело вид

$$\vec{P}'(l) + (\zeta_1 - \Gamma_1)\vec{P}(l) + \Gamma_1 V^{-1} \vec{P}(l) = \Gamma_1 V^{-1} \Gamma_1^{-1} Q W^{-1} \vec{r}, \quad (20)$$

где $V = I + \Gamma Q W^{-1} Y$.

$$Y_{pn} = F_n^v(n\pi) = \frac{J_{2\pi v}(n\pi)}{(2n\pi)^v}, v = \frac{\pi + 2 \arctg(a'l)}{6\pi + 4 \arctg(a'l)}.$$

$J_\mu(x)$ – функция Бесселя порядка μ ;

$$\begin{aligned}
Q_{nm} &= -(2 - \delta_{n0})\pi F_m(n\pi), W = W^{(1)} + W^{(2)}; \\
W_{pm}^{(1)} &= -a_1 2^{-4\nu} \frac{\Gamma(1+2\nu)\Gamma(m+p)(1-\delta_{p+m,0})}{\Gamma(1+m-p+\nu)\Gamma(1-m+p+\nu)\Gamma(1+m+p+2\nu)} - \\
&\quad - \frac{\pi\delta_{p0}\delta_{m0}}{2^{4\nu+1}\Gamma^2(\nu+1)\gamma_0^{(1)}} + a_1 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{F_p^{(\nu)}(n\pi)F_m^{(\nu)}(n\pi)}{n\pi}, \\
W_{pm}^{(2)} &= -2a_1 \int F_p^{(\nu)}(\alpha a_1)F_m^{(\nu)}(\alpha a_1)q_{mp}(\alpha)d\alpha + a_1 \sum_{n=1}^{\infty} F_p^{(\nu)}(n\pi)F_m^{(\nu)}(n\pi)\varepsilon_n, \\
\varepsilon_n &= \frac{1}{\gamma_n^{(1)}a_1} - \frac{1}{n\pi}, \\
q_{mp}(\alpha) &= \left(\frac{1}{\gamma} - \frac{1}{\alpha}\right) + \delta_{m+n,0} \frac{1}{\alpha},
\end{aligned}$$

где $\Gamma(x)$ – гамма-функция.

Вектор r характеризует возбуждающий источник и определяется

$$r_n = 2A_0 F_n^{(\nu)}(0).$$

Для численного решения полученной краевой задачи была выполнена редукция всех матриц и векторов к их конечномерным аналогам [21]. После этого был использован метод направленной ортогонализации.

Интегралы в $W_{pm}^{(2)}$ представлялись рядами по степеням ka_1 , которые с привлечением двойной точности эффективно суммируются до $ka_1 < 10$. Суммирование медленно сходящихся рядов в $W_{pm}^{(1)}$ проводилось по методике [22].

Искомый коэффициент T_0 выражается через решение ключевой задачи равенством $T_0 = P_0(0)$.

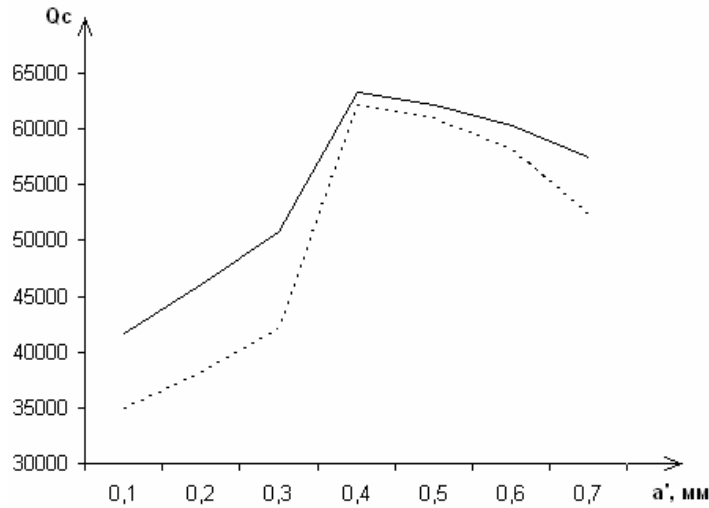


Рис. 8. Расчетная зависимость добротности связи от размера a_1 окна связи

Размеры плавных возбуждающих волноводов

Сечение возбуждающего волновода, $a \times b$, мм	5.2×2.6	2.4×1.8	1.6×0.8
Сечение щели на зеркале, $a_1 \times b$, мм	5.2×0.45	2.4×0.35	1.6×0.25



Рис. 9. Зеркало ОР с плавным волноводным переходом

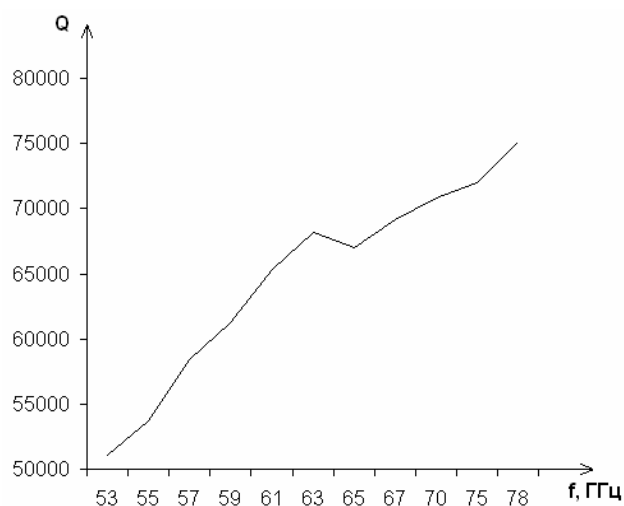


Рис. 10. Экспериментальные результаты частотной зависимости нагруженной добротности исследуемых резонаторов

Результаты расчетов добротности связи открытых резонаторов в диапазонах 53–78 ГГц; 78–18 ГГц; 118–178 ГГц в зависимости от размеров окна связи приведены на рис. 8 (сплошная линия – экспериментальные данные, пунктир – расчетные данные).

Проектировались и исследовались клинообразные нерегулярные переходы с $a(z) = a_0 + (a_1 - a_0)z/l$. В табл. 2 приведены размеры плавных возбуждающих волноводов каждого из ОР.

Параметром, характеризующим согласование резонатора с СВЧ трактом, является величина коэффициента стоячей волны (КСВ). Измерения КСВ проводили по стандартной методике [23]. В качестве источника сигнала использовались высокостабильные твердотельные генераторы, разработанные нами (нестабильность частоты $< 10^{-5}$, выходная мощность > 50 мВт).

На рисунке 9 представлено зеркало ОР с плавным волноводным переходом. Результаты экспериментального исследования нагруженной добротности открытых резонаторов в диапазонах 53–78 ГГц; 78–118 ГГц; 118–178 ГГц приведены на рис. 10.

2. Измерение поглощающих и отражающих характеристик наноразмерных углеродных композитов в СВЧ диапазоне радиоволн

Электродинамика наноразмерных углеродных композитов вызывает в последние годы все возрастающий интерес широким кругом прикладных возможностей для таких сред в современной радиофизике. Прикладные возможности нанокompозитов в значительной степени обусловлены тем, что их материальные характеристики могут кардинально отличаться от материальных характеристик составляющих их компонент. Нанокompозитные среды могут обладать совершенно необычными электромагнитными свойствами, не имеющими аналогов среди естественных сред. Пример – среды с отрицательным значением показателя преломления (так называемые среды Веселаго). Становятся актуальными экспериментальные исследования электромагнитных свойств искусственных нанокompозитов. Методы измерения, применяемые для естественных сред, не всегда могут быть автоматически перенесены на композиты, т. к. их материальные параметры могут варьироваться в широких пределах. Нами разработаны физические методы измерения и экспериментального исследования электрофизических параметров искусственных нанокompозитных сред в сверхвысокочастотном (СВЧ) диапазоне длин волн.

Для проведения экспериментов была создана схема (рис. 11). В нее включены вентили 2 для обеспечения развязки между различными элементами измерительной схемы (при этом обеспечен уровень переотражений < 0.2 дБ). Атенюаторы 3 включены для обеспечения стабильного уровня мощности (при этом обеспечено $7.0 \text{ мкВт} \pm 10 \text{ мкВ}$). В качестве задающего генератора 1 использован генератор на диоде Ганна (частотная стабильность 10^{-6} , достигнута использованием внешнего стабилизирующего гофрированного резонатора [25, 26] с $Q \cong 10^5$).

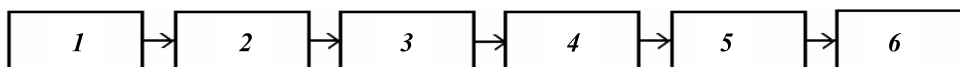


Рис. 11. Структурная схема измерения параметров нанокompозитных образцов:
1 – генератор Ганна, 2 – вентиль, 3 – аттенюатор, 4 – волновод, 5 – волноводная вставка,
6 – измеритель мощности

Методика измерений основывалась на использовании схемы замещения [24]. В качестве первого этапа производилось измерение прошедшей мощности P_0 при отсутствии образца. Затем измерялись величины P при наличии образца. Величина ослабления определялась по формуле

$$N = \lg\left(\frac{P_0}{P}\right). \quad (21)$$

При измерении порошковых образцов использовалась волноводная вставка. Вставка представляла собой отрезок стандартного волновода сечением 23×10 мм, длиной 4 мм. Входное и выходное сечения закрывались плоскими слоями фторопласта толщиной 0.1 мм. Выбор фторопласта в качестве материала обусловлен его малыми потерями (ослабление $\leq 0.1 \div 0.2$ дБ). Порошок помещался внутрь вставки и уплотнялся. Уплотнение необходимо для исключения погрешностей, связанных с флуктуациями плотности материала внутри образца и при переходе от одного образца к другому.

Для контроля точности измерений производились повторные измерения при различных ориентациях вставок относительно поперечного сечения волновода.

Углеродные нанотрубки получали по методике, аналогичной описанной в работе [27], углеродные нановолокна – [28]. Нанотрубки получали на катализаторе, содержащем 5 мас. % Co+Mo (1:3), при 940 °С. Первичные продукты отмывали от основной массы катализатора и сушили. Зольность определяли гравиметрическим методом с отжигом на воздухе при 850 °С. Точную величину зольности исследованной партии нанотрубок определить не удалось, однако по аналогии с другими партиями можно говорить, что она находится в пределах 6–8 мас. %. Некоторые свойства продуктов описаны в [29]. Результаты экспериментальных исследований углеродных нанотрубок и нановолокон приведены в табл. 3.

Таблица 3

Величина ослабления углеродных нанотрубок и углеродных нановолокон (РХТУ им. Д. И. Менделеева)

Частота, ГГц	Ослабление: углеродные нанотрубки (...Co-Mo- 5 мг)	Ослабление: углеродные нановолокна диаметр 30–60 нм, зольность 1.46–1.48 %, содержат никель
8.15	43.1	41.0
10.0	44.2	45.5
12.42	42.8	43.2

Как показывают измерения, представленные для экспериментального исследования образцы, имеют перспективы применения для создания миниатюрных неперестраиваемых фильтров для следящих приемников, используемых как пре- и постселекторы, а также при создании частотно-селективных ограничителей мощности, согласованных нагрузок. Основная перспектива применения дешевых углеродных нановолокон – широкополосные радиопоглощающие материалы.

3. Микроволновые технологии

С 1994 г. в НИИ ЯП ведутся исследования в области применения микроволновой энергии для сушки и стерилизации различных продуктов и материалов (древесина, грунт, минеральные субстраты, пищевые продукты, керамика и др.). К настоящему времени достоверно установлена высокая эффективность и экономичность технологий микроволновой сушки и стерилизации. Воздействие электромагнитных волн оказывает избирательное воздействие на патогенные микроорганизмы. Практическим приложением результатов этих исследований явилась разработка оборудования для сушки и стерилизации различных материалов [30, 31, 44]. Эффективность микроволновой стерилизации и сушки подтверждает многолетний начиная с 1996 г. опыт ее применения на предприятиях Республики Беларусь [32–43].

В 2006 г. микроволновая технология стерилизации диэлектрических материалов была награждена дипломом и серебряной медалью на VI Московском международном салоне инноваций и инвестиций.

4. Технология предпосевной биофизической обработки семян льна

Разработанная микроволновая технология предпосевной обработки семян льна – экологически безопасная биотехнология, в основе которой лежит информационное (частотное) воздействие микроволновой энергии малого уровня мощности на биологические объекты.

Это воздействие повышает энергию прорастания и иммунитет растений. Применение данной технологии позволяет уничтожить семенную инфекцию, повысить энергию прорастания семян, усиливает развитие корневой системы, увеличивает фотосинтезирующий аппарат растений, способствует более быстрому развитию растений и более раннему плодоношению.

Применяется при выращивании льна в качестве приема предпосевной активации семенного материала.

Разработка (см. табл. 4) прошла полевые испытания в следующих хозяйствах Республики Беларусь: ОАО «Поставский льнозавод», ОАО «Березинский льнозавод», ОАО «Пуховичлен», Слуцкая льносемястанция, Ляховичская льносемястанция.

Таблица 4

Основные технические характеристики оборудования

Наименование	РКЭС 1
Производительность, т/сутки	1–1,2
Потребляемая мощность, кВтч	1,8
Количество источников эм энергии, шт.	5
Ресурс источника эм энергии, лет	5
Габариты, м (уточняются)	1,5×1,5×3
Вес, кг (уточняется)	1200
Гарантия, мес.	24
Срок службы оборудования не менее, лет.	8



Рис. 12 . РКЭС 1

Степень готовности – оборудование готово к внедрению в массовое производство (см. рис. 12).

5. Полученные результаты

Были проведены полевые исследования влияния микроволновой обработки на рост и развитие льна-долгунца на примере трех сортов (двух среднеспелых «Е-68» и «Нива», и одного позднеспелого «Василек»), в пяти льносеющих хозяйствах Республики Беларусь. Получены следующие результаты.

1. Произошло повышение полевой всхожести за счет активации метаболических процессов у семян льна-долгунца, обработанных перед посевом микроволнами (табл. 5).

Таблица 5

Влияние микроволновой обработки на полевую всхожесть

Вариант опыта	Полевая всхожесть, %			
	«Поставы»	«Березино»	«Пуховичи»	«Слуцк»
3-й режим	76	—	—	—
2-й режим	74	60	83	75
Контроль	66	54	66	72
Протравитель	63	47	65	66

Примечание. «Ляховичи»: протравитель + микроволны – 72 %;
протравитель – 66 %.

2. В процессе вегетации отмечено наличие у варианта с микроволновой обработкой более мощной корневой системы и сокращение сроков прохождения фаз развития за счет лучшего обеспечения пластическими материалами, необходимых для растения.

3. Важным результатом эксперимента можно считать, что на обработанных участках не было отмечено наличия заболеваний.

4. Положительно сказалась микроволновая обработка на росте растений. Произошла активация микроволнами ферментов и уридифосфатглюкозы, которые участвуют в образовании волокон льна, в результате чего в варианте с микроволнами растения были выше, чем в других вариантах (табл. 6).

Таблица 6

Общая высота растений на экспериментальных участках

Вариант опыта	Общая высота растений, см				
	«Поставы»	«Березино»	«Пуховичи»	«Слуцк»	«Ляховичи»
3-й режим	82.8	—	—	—	—
2-й режим	78.0	98.9	90.4	97.8	—
Контроль	73.7	95.8	85.7	94.6	—
Протравитель	71.7	87.1	84.7	80.5	78.8
2-й режим + протравитель	—	—	—	—	90.9

Интенсивный рост всегда коррелирует с большим накоплением сухих веществ. Их накопление непосредственно связано с деятельностью фотосинтетического аппарата растения. Соответственно вариант с микроволнами имеет более высокую фотосинтетическую интенсивность, что отчетливо видно из табл. 7.

Таблица 7

Содержание сухого вещества фаза «елочка» (интенсивный рост)

Вариант опыта	Содержание сухого вещества, %
Режим	47
Протравитель	26
Контроль	20

5. Было установлено, что растения льна-долгунца, семена которых были обработаны перед посевом микроволнами, имели также большую ассимилирующую поверхность по сравнению с другими вариантами опытов и содержали больше хлорофилла. За счет этого увеличился экспорт ассимилянтов из листьев в стебель, что проявилось в более насыщенной окраске и способствовало формированию более сильного и мощного растения.

6. Необходимо отметить такой важный фактор, как сохранность растений к уборке, в этом случае также отмечено положительное влияние микроволновой обработки (табл. 8).

Сохранность растений на момент уборки

Вариант опыта	Количество растений к уборке, шт.				
	«Поставы»	«Березино»	«Пуховичи»	«Слуцк»	«Ляховичи»
3-й режим	1572	—	—	—	—
2-й режим	1568	912	1016	960	—
Контроль	892	856	776	792	—
Протравитель	1024	876	728	888	784
2-й режим + протравитель	—	—	—	—	896

7. Сохранность растений повлияла на продолжительность фотопериода, посе́вы оказались более густыми в тех вариантах опыта, где семена были обработаны микроволнами, и как следствие, растения более тонкие и вытянутые, а из длинных стеблей в процессе первичной обработки получают, как правило, длинное волокно. Все эти факторы помогают решить главную задачу льноводов, которая состоит в том, чтобы вырастить высокий, в меру тонкий и выровненный стеблестой.

8. Итогом всего растениеводческого производства является урожай и его качество.

а) Значительные результаты получены по урожайности семян на участках, обработанных микроволнами. В варианте с микроволнами прибавка по отношению к контролю на различных участках составила от 7 до 26 %, а по отношению к традиционной обработке протравителем от 13 до 44 % (табл. 9).

Таблица 9

Урожайность семян льна-долгунца, полученная при проведении полевых экспериментов

Вариант опыта	Урожайность семян, ц/га				
	«Поставы»	«Березино»	«Пуховичи»	«Слуцк»	«Ляховичи»
3-й режим	7.3	—	—	—	—
2-й режим	8.3	10.4	10.0	12.0	—
Контроль	6.4	7.7	7.8	11.2	—
Протравитель	5.6	5.8	5.8	7.9	4.6
2-й режим + протравитель	—	—	—	—	5.3

б) Влияние микроволн на качество урожая выражалось в качественном воздействии на ультраструктуру волокон, которое заключалось в увеличении наличия полисахаридов клеточной стенки и за счет этого увеличилось число лубяных пучков на отдельных экспериментальных участках (табл. 10).

Таблица 10

Выход луба

Вариант опыта	Выход луба, %				
	«Поставы»	«Березино»	«Пуховичи»	«Слуцк»	«Ляховичи»
3-й режим	31	—	—	—	—
2-й режим	29	32	19	27	—
Контроль	28	34	12	28	—
Протравитель	30	31	15	26	28
2-й режим + протравитель	—	—	—	—	25

Номер льнотресты определяется в лабораториях льнозаводов по общепринятой методике. Результаты исследований приведены в табл. 11.

Таблица 11

Результаты определения номера льнотресты

Вариант опыта	Номер льнотресты				
	«Поставы»	«Березино»	«Пуховичи»	«Слуцк»	«Ляховичи»
3-й режим	0.50	—	—	—	—
2-й режим	0.50	1.25	1.0	1.50	—
Контроль	0.50	1.25	0.50	0.50	—
Протравитель	0.50	1.25	0.75	0.75	0.75
2-й режим + протравитель	—	—	—	—	1.00

Полученные данные дают основание сделать вывод, что необходимо постепенно отходить от традиционной и экологически небезопасной предпосевной обработки с использованием протравителя и широко применять обработку микроволнами, дающую положительные результаты по различным аспектам.

6. Оборудование для стерилизации почвенных субстратов с помощью электромагнитной энергии

Назначение: обеззараживание грунтов электромагнитным полем сверхвысокой частоты (СВЧ) (см. рис. 13).

Рекомендуемая область применения: стерилизация грунтов (уничтожение вредных насекомых, бактериальных и грибных патогенов, семян сорняков).

Преимущества перед известными аналогами: более высокий бактерицидный эффект, экологическая чистота, энергосбережение, отказ от пропаривания и применения хлорсодержащих препаратов.



Рис. 13. Оборудование для стерилизации почвенных субстратов полем сверхвысокой частоты

Результаты испытаний: результаты испытаний приведены в таблицах «Показатели эффективности микроволновой стерилизации».

Технико-экономический эффект: сравнение различных способов обработки грунтов показывает, что наименьшие удельные затраты энергии имеют место при СВЧ-обработке – $< 20 \text{ кВт ч/м}^3$, при обработке электрическим током $> 40 \text{ кВт ч/м}^3$, при обработке паром $> 70 \text{ кВт ч/м}^3$. Чем выше начальная влажность грунта, тем больше это преимущество.

Сведения об изобретении: установка обладает патентоспособностью (возможность патентования на территории России и других стран).

Обоснование применения электромагнитной энергии СВЧ:

Болезни растений могут быть вызваны вредными насекомыми, различными бактериями, вирусами и грибами, которые содержит почва. Грибы и бактерии вызывают гнилостные заболевания, а вирусы – мозаичный рисунок на листьях. Стерилизация почвы помогает избавиться от большей части почвообитающих организмов.

Основные болезни растений, которые могут вызываться патогенами, содержащимися в грунте:

Бурая пятнистость листьев, кладоспориоз. Возбудитель заболевания – гриб *Cladosporium fulvum* Cooke. Заболевание относится к числу распространенных и вредоносных в защищенном грунте. Кладоспориоз встречается в основном на листьях, но при эпифитотийном проявлении болезни признаки ее можно обнаружить на черешках, плодоножках, завязи. Первые признаки поражения проявляются на нижней стороне нижних листьев в виде светло-зеленых, а затем темно-бурых пятен с одинаковым налетом гриба. Позже на верхней стороне листьев образуются светло-зеленые, впоследствии желтеющие, буряющие пятна округлой или неправильной формы. Источниками первичной инфекции являют-

ся зараженные растительные остатки, а также споры гриба в почве, на оконных стеклах и поверхности культивационных сооружений. Семенами гриб не передается.

Стеблевая гниль. Это заболевание впервые было отмечено в 1990 г. Возбудитель – гриб *Didymilla lycopersici*. Болезнь проявляется в виде увядания, очень вредоносна. В нижней части стебля образуются бурые и черные пятна с мелкими пикнидами. На листьях иногда видны некротические пятна, окруженные желтым ободком. Темные углубляющиеся пятна появляются на плодах. Паразит зимует на пораженных и отмирающих остатках растений в виде аскоспор в почве, которые являются источником первичной инфекции.

Серая гниль. Возбудитель – гриб *Botrytis cinerea* Pers. Заболевание сильно поражает плоды и междоузлия стебля, особенно в пленочных теплицах, если в это время стоит прохладная, пасмурная погода. На зеленых или созревающих плодах появляются светло-зеленые, сначала мелкие, затем увеличивающиеся пятна, в центре их выделяются бурые точки. На этой стадии пятна выглядят водянистыми, впоследствии ткань загнивает. Зимует возбудитель серой гнили в виде склеротий, в тепличном грунте образует конидии – на внутренней поверхности стекол.

Бактериальный рак. Возбудитель – бактерия *Corynebacterium michiganense* jensen. На черешках и стеблях больных растений появляются бурые полосы при продольном срезе. На плодах пятна мелкие, желтоватые или почти белые с центром. Пораженные плоды часто бывают неправильной формы, мякоть в отдельных местах бурая, плоды опадают.

Аскохитоз. Возбудитель – гриб *Ascochyta melonis* Pot. cucumis Fautr. et Roum. Поражает чаще всего листья и стебли. Листья покрываются крупными округлыми, ярко-желтыми или светлыми хлоротичными пятнами. На стеблях и междоузлиях места поражения становятся сухими, серыми и ткань покрывается множеством черных точек спороношения гриба. Одним из источников инфекции аскохитоза являются зараженные растительные остатки в почве.

Фузариоз. Поражение растений этой болезнью происходит в различные фазы роста и развития, начиная с фазы всходов, иногда даже проростков. Большинство высаженных на постоянное место растений, пораженных корневой гнилью, внешне до цветения почти не отличаются от здоровых. Со времени вступления в фазу плодоношения начинается их увядание. Первый признак заболевания взрослых растений – поникание верхушек в яркие полуденные часы. Главный корень больных растений постепенно буреет или полностью отмирает. Боковые корешки также частично или полностью отмирают. Основным источником заражения огурца фузариозом – почва, куда гриб попадает с растительными остатками. Возбудитель передается семенами.

Белая гниль. Возбудитель – гриб *Sclerotinia cinerea* Pers. Vu. Болезнь может развиваться на всех частях растений – корнях, стеблях, черешках, листьях и плодах. При поражении наземных органов ткань становится мягкой, слегка ослизняется, покрывается плотной грибницей, в которой впоследствии образуются черные склеротии. Растения увядают, листья теряют тургор, засыхают. Возбудитель белой гнили передается по воздуху, а также переносится механически (на руках и инструментах). Заражение происходит почти всегда через ранки.

Мучнистая роса. На листьях образуется белый или сероватый налет, сначала в виде отдельных пятен, а затем вся пораженная поверхность покрывается налетом. Листья буреют и засыхают. Возбудители мучнистой росы зимуют в виде сумчатой стадии на остатках пораженных растений в почве.

7. Основные вредители овощных культур

Обыкновенный паутинный клещ. Это многоядный вредитель, особенно вредоносен для культуры огурца. Самка клеща широкоовальной формы, длиной 0,4–0,5 мм. Самка летних поколений – серовато-зеленого цвета с темными пятнами по бокам, зимующие самки оранжево-красные. Самцы более удлинённые, несколько меньше самок. Взрослые особи имеют четыре пары ног. Яйца мелкие, шаровидной формы, зеленовато-желтые, полупрозрачные. Личинки полушаровидной формы, длиной 0,12–0,13 мм, с тремя парами ног. Самка откладывает яйца вразброс на нижней стороне листа. Одна самка в течение периода жизни (2–3 недели) способна отложить до 150 яиц и более. В течение года паутинный клещ способен давать до 20 поколений. Первым внешним признаком повреждения является появление отдельных светлых пятен. При продолжительном питании вредителя пятна постепенно сливаются, листья желтеют и отмирают. Зимуют оплодотворенные самки в щелях теплиц под комочками почвы, сухими остатками растений, в пчелиных семьях.

Тепличная белокрылка. Относится к семейству Алейродид, отряда Равнокрылых хоботных насекомых. Взрослые насекомые имеют бледно-желтое тело длиной 1,5 мм с двумя парами мучнисто-белых крыльев. Самка несколько крупнее самца. Самка откладывает яйца, прикрепляя их к листу при помощи стебелька (ножки). На опушенных листьях яйца располагаются поодиночке, на гладких – группами, часто в виде кольца. Яйца продолговатой формы, сначала белые, затем приобретают темно-коричневый цвет, почти черный. Продолжительность развития яйца зависит от температуры и колеблется от 4 до 7 дней. Существует 4 личиночные стадии. Продолжительность развития белокрылки составляет 28–30 дней, плодовитость – в среднем 240 яиц. За период вегетации растений в теплице белокрылка развивается в 6–8 поколениях.

Табачный трипс. Широко распространенный вид полифага, чаще всего повреждает огурец. У трипса светло-желтая или коричневая окраска, тонкое удлиненное тело, узкие крылья с бахромой из волосков. Крылья и передние ноги желтоватого цвета. Одна самка вредителя откладывает до 100 яиц в ткани листьев растений, по 3–4 яйца в день. Развитие яйца длится 6–7 дней. Развитие личинок проходит на листьях, нимф – в почве. Развитие трипса от яйца до имаго проходит за 20–25 дней. За вегетационный период вредитель дает 6–8 поколений. В местах укусов от личинок и имаго трипсов на листьях образуются светло-желтые пятна угловатой формы. При сильном повреждении весь лист имеет беловато-желтые крапинки с черными точками – экскрементами трипсов. Листья становятся бурыми и засыхают. Для развития трипса оптимальная температура воздуха – 25–30 °С. В теплицах вредитель сохраняется на проростках сорняков.

Огуречный комарик. Взрослые комарики – мелкие, темно-серые, двукрылые насекомые, реже бескрылые (самки). Голова маленькая, полушаровидная, опущенная вниз. Яйца откладывают в почву или в трещины стебля огурца кучками по 20–80 штук. Яйца белые, овальные, блестящие. Продолжительность фазы яиц 5–10 дней. Развитие личинок длится 8 дней. Личинки беловатые, полупрозрачные, с просвечивающимся темным кишечником и с черной головой. Продолжительность личиночной фазы – 8–12 дней. Окукливаются личинки в почве, длительность фазы куколки – 7–8 дней. Весь цикл развивается при температуре 18–20 °С, длится 24–30 дней, в теплицах комарики могут давать до 8 поколений в год. Вредят личинки комариков, внедряясь в корень. Они проделывают ходы в корнях и разрушают их. Признаки повреждения растений обнаруживаются не сразу. Повреждения заметны в фазу цветения и плодоношения. Растения теряют тургор, увядают и гибнут.

Пасленовая минирующая муха. Минирующая муха в теплице повреждает в основном помидоры, но часто наносит вред рассаде капусты и листьям огурца. Развитие трипса от яйца до имаго проходит за 20–25 дней. За вегетационный период вредитель дает 6–8 поколений. В местах укусов от личинок и имаго трипсов на листьях образуются светло-желтые пятна несколько угловатой формы. При сильном повреждении весь лист имеет беловато-желтые крапинки с черными точками – экскрементами трипсов. Листья становятся бурыми и засыхают. Для развития трипса оптимальная температура воздуха – 25–30 °С. В теплицах вредитель сохраняется на проростках сорняков.

Нематоды. Большую угрозу для огурца и томата представляют нематоды. Чаще встречаемыми видами галловых нематод являются: южная, песчаная и северная.

Южная галловая нематода распространена главным образом в защищенном грунте, опасный паразит огурца и томата. Нематода проникает в растение в точке роста корня. Поселяется в тканях корней, где, выделяя токсические вещества, вызывает образование галлообразных вздутий. Внутри галлов, где были отложены яйца, происходит развитие личинок. Личинки живут во вздутии корней или выходят в почву и переходят на другие растения. Растение, поврежденное галловой нематодой, отстает в росте и значительно снижает урожай. Галлообразование на корнях затрудняет водоснабжение и нарушает нормальное питание растений, поэтому вред от нематод особенно велик в жаркую погоду. На одном растении может быть до несколько сот галлов. Галлы бывают величиной от булавочной головки до 3–5 мм в диаметре. Галловая нематода теплолюбива. Развивается при температуре 25 °С в течение 21 дня, а при 17 °С – 40 дней. Для уничтожения в тепличном грунте вредных насекомых, микроорганизмов и семян сорняков применяют обычно обработки ядохимикатами или паром. Главный недостаток химического способа – в опасности накопления в грунте ядовитых веществ, термического – в большой трудоемкости (например, при «шатровом» способе обработки паром требуется 10 чел.-дн. на каждую тыс. кв. м). Сложность борьбы с вредоносными и распространенными вредителями и болезнями овощных культур заключается в видовом многообразии вредителей, исключительно высоких темпах размножения, высокой плодовитости. Многие

вредители, закончив питание (особенно трипсы) переселяются в почву, где превращаются в прониимфу и нимфу.

Разработанная нами технология основывается на стерилизующем эффекте СВЧ электромагнитных колебаний. Эффект заключается в избирательном нагреве патогенных микроорганизмов, являющихся влажными диэлектриками. Возбудители болезней при СВЧ воздействии погибают вследствие высокой скорости нарастания их температуры. За 1 секунду температура микроорганизма повышается на 5–7 градусов (при этом нагрев идет внутри организма). Регулируя время воздействия и интенсивность электромагнитного излучения, получили полную стерилизацию почвы или почвенных субстратов.

Основные технические характеристики оборудования для стерилизации грунта

1. Производительность, т/сут.....1–2
2. Потребляемая мощность, кВтч.....8–9
3. Количество микроволновых модулей, шт.....6
4. Рабочая частота источника э/м энергии, МГц.....2450 ± 100
5. Вес, кг.....1800

Результаты производственных испытаний оборудования для микроволновой стерилизации грунта (см. рис. 13) – положительные. Процент ингибирования возбудителей болезней растений составил 100 %. Жизнеспособных галловых нематод в различных стадиях развития после обработки почвы не обнаружено. Это дает основание утверждать о высокой эффективности метода микроволновой стерилизации почвы (см. табл. 12 – 17).

Показатели эффективности микроволновой стерилизации

Таблица 12

Возбудители	Интенсивность спороношения до обработки, %	Интенсивность спороношения после обработки, %	Ингибирование возбудителей, %
<i>Fusarium oxysporum</i> (корневая гниль)	92.8	0	100 %
<i>Botritis cinera</i> (серая гниль)	94.9	0	100 %
<i>Sclerotinia sclerotinian</i> (белая гниль)	85.4	0	100 %
<i>Corinebacterium michiganeuse</i> (бактериальный рак)	76.3	2.1	97.1 %

Таблица 13

Стадии развития	Количество жизнеспособных нематод в 0.1 мл почвенной вытяжки до обработки	Количество жизнеспособных нематод в 0.1 мл почвенной вытяжки после обработки
Личинка	6.2	0
Самки	7.0	0
Самцы	7.2	0

Таблица 14

Возбудители до обработки	Возбудители после обработки
Споры <i>Ascohyta cucumeris</i> – 17–18 шт.	Обрывки мицелия
Споры сапрофитных грибов – массовое количество	Обрывки мицелия
Споры <i>Colletotrichum</i> – массовое количество	Обрывки мицелия
Споры <i>Botritis cenerea</i> – массовое количество	Обрывки мицелия

Таблица 15

Возбудители	Наличие жизнеспособных колоний патогена
<i>Colletotrichum</i>	0
<i>Aspergillus</i> , <i>Ascochita</i> , <i>Penicillium</i>	0
<i>Mucor</i>	единичные
<i>Fusarium</i>	0

Таблица 16

Возбудитель	Наличие колоний после облучения живых	Наличие колоний после облучения погибших	Ингибирование возбудителей, %
<i>Ascochita</i>	0	10	100
<i>Colletotrichum</i>	0	20	100
<i>Fusarium</i>	0	0	–
<i>Botritys</i>	0	16	100
<i>Aspergillus</i>	0	22	100
<i>Mucor</i>	0	40	100



Рис. 14. Оборудование для микроволновой стерилизации пищевых добавок

8. Оборудование для микроволновой стерилизации пищевых добавок

Оборудование предназначено для высокоэффективной энергосберегающей технологии стерилизации продуктов, а также материалов для различных отраслей промышленности и сельского хозяйства на конвейере, в основе которой лежит высокое поглощение микроволновой энергии диэлектрическими материалами и отсутствие промежуточных носителей. На рис. 14 приведена фотография оборудования для стерилизации пищевых добавок из шрота расторопши «Здравушка».

Таблица 17

Результаты исследования режимов микроволновой стерилизации препаратов расторопши «Здравушка» по микробиологическим показателям

Показатели	Нормативы	Режимы стерилизации					
		1	2	3	4	5	К
1.КМАФАн М/ког/г/	Не более 1×10^4	2.8×10^2	1.3×10^2	6×10^2	3.2×10^2	Избыточная мощность.	8×10^5
2. БГКП	Не доп. в 0.1 г	Не обн.	Не обн.	Не обн.	Не обн.		Не обн.
3. E. coli	Не доп. в 1 г	Не обн.	Не обн.	Не обн.	Не обн.		Не обн.
4. St. aureus	Не более 200	Не обн.	Не обн.	Не обн.	Не обн.		Не обн.
5. B. cereus	Не доп. в 10 г	Не обн.	Не обн.	Не обн.	Не обн.		Не обн.
6. Патогенные в т. ч. сальмонелла	Не более 100	Не обн.	Не обн.	Не обн.	Не обн.		Не обн.
7. Дрожжи /ког/г/	Не более 100	1.2×10^4	Не обн.	Не обн.	Не обн.		6×10^4
8. Плесени /ког/г/			Не обн.	Не обн.	Не обн.		

Технические характеристики оборудования

1. Оборудование выполняет микроволновую стерилизацию препаратов расторопши «Здравушка» в виде шрота, таблеток и капсул.
2. Производительность.....1–2 т/сутки.
3. Рабочая частота источника эм энергии, МГц.... 2450 ± 100 .
4. Питание оборудования – трехфазная сеть переменного тока напряжением 380 В, частотой 50 Гц.
5. Потребляемая мощность.....8 кВтч.
6. Габариты..... $4 \times 2.5 \times 1.5$ м.
7. Вес.....1300 кг.
8. Загрузка/выгрузка препаратов, фасованных в любую (не металлическую тару)ручная.
9. Гарантия.....12 мес.
10. Срок службы оборудования.....8 лет.

Оборудование должно располагаться в помещении, защищенном от попадания атмосферных осадков, предназначено для эксплуатации в условиях умеренного климата исполнения УЗ.1 по ГОСТ 15150-69.

9. Заключение

Предложены новые принципы широкополосного согласования высокодобротных резонансных систем с одномодовыми волноводами при помощи плавных волноводных переходов, обеспечивающих $KCB < 1.88$ и нагруженную добротность > 40000 волноводами в диапазоне частот 53–178 ГГц.

Проведено теоретическое и экспериментальное исследование новых принципов широкополосного согласования высокодобротных широкодиапазонных резонаторов с одномодовыми волноводами при помощи плоских щелевых решеток.

В результате спроектированы новые устройства связи, которые обеспечили $KCB < 1.6$ во всем диапазоне перестройки резонатора.

Данные устройства связи альтернативны бездиафрагменным устройствам связи, т. к. в миллиметровом диапазоне частот сужающиеся волноводы обычно изготавливают методом гальванического наращивания, что требует изготовления сверхточных оправок и является дорогостоящим технологическим процессом. Новые решетчатые устройства связи выполнены средствами микроэлектроники в виде интегральной схемы, что обусловило их высокую надежность и повторяемость результатов. Существенно, что они не требуют подгонки величины связи как в процессе производства, так и в процессе эксплуатации резонатора (при его частотной перестройке).

Особо следует отметить, что применение новых устройств связи в резонаторах практически не ухудшило нагруженную добротность резонатора.

Разработано стендовое оборудование и методики измерения электродинамических параметров нанокompозитных материалов.

Выполнен анализ электромагнитных задач для составных материалов. Разработана электродинамическая модель теплового взаимодействия СВЧ энергии с различными диэлектрическими материалами. Разработана математическая модель электродинамических и энергетических процессов функционирования микроволнового теплового модуля с рупорной конструкцией возбуждения и учетом диэлектрической нагрузки.

Сформулирована математическая постановка задачи для самосогласованной системы уравнений Максвелла и уравнения теплопроводности, связанных через комплексную диэлектрическую проницаемость нагреваемого материала.

Получены распределения возбуждаемых электромагнитных полей в объеме камеры и в диэлектрическом заполнении, а также характерные зависимости от σ и ϵ_r коэффициента поглощения диэлектриком, которые подаются в СВЧ-камеру через рупор.

Расположение открытых технологических окон конвейерной камеры СВЧ-нагрева выбраны таким образом, чтобы обеспечить защиту от паразитного излучения. Во всех разработанных образцах технологического оборудования для сушки и стерилизации различных диэлектрических материалов обеспечена равномерность нагрева.

Модульный принцип построения технологического оборудования позволил выполнять различные хозяйственные проекты по стерилизации, нагреву и сушке диэлектрических материалов в кратчайшие сроки.

Разработано высокоэффективное оборудование для микроволновой стерилизации почвы, сушки и стерилизации пищевых и биологически активных добавок. Разработано промышленное оборудование для биофизической микроволновой предпосевной обработки семян льна.

Литература

1. *Faby G., Schiinemann K.* // IEEE Trans. on MTT. 1997. Vol. 45. P. 2043.
2. *Matsui T., Akari K., Kijokawa M.* // IEEE Trans. on microwave theory and techniques. 2000. Vol. 48. P. 1043.
3. Булгаков Б. М., Гламаздин В. В., Натаров М. П., Скресанов В. Н. // РЭ. 1998. Т. 3. С. 46.
4. Леонов Ю. И., Фурсов А. М. // Радиотехника. 1986. Вып. 59. С. 22.
5. Балаклицкий И. М., Ревин И. Д. и др. // Изв. вузов. Радиофизика. 1983. Т. 26. С. 235.
6. *Kuraev A. A., Natarov M. P., Rodionova V. N.* et al. // Int. J. Electronics. 1991. Vol. 70. P. 1005.
7. Родионова В. Н., Слепян Г. Я. // РЭ. 1989. Т. 34. С. 1357.
8. *Rodionova V. N., Slepyan A. Ya., Slepyan G. Ya.* // Electronics Letters. 1991. Vol. 27. P. 1427.
9. Кисунько Г. В. Электроника помех систем. 1949.
10. Вайнштейн Л. А. Теория дифракции и факторизации. 1966.
11. Родионова В. Н., Слепян Г. Я. // РЭ. 1986. Т. 31. С. 1915.
12. Конторович М. И., Астрахан М. И. и др. Электродинамика сетчатых структур. 1987.
13. Нефедов Е. И., Сивов А. Н. Электродинамика периодических структур. 1977.
14. Альтман Д. Устройства сверхвысоких частот. 1969.
15. *Ilyinsky A. S., Kuraev A. A.* et al. // Proc. of the URSI Int. Symposium of electromagnetic theory. Stockholm. 1989. P. 64.
16. Родионова В. Н., Слепян Г. Я. // ЖТФ. 1989. Т. 59. С. 7.
17. *Ilyinsky A. S., Slepyan G. Ya., Slepyan A. Ya.* Propagation, scattering and dissipation of electromagnetic waves. 1993.
18. Шестопалов В. П., Кириленко А. А., Масалов С. А. Матричные уравнения типа свертки в теории дифракции. 1984.
19. Свешников А. Г., Ильинский А. С. // Вычисл. математика и мат. физика. 1968. Т. 8. С. 363.
20. Велиев Э. В., Веремей В. В., Шестопалов В. П. // РЭ. 1988. Т. 33. С. 478.
21. Левин М. Л. // Техническая физика. 1948. Т. 18. С. 653.
22. *Lyarin V. P., Michalevsky V. S., Sinyavsky G. P.* // IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques. 1982. Vol. 30. P. 1107.
23. Альтман Д. Устройства сверхвысоких частот. 1969.
24. *Altman Dj.* Microwave devices. 1970.
25. *Ilinsky A. S., Slepyan G. Ya., Slepyan A. Ya.* Propagation, scattering and dissipation of electromagnetic waves. 1993.
26. *Karpovich V. A., Rodionova V. N., Slepyan G. Ya.* // Electromagnetics. № 11, 2004.
27. Раков Э. Г., Блинов С. Н. и др. // Ж. прикл. химии, 2004. Т. 77. С. 193.
28. Раков Э. Г., Гришин Д. А. и др. // Ж. физ. химии. 2004. Т. 78. № 12. С. 2204.
29. Золотухин И. В., Голев И. М. и др. // Письма в ЖТФ. 2005. Т. 31. С. 54.
30. Карпович В. А., Родионова В. Н., Притула И. В. Патент РБ №5107 от 30.03.99, F 26B 3/347. Микроволновое устройство. Выд. 23.12.2002.
31. Карпович В. А., Родионова В. Н., Притула И. В. Патент РБ №5274 от 30.03.1999, F 26B 3/347. Устройство для СВЧ нагрева. Выд. 03.03.2003.
32. *Rodionova V. N., Karpovich V. A., Slepyan G. Ya.* // The Fourth Int. Kharkov Symposium "Physics and engineering of millimeter and sub-millimeter waves". 2001. P. 909.

33. *Karpovich V. A., Rodionova V. N., Slepyan G. Ya.* // Telecommunications and Radio Engineering. 2002. Vol. 57(2–3). P. 168.
34. *Rodionova V., Karpovich V.* et al. // V Inter. Symposium on physics and engineering of microwave, millimetre and submillimeter waves. Kharkov. 2004. P. 601.
35. *Ермолович А. А., Карпович В. А.* и др. // Миллиметровые волны в биологии и медицине. 2004. №1. С. 68.
36. *Ермолович А. А., Карпович В. А.* и др. // Гавриш. 2004. № 3. С. 36.
37. *Карпович В. А., Ермолович А. А.* и др. // Агропанорама. 2004. № 4. С.17.
38. *Vas'ko P., Ermolovich A.* et al. // V Inter. Symposium on physics and engineering of microwave, millimetre and submillimeter waves. Kharkov. 2004. P. 832.
39. *Ermolovich A., Karpovich V.* et al. // V Inter. Symposium on physics and engineering of microwave, millimetre and submillimeter waves. Kharkov. 2004. P. 874.
40. *Карпович В., Ермолович А.* // Радиомир. 2004. № 9. С. 21.
41. *Карпович В., Сидоров Е.* // Радиомир. 2004. № 11. С. 19.
42. *Karpovich V. A.* // Доклад на днях науки Республики Беларусь, Китай, Чанг-Чунь, июнь 2005 г.
43. *Карпович В. А., Ермолович А. А.* // 2 Международная конференция «Состояние и проблемы научного обеспечения овощеводства защищенного грунта». 2005. Москва.
44. *Карпович В. А., Родионова В. Н.* Патент РБ № 5580. Способ предпосевной обработки семян овощных или зерновых культур. Выд. 23.06.2003.

ELECTRODYNAMICS OF SPECIAL HIGH-QUALITY RESONANCE SYSTEMS AND MICROWAVE TECHNOLOGIES

**V. A. Karpovich, G. Ya. Slepyan, V. N. Rodionova, G. I. Volinets,
A. A. Savuk, O. V. Tanana, I. A. Grinchuk**

Resonance systems are widely spread in modern radiotechniques for frequent filtration of electromagnetic oscillations, realization of feedback by its strengthening and generation. Resonance effect and resonance systems are widely spread when measuring material environment's characteristics, for creation of different industrial plants and equipment, which is based on principle of savings electromagnetic energy in resonance volume.

The most relevant problems, arising during theoretical and practical investigating principles of creation of resonance systems in VHF-range are the development of calculation methods of broadband elements of connection of resonance systems with single-mode waveguides and technical supplement of received results for development of plants for measuring of electrodynamics characteristics of composite materials in VHF-range and also high-quality equipment for microwave heating, sterilization, drying of different dielectric materials.

ВЛИЯНИЕ РАДИАЦИОННЫХ ПОТЕРЬ НА ПРОЦЕСС ИЗЛУЧЕНИЯ В СИСТЕМЕ «ВЗРЫВОМАГНИТНЫЙ ГЕНЕРАТОР – ЕМКОСТНАЯ НАГРУЗКА»

В. Г. Барышевский, А. А. Гуринович

Включение взрывомагнитного генератора (ВМГ) в цепь с емкостной нагрузкой вызывает осцилляции в этой цепи, а значит и радиочастотное излучение [3, 4]. Согласно [3], излучение испускается витками индуктора ВМГ, который описывается как спиральная антенна. В настоящем сообщении показано, что емкостная нагрузка также является источником радиационных потерь. Получены уравнения, описывающие процессы в цепи «взрывомагнитный генератор – емкостная нагрузка» с учетом силы радиационного трения [8]. Эта сила сопровождает процесс излучения благодаря появлению зависящей от времени ЭДС в указанной цепи. Показано, что сила радиационного трения существенно влияет на временные характеристики и мощность радиочастотного излучения в такой цепи.

1. Введение

Взрывомагнитные генераторы (ВМГ) широко используются для получения сверхсильных магнитных полей [1, 2]. ВМГ с емкостной нагрузкой (ВМГЕ) также исследовался в качестве возможного источника радиочастотного излучения. В частности, нагрузка ВМГ малой емкостью (100–1000 пФ) была рассмотрена в работе [3]. Согласно [3], индуктор ВМГ выступает в роли спиральной антенны и служит источником радиационных потерь.

В настоящем сообщении показано, в цепи «взрывомагнитный генератор – емкостная нагрузка» радиационные потери, вызванные присутствием емкостной нагрузки, могут существенно влиять на процессы в цепи и должны учитываться при описании.

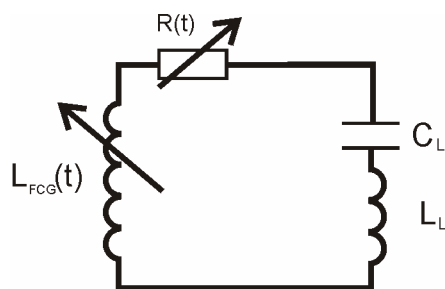


Рис. 1. Эквивалентная схема цепи «взрывомагнитный генератор – емкостная нагрузка»

2. Излучение осциллятора

Эквивалентная схема цепи «взрывомагнитный генератор – емкостная нагрузка» показана на рис. 1, где L_L и C_L – индуктивность и емкость нагрузки, $L_{FCG}(t)$ – индуктивность ВМГ, а $R(t)$ – полное сопротивление цепи, включающее сопротивление ВМГ и все типы потерь.

Такая цепь описывается уравнением

$$\frac{d}{dt}[L(t)J(t)] + R(t)J(t) + \frac{Q(t)}{C_L} = 0, \quad (1)$$

где $L(t) = L_{FCG}(t) + L_L$ – полная индуктивность цепи, $J(t) = \frac{dQ(t)}{dt}$ – ток в цепи, $Q(t)$ – заряд, $R(t)$ – сопротивление ВМГ и все типы потерь. Согласно [3], потери в ВМГ могут рассматриваться как сумма диффузионных потерь, включающая диффузию сжатого магнитного поля в провода и изоляцию, диссипацию энергии из сжимаемого объема, обусловленную излучением от индуктора ВМГ. Для описания всех типов потерь авторы [3] ввели параметр

$$\beta(\tau) = \frac{R(\tau)}{L(\tau)}\tau_L = \nu + \varepsilon e^{S\tau}, \quad (2)$$

где τ_L – типичное время изменения индуктивности ВМГ, $\tau = t/\tau_L$, $R(\tau)$ сопротивление потерь, описывает диффузионные потери ν , а член $\varepsilon e^{S\tau}$ – диссипативные потери ($\varepsilon = const$, $S = const$).

Уравнение (1) можно представить в виде

$$\frac{d^2 Q(t)}{dt^2} + \frac{1}{L(t)} \left(\frac{dL(t)}{dt} + R(t) \right) \frac{dQ(t)}{dt} + \frac{1}{C_L L(t)} Q(t) = 0 \quad (3)$$

то есть

$$\frac{d^2 Q(t)}{dt^2} + \frac{R_{eff}(t)}{L(t)} \frac{dQ(t)}{dt} + \omega^2(t) Q(t) = 0. \quad (4)$$

Поэтому ВМГЭ эквивалентен осциллятору с частотой $\omega(t) = \frac{1}{\sqrt{C_L L(t)}}$ и эффективным сопротивлением

$$R_{eff}(t) = \frac{dL(t)}{dt} + R(t).$$

Хорошо известно, что меняющиеся во времени заряды и токи являются источником электромагнитного излучения. Сопровождающая процесс излучения сила радиационного трения [8] появляется благодаря возникновению в цепи зависящей от времени электродвижущей силы. Эта сила вызывает затухание колебаний.

Для описания влияния силы радиационного трения на излучение системы, когда типичная длина волны излучения меньше или сравнима с размерами сис-

темы, нужно использовать самосогласованную систему уравнений Максвелла и уравнений движения заряда. Однако для описания излучения системы с длиной волны больше, чем размеры системы, следует использовать мультипольное разложение излучения [8, 5]. Поэтому длинноволновое излучение системы можно описать суммой электрического дипольного, магнитного дипольного и электрического квадрупольного излучения [8, 5].

Характерные значения емкости в этом эксперименте $C_L = 10^{-8} - 10^{-10}$ Ф. Индуктивность изменяется от $L_0 = 10^{-5} - 10^{-3}$ Гн в начальный момент времени до $L_{fin} = 10^{-7}$ Гн [3]. Поэтому характерные длины волн излучения $\lambda = 2\pi c \sqrt{LC_L} = 60 - 6000$ м многократно превосходят размеры системы и радиационные потери следует описывать на основе мультипольного разложения. Итак, рассмотрим дипольное электрическое излучение, источником которого является емкость, и дипольное магнитное излучение, источником которого является индуктор ВМГ.

3. Потери на излучение за счет дипольного электрического излучения

Рассмотрим, как дипольное электрическое излучение, источником которого в основном является конденсатор, влияет на работу ВМГЕ. Согласно [5], мощность излучения электрического диполя определяется выражением

$$P_d = \frac{\mu_0}{6\pi c} \left(\frac{d^2}{dt^2} d(t) \right)^2, \quad (5)$$

где c – скорость света, $d(t)$ – электрический дипольный момент, $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ Гн/м. Излучение электромагнитных волн диполем приводит к появлению самодействия электрического поля электрического диполя [5]

$$E_d = \frac{\mu_0}{6\pi c} \frac{d^3}{dt^3} d(t), \quad (6)$$

поэтому благодаря этому самодействию появляется дополнительная электродвижущая сила:

$$U_d = E_d d_d = \frac{\mu_0 d_d^2}{6\pi c} \frac{d^2 J(t)}{dt^2} = \frac{20 d_d^2}{c^2} \frac{d^2 J(t)}{dt^2}, \quad (7)$$

где d_d – длина диполя и использовано выражение $c \cdot \mu_0 = 120\pi$ Гн/с.

4. Потери на излучение за счет дипольного магнитного излучения

Рассмотрим влияние дипольного магнитного излучения от индуктора ВМГ на поведение осциллятора. Мощность излучения магнитного диполя можно записать [5]:

$$P_m = \frac{\mu_0}{6\pi c^3} \left(\frac{d^2}{dt^2} m(t) \right)^2, \quad (8)$$

где $m(t)$ – дипольный магнитный момент.

Это магнитное излучение индуцирует ЭДС в круговом витке [6]:

$$U_{m1} = \frac{\mu_0}{6\pi c^3} \pi^2 \rho_0^4 \frac{d^4 J(t)}{dt^4} = \frac{\mu_0}{6\pi c^3} S^2 \frac{d^4 J(t)}{dt^4}, \quad (9)$$

где ρ_0 – радиус витка, а S – его площадь. Для индуктора ВМГ, содержащего N последовательно соединенных витков ЭДС может быть записана в виде

$$U_{mN} = \frac{\mu_0}{6\pi c^3} (NS)^2 \frac{d^4 J(t)}{dt^4} = \frac{20}{c^4} (NS)^2 \frac{d^4 J(t)}{dt^4}. \quad (10)$$

Здесь следует учесть, что число витков в индукторе зависит от времени $N = N(t)$.

5. Излучение осциллятора с учетом потерь

Итак, падение напряжения в цепи ВМГЕ складывается из нескольких слагаемых: падение напряжения, вызванное изменением тока $L(t) \frac{dJ(t)}{dt}$, падение напряжения на емкости $\frac{Q(t)}{C_L}$ и обусловленное изменением индуктивности $J(t) \frac{dL(t)}{dt}$, падение напряжения, вызванное диффузионными потерями $R_{dif} J(t)$, а также потерями на дипольное электрическое U_d (7) и магнитное U_{mN} (10) излучения.

В результате уравнение, описывающее осциллятор с учетом затухания, обусловленного потерями на дипольное электрическое и магнитное излучение, можно записать в виде

$$\begin{aligned} & \frac{20N^2 S^2}{c^4 L(t)} \frac{d^5 Q(t)}{dt^5} + \frac{20d_d^2}{c^2 L(t)} \frac{d^3 Q(t)}{dt^3} + \frac{d^2 Q(t)}{dt^2} + \\ & + \frac{1}{L(t)} \left(\frac{dL(t)}{dt} + R_{dif}(t) \right) \frac{dQ(t)}{dt} + \omega^2(t) Q(t) = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Это уравнение содержит производные старше второго порядка. Однако можно показать, что в рассматриваемом случае, когда период колебаний $T = \frac{2\pi}{\omega}$ много меньше характерного времени изменения индуктивности $L(t)$, эти производные можно заменить следующими выражениями:

$$\frac{d^5 Q(t)}{dt^5} = \omega^4(t) \frac{dQ(t)}{dt} \quad \text{и} \quad \frac{d^3 Q(t)}{dt^3} = \omega^2(t) \frac{dQ(t)}{dt}$$

В результате уравнение (11) принимает вид

$$\frac{d^2 Q(t)}{dt^2} + \frac{1}{L(t)} \left(\frac{dL(t)}{dt} + R_{dif}(t) + R_d(t) + R_m(t) \right) \frac{dQ(t)}{dt} + \omega^2(t) Q(t) = 0, \quad (12)$$

$$\text{где } R_d(t) = \frac{20N^2(t)S^2\omega^4(t)}{c^4 L(t)}, \quad R_m(t) = \frac{20d_d^2(t)\omega^2(t)}{c^2 L(t)}, \quad \omega^2(t) = \frac{1}{L(t)C_L}.$$

Следовательно, чтобы описать токи и напряжения в цепи «взрывомагнитный генератор – емкостная нагрузка», мы должны использовать уравнение для

осциллятора с импедансом в виде, хорошо известном в теории антенн [7], но с зависящими от времени $\omega(t)$, $L(t)$ и $N(t)$.

Эти рассуждения проиллюстрированы на рисунках 2–5. Все кривые получены при следующих параметрах цепи: $L_{FCG}(t=0) = 8 \cdot 10^{-5}$ Гн, $L_{FCG}(t=\tau) = 10^{-7}$ Гн, $\tau = 35$ мкс, $R_{FCG}(t=0) = 0.5$ Ом, $R_{FCG}(t=\tau) = 5 \cdot 10^{-4}$ Ом, $C_L = 10^{-11}$ Ф, $L_L = 2 \cdot 10^{-9}$ Гн.

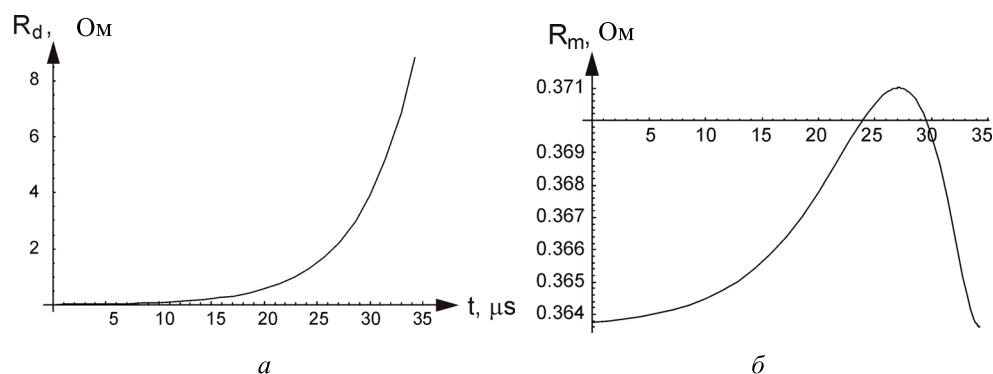


Рис. 2. Сопротивление, описывающее радиационные потери за счет дипольного электрического излучения (а) и дипольного магнитного излучения от индуктора ВМГ (б)

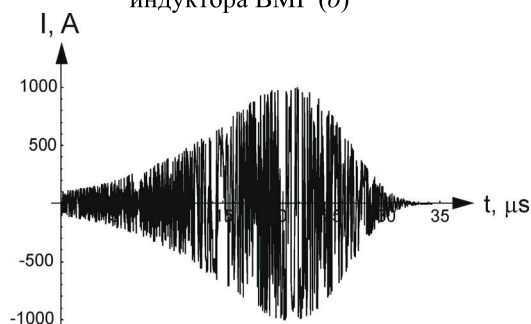


Рис. 3. Ток в цепи ВМГЕ без учета радиационных потерь за счет дипольного электрического излучения, но с учетом магнитных потерь

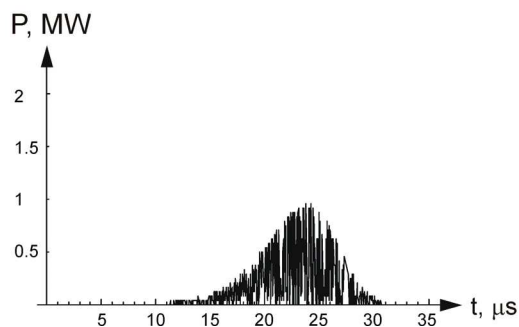


Рис. 4. Мощность излучения ВМГЕ без учета радиационных потерь за счет дипольного электрического излучения, но с учетом магнитных потерь

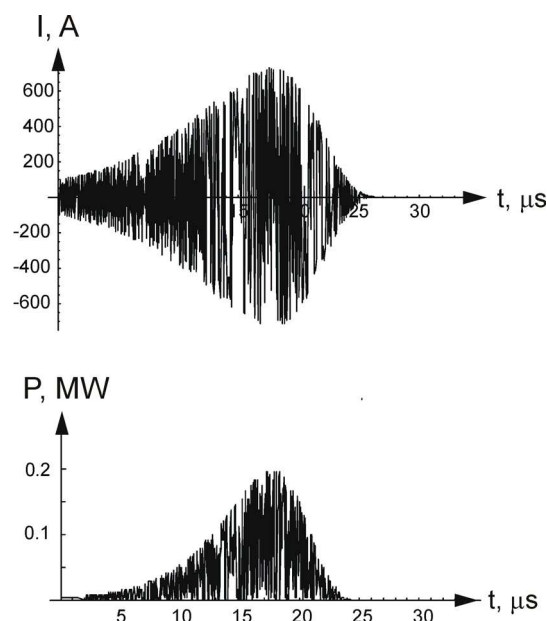


Рис. 5. Ток и мощность излучения с учетом электрических и магнитных потерь

Литература

1. Сахаров А. Д. // УФН. 1966. Т. 88. С. 725.
2. Proc. of Megagauss VII Magnetic Field Generation and Pulsed Power Applications. 1996.
3. Прищепенко А. Б., Щелкачев М. В. // Электричество. 1993. Т. 8. С. 31.
4. Kekez M. M. // Proc. Megagauss-10. 2004. P. 135.
5. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Классическая теория поля. 1962.
6. Афанасьев Ю. В., Климов В. В. и др. // Письма в ЖЭТФ. 1992. Т. 101. С. 1118.
7. Schelkunoff S. A., Friis H. T. Antennas: Theory and practice. 1952.
8. Jackson J. D. Classical Electrodynamics, 2nd edition. 1975.

INFLUENCE OF RADIATIVE LOSSES ON THE OSCILLATION PROCESSES IN THE CIRCUIT "FLUX COMPRESSION GENERATOR – CAPACITIVE LOAD"

V. G. Baryshevsky, A. A. Gurinovich

Flux compression generator (FCG) acting on a capacitive load induces oscillations in the circuit "FCG – capacitive load" that causes radio frequency radiation [3, 4]. It is emitted from the loops of FCG coil that can be considered as a helical antenna [3]. In the present paper the capacitive load is shown to be the source of the radiative losses, too. The equations describing operation of the "FCG – capacitive load" circuit in time are obtained considering radiative reaction force [8]. This force accompanies radiation process due to appearing of the time-dependent electromotive force in the above circuit. It is demonstrated that radiative reaction force significantly influences on temporary evolution and power of the RF signal from such a circuit.

ОДНОМЕРНАЯ И ДВУМЕРНАЯ МОДЕЛИ СПИРАЛЬНОГО МАГНИТОКУМУЛЯТИВНОГО ГЕНЕРАТОРА: ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ И СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

С. Н. Сытова, В. В. Тихомиров, С. Л. Черкас

1. Введение

Магнитокумулятивный генератор, использующий химическую энергию взрывчатого вещества для движения проводящей оболочки в магнитном поле и сжатия магнитного потока, остается единственным компактным одноразовым источником, способным генерировать большие токи [1]. История исследования различных типов МКГ насчитывает свыше пятидесяти лет. Область применения МКГ довольно обширна: геофизика, испытание молниезащитного оборудования, источники питания для генераторов широкополосного излучения и т. д.

Для успешного конструирования МКГ с заданными параметрами требуется предварительное компьютерное моделирование. В работе [2] приведены простые формулы для индуктивности и сопротивления многокаскадного МКГ, позволяющие создавать так называемые «одномерные» компьютерные коды [3]. Следует также отметить и «нуль-мерный» код [4], который является очень быстрым благодаря использованию аппроксимации для индуктивности соленоида конечной длины [5] и предположения о пространственной однородности плотности магнитной энергии внутри МКГ. Несомненным преимуществом таких программ является их простота, достигаемая за счет использования приближений, которые хотя и не позволяют учесть детальное распределение токов по лайнеру, однако дают возможность с достаточной точностью рассчитывать величины токов и напряжений в системе МКГ – нагрузка.

Более сложные «двумерные» [6, 7] и «трехмерные» [8, 9] физико-математические модели МКГ и компьютерные программы, их реализующие, позволяют учесть динамику движения лайнера и нелинейную диффузию магнитного поля, произвести точный подсчет индуктивности МКГ, запаздывания времени установления точки контакта и др. Такого рода алгоритмы требуют гораздо большего компьютерного времени и необходимы для финального моделирования системы. Для предварительного выбора параметров системы удобно пользоваться простыми программами.

Целью данной работы является сравнение одномерной и двумерной моделей, реализованных в виде компьютерных программ, с экспериментальными данными, полученными в НИИ ЯП БГУ для многосекционного МКГ.

2. Одномерная модель МКГ

МКГ состоит из блока накачки, лайнера, соленоида и нагрузки. Как известно [1], такой генератор может быть описан на основе электротехнического уравнения относительно тока $I(t)$ с меняющимися во времени индуктивностью $L(t)$ и сопротивлением $R(t)$ МКГ:

$$\frac{dI(t)}{dt}(L(t) + L_n) + I(t)\left(\frac{dL(t)}{dt} + R(t) + R_n\right) = 0, \quad (1)$$

где L_n , R_n – индуктивность и сопротивление нагрузки.

Схема МКГ длиной l_s радиусами обмотки ρ и арматуры r изображена на рис. 1. Можно выделить 3 области: область (1) перед расширяющимся лайнером, «конус» (2) расширяющегося лайнера и область (3) с витками, замкнутыми лайнером. С течением времени конус лайнера смещается вправо со скоростью, равной скорости детонационной волны. В каждый момент времени форма медного лайнера МКГ задается функцией $r(x, t)$.

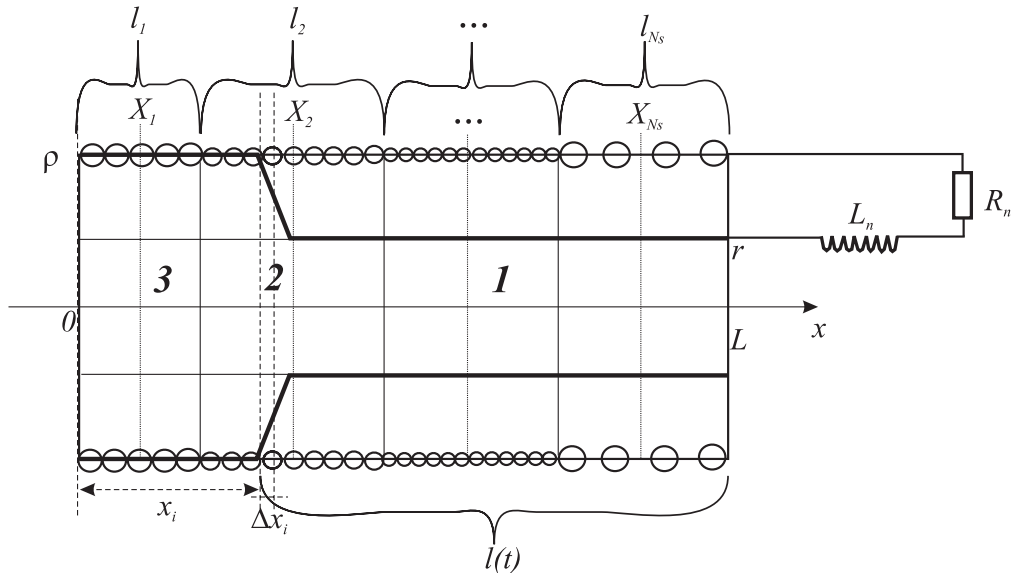


Рис. 1. МКГ с неравномерной намоткой

Для описания зависящих от времени индуктивности и сопротивления воспользуемся следующей простой моделью [2]. Поскольку время протекания процессов в МКГ составляет микросекунды, то магнитное поле не успевает проникнуть в область, ограниченную лайнером, поэтому в первом приближении эта область может считаться сверхпроводящей. Для расчета индуктивности рассмотрим соленоид со сверхпроводящей сердцевинкой радиуса r . Плотность тока, протекающего по поверхности соленоида, может быть разложена на составляющую $j_{\parallel}$, параллельную оси соленоида, и перпендикулярную ей циркулярную составляющую $j_{\perp}$ (рис.2).

Если мысленно разрезать соленоид и развернуть поверхность (рис. 2), то получится, что эти составляющие связаны соотношением $j_{\perp} = j_{\parallel} \tan \theta = j_{\parallel} \frac{2\pi\rho}{h}$, где h – шаг намотки соленоида.

Записав энергию магнитного поля как сумму энергий параллельного и цир-

кулярного токов, а затем, разделив результат на $I_{\parallel}^2/2$, где полный параллельный ток равен $I_{\parallel} = j_{\parallel} 2\pi\rho\delta$ и δ – толщина скин-слоя, найдем индуктивность, приходящуюся на единицу длины соленоида [2]:

$$\frac{dL}{dx} = \frac{\mu_0 \pi \rho}{h^2(x)} (\rho^2 - r^2(x, t)) + \frac{\mu_0}{2\pi} \ln \frac{\rho}{r(x, t)}, \quad (2)$$

где $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ Гн/м. В выражении (2) учитывается неравномерность намотки соленоида с шагом $h(x)$, а также зависимость радиуса лайнера от координаты x и времени t . Множителем $(\rho^2 - r^2)/\rho^2$ учитывается тот факт, что магнитное поле не успевает проникнуть в область, занятую лайнером, и, таким образом, эта область не дает вклада в энергию системы. Интегрирование по x дает индуктивность МКГ при определенном положении лайнера в данный момент времени.

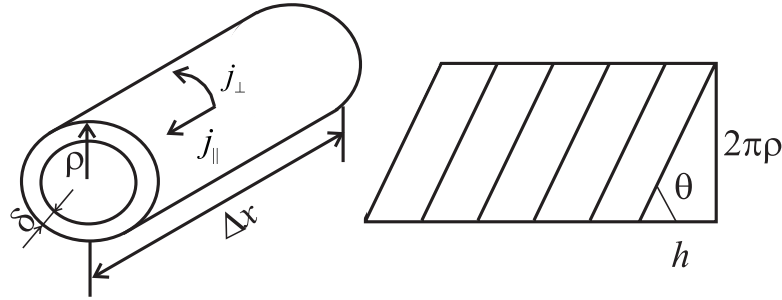


Рис. 2. Токовая поверхность МКГ и ее развертка

Вывод формулы для сопротивления МКГ заключается в расчете диссипируемой в объеме проводника ΔV энергии $\Delta W = \eta j^2 \Delta V$, которая складывается из энергий $\Delta W_{\parallel}$, $\Delta W_{\perp}$, соответствующих параллельному и циркулярному токам. Сопротивление МКГ равно отношению полной диссипируемой в единицу времени энергии к квадрату параллельного тока $\Delta R = \Delta W / I_{\parallel}^2$. С учетом того, что ток протекает в тонком скин-слое толщиной δ , находим:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta W_{\perp}}{I_{\parallel}^2} &= \frac{j_{\perp}^2 \eta 2\pi \rho \delta \Delta x}{(j_{\parallel} 2\pi \rho \delta)^2} = \frac{j_{\perp}^2}{j_{\parallel}^2} \frac{\eta \Delta x}{2\pi \rho \delta} = \frac{2\pi \rho \eta}{h^2 \delta} \Delta x, \\ \frac{\Delta W_{\parallel}}{I_{\parallel}^2} &= \frac{j_{\parallel}^2 \eta 2\pi \rho \delta \Delta x}{(j_{\parallel} 2\pi \rho \delta)^2} = \frac{\eta}{2\pi \rho \delta} \Delta x, \end{aligned}$$

где η – удельное сопротивление материала обмотки и лайнера. Суммируя диссипируемые энергии (в единицу времени), выделяющиеся как на катушке, так и на лайнере, приходим к конечной формуле [2]:

$$\frac{dR}{dx} = \frac{2\pi \eta}{h^2(x) \delta} \left(\frac{\rho}{K} + r(x, t) \right) + \frac{\eta}{2\pi \delta} \left(\frac{1}{\rho} + \frac{1}{r(x, t)} \right), \quad (3)$$

где введен коэффициент заполнения K , равный отношению диаметра металлической жилы провода к полному диаметру провода. Этим коэффициентом учитывается то, что ток течет только по металлу и, таким образом, реальное сечение, по которому течет ток, в K раз меньше.

Скин-слой существенно влияет на сопротивление МКГ. Его изменение в зависимости от производной тока ВМГ можно приближенно представить следующим образом:

$$\frac{\eta}{\delta} \rightarrow k \sqrt{\frac{dI(t)/dt}{I(t)}} + \frac{\eta}{d}, \quad (4)$$

где феноменологический коэффициент k равен примерно $k = 1.47 \times 10^{-7}$ и может уточняться по результатам экспериментальных исследований, d – диаметр провода. Формула (4) означает, что в (3) величина η/δ в каждый момент времени заменяется выражением правой части (4).

3. Двумерная модель МКГ

Изложим теперь основы двумерной модели. Следует заметить, что в катушке МКГ параллельный и перпендикулярный оси токи жестко связаны через шаг намотки. В то же время на лайнере и других деталях МКГ (например, фланцах) могут возбуждаться круговые токи, что в конечном итоге препятствует проникновению магнитного поля в область, ограниченную лайнером и данными деталями МКГ. Базовой формулой для двумерного моделирования является взаимоиנדуктивность $\mathbf{M}(\rho, a, r, b, s)$ двух колец радиусами ρ , r и ширинами a , b , находящихся на расстоянии s . Формулы для данной величины могут быть выведены интегрированием или взяты из справочника [10].

Обозначим параллельную оси МКГ компоненту тока I_z . Как уже говорилось выше, плотность циркулярного тока в катушке жестко связана с током I_z через шаг намотки. Лайнер можно разбить на витки толщиной Δx_i , причем радиус каждого витка меняется со временем, что соответствует расширению витка, когда до него доходит детонационная волна. В витках возбуждаются токи I_i^θ за счет взаимоиנדукции с соленоидом обмотки.

На рисунке 1 введены следующие обозначения: $l(t)$ – длина неотребовавшего лайнера, l_k – длина k -й секции; X_k – центр k -й секции, $k = 1, \dots, N_s$; N_s – число секций ВМГ; x_i – координата центра i -го контура-витка; $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$ – шаг i -го контура-витка, $i = 1, \dots, N$, где N – число контуров-витков, на которое разбивается лайнер; j_s – номер самой левой секции, внутри которой находится конус лайнера. Перед началом работы $j_s = 1$.

Система уравнений для многосекционного ВМГ выглядит следующим образом:

$$(L_z + L_n) \frac{dI_z}{dt} + \sum_{i=1}^N \left(M_{zi} \frac{dI_i^\theta}{dt} + I_i^\theta \frac{d\tilde{M}_{zi}}{dt} \right) + \left(R_z + R_n + \frac{dL_z}{dt} \right) I_z = 0, \quad (5)$$

$$\left(M_{zi} \frac{dI_z}{dt} + I_z \frac{d\tilde{M}_{zi}}{dt} \right) + \sum_{j=1}^N \left(M_{ij}^\theta \frac{dI_j^\theta}{dt} + I_j^\theta \frac{d\tilde{M}_{ij}^\theta}{dt} \right) + R_i^\theta I_i^\theta = 0, \quad i = 1, 2, 3, \dots, N, \quad (6)$$

$$L_z(t) = \frac{\mu_0}{2\pi} \sum_{r_i < R} \ln \left(\frac{\rho}{r_i} \right) \Delta x_i + \sum_{k=j_s}^{N_s} \sum_{n=j_s}^{N_s} \frac{l_k l_n}{h_k h_n} \mathbf{M}(\rho, l_n, \rho, l_k, X_n - X_k), \quad (7)$$

представляет собой индуктивность соленоида многосекционного МКГ (без лайнера).

Взаимоиндуктивность соленоида с i -м витком лайнера вычисляется следующим образом:

$$M_{zi} = \sum_{k=j_s}^{N_s} \frac{l_k}{h_k} \mathbf{M}(\rho, l_k, r_i, \Delta x_i, X_k - x_i).$$

Следует отметить, что длины катушек l_k постоянны во времени за исключением катушки $l_{j_s}(t)$, которая в данный момент «проходится» лайнером.

$M_{ij}^\theta = \mathbf{M}(r_i(t), \Delta x_i, r_j(t), \Delta x_j, x_i - x_j)$ – взаимоиנדуктивности витков лайнера.

Тильда в $\tilde{M}_{zi}$ и $\tilde{M}_{ij}^\theta$ означает, что при их расчете нужно считать, что лайнер доходит только до внутренней изоляции провода обмотки, а не до металлической жилы.

Сопротивление вычисляется из тех же принципов, что и в одномерной модели:

$$R_z = \sum_{i=1}^N \frac{\eta \Delta x_i}{2\pi r_i \delta} + \sum_{m=j_s}^{N_s} l_m \left(\frac{2\pi \eta \rho}{\delta K_m} \frac{1}{h_m^2} + \frac{\eta}{2\pi \rho \delta} \right), \quad (8)$$

$$R_i^\theta = \frac{2\pi \eta}{\delta} \frac{r_i(t)}{\Delta x_i},$$

где δ – толщина скин-слоя, K_m – коэффициент заполнения m -й секции. Скин-слой моделируется с помощью подхода (4).

Возникает вопрос о постановке начальных условий для θ -токов МКГ в системе (5) – (6). Если накачка достаточно медленная, то можно представить, что в некоторый момент времени МКГ подсоединен к источнику постоянного напряжения и в нем устанавливается стационарный ток. При этом в начальный момент времени в лайнере возникают токи, препятствующие проникновению магнитного поля в лайнер, однако далее они затухают, так что на момент запуска МКГ ток будет существовать только в обмотке, а θ -токи считаются равными нулю: $I_i^\theta(0) = 0$. Если используется быстрая накачка, то токи в лайнере не успевают затухнуть, т. е. магнитное поле не будет проникать в лайнер уже на стадии накачки. В этом случае необходимо моделировать накачку и работу МКГ как единый процесс.

4. Приближенное вычисление эффективной индуктивности

Представляется полезным вывести формулу для точного расчета индуктивности МКГ $L_{z\text{eff}}(t)$ в случае сверхпроводящего лайнера. Эта индуктивность должна всегда быть меньше $L_z(t)$ в (7) и может быть измерена до начала работы МКГ с помощью генератора высокой частоты (разумеется, измерения должны проводиться со вставленным внутрь МКГ лайнером).

Положим $R_i^\theta = 0$. Тогда из (5) – (6) получается следующая система уравнений в векторном виде:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(L_z I_z) + \frac{d}{dt}(\vec{M}_z \vec{I}^\theta) + R_z I_z &= 0, \\ \frac{d}{dt}(\vec{M}_z I_z) + \frac{d}{dt}(\mathbf{M}^\theta \vec{I}^\theta) &= 0, \end{aligned} \quad (9)$$

где $\mathbf{M}^\theta = (M_{ij}^\theta)$ – матрица коэффициентов M_{ij}^θ , $\vec{M}_z = (M_{zi})$ – вектор коэффициентов M_{zi} , $\vec{I}^\theta = (I_i^\theta)$ – вектор токов I_i^θ .

Проинтегрируем второе уравнение:

$$\vec{M}_z I_z + \mathbf{M}^\theta \vec{I}^\theta = \vec{M}_z(0) I_z(0).$$

Из него следует

$$\vec{I}^\theta = (\mathbf{M}^\theta)^{-1} (-\vec{M}_z I_z + \vec{M}_z(0) I_z(0)), \quad (10)$$

где $(\mathbf{M}^\theta)^{-1}$ – обратная матрица. Подставляя (10) в (9), получим:

$$\frac{d}{dt}(L_z I_z) + \frac{d}{dt} \left(-\vec{M}_z (\mathbf{M}^\theta)^{-1} \vec{M}_z I_z + \vec{M}_z (\mathbf{M}^\theta)^{-1} \vec{M}_z I_z(0) \right) + R_z I_z = 0. \quad (11)$$

В процессе работы $I_z(t)$ становится много больше $I_z(0)$. Таким образом, вторым слагаемым в скобках можно пренебречь. Тогда уравнение (11) можно переписать в виде

$$\frac{d}{dt}(L_{zeff} I_z) + R_z I_z = 0, \quad (12)$$

$$L_{zeff} = L_z(t) - \vec{M}_z(t) (\mathbf{M}^\theta(t))^{-1} \vec{M}_z(t). \quad (13)$$

Полученное выражение (13) для L_{zeff} можно использовать для проверки экспериментально измеренных индуктивностей, а также для введения поправочного коэффициента в программу по одномерному моделированию ВМГ. Это связано с тем, что приближенная формула (2) дает завышенное значение индуктивности.

5. Компьютерные программы моделирования МКГ

Для численного моделирования МКГ по моделям (1) – (4) и (5) – (8) были предложены разностные методы, на основе которых созданы компьютерные программы, написанные на языке Фортран. Интерфейс одной из программ приводится на рис. 3. Время работы этой программы составляет порядка минуты для расчетной сетки в 20 000 точек. Время работы двумерной программы моделирования МКГ по формулам (5) – (8) и (13) составляет несколько десятков минут.

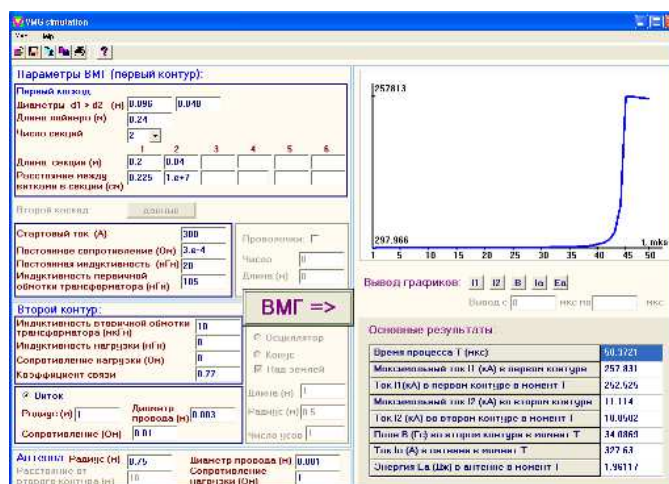


Рис. 3. Интерфейс программы VMG-1

6. Сравнение с экспериментом

МКГ, разработанный в НИИ ЯП, представлял собой пятисекционный МКГ с очень плавным выводом индуктивности в конце работы. В результате высота пиков напряжения между лайнером и обмоткой была примерно одна и та же в процессе всей работы генератора (рис. 4). Данный МКГ предназначен для получения большого тока без каких-либо требований на ширину выходного импульса. Рассчитанная начальная индуктивность со вставленным внутрь лайнером $L_{z\text{eff}}$ составила 265 мкГн, в то время как измеренная экспериментально была 263 мкГн. По одномерной модели расчет начальной индуктивности давал 309 мкГн, поэтому в одномерных расчетах использовался поправочный коэффициент для индуктивности 0.85.

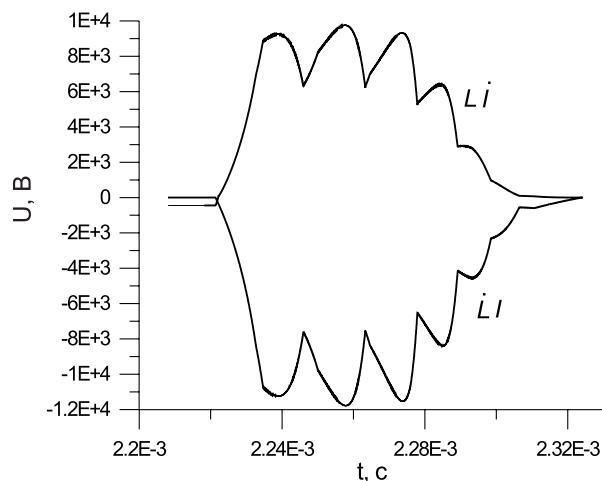


Рис. 4. Напряжение МКГ

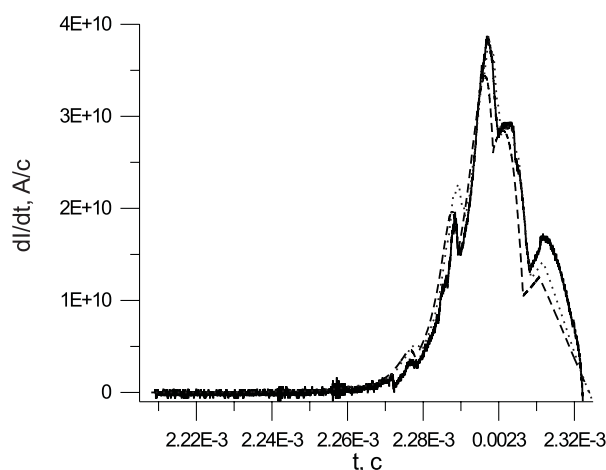


Рис. 5. Производная тока МКГ (— эксперимент, ----- одномерная модель, двумерная модель)

На рисунке 5 приведена экспериментальная кривая производной тока МКГ в сравнении с численными результатами, полученными по одномерной и двумерной моделям, описанным выше. Наиболее детальной экспериментальной информацией является зависимость производной тока от времени. Площадь под кривой численно равна максимальному току 0.9 МА, достигнутому в данном эксперименте. Расчет по одномерной и двумерной моделям проводились при одном и том же коэффициенте потерь и прочих входных параметрах. Уменьшая коэффициент потерь, можно добиться несколько лучшего совпадения с экспериментом и для одномерной модели. Преимущество двумерной модели состоит в том, что в ней не требуется вводить поправочный коэффициент в индуктивность. Кроме того, она в принципе позволяет точно учесть влияние фланцев и цилиндрических секций в передней и задней части обмотки, а также других деталей МКГ, в которых могут возбуждаться циркулярные токи. В расчетах данные элементы конструкции, так же как и лайнер, разбивались на витки, связанные взаимными индукциями между собой и с секциями обмотки и витками лайнера.

6. Заключение

Таким образом, одномерное моделирование дает приемлемую точность для предварительного проектирования МКГ. При этом необходимо вводить поправочный коэффициент для индуктивности, рассчитанной по одномерной модели, путем ее сравнения с $L_{z\text{eff}}$ из двумерной модели. Заметим, что феноменологический коэффициент при сопротивлении, учитывающий дополнительные потери магнитного потока, позволяет добиться удовлетворительного совпадения формы кривой для производной тока МКГ с экспериментальной как для двумерной, так и одномерной моделей.

Авторы статьи благодарят экспериментальную группу НИИ ЯП БГУ под руководством В. Г. Барышевского за предоставленные экспериментальные данные.

Литература

1. *Фортон Е.В.* Взрывные генераторы мощных импульсов электрического тока. 2002.
2. *Павловский А.И., Людаев Р. З.* и др. // Труды III Междунар. конф. «Сверхсильные магнитные поля». 1984. С. 312.
3. *Pavlovsky A. I., Ludaev R. Z.* et al. //Megagauss Fields and Pulsed Power Systems. 1990. P. 233.
4. *Novac B. M., Smith I. R.* // Electromagnetic Phenomena. 2003. Vol. 3, № 4. P. 445.
5. *Wheeler H. A.* // Proc. Inst. Radio Eng. 1928. Vol. 16. P.1398.
6. *McGlaun J. M., Thomson S. L., Freeman J. R.* // Megagauss Physics and Technology. 1980. P. 193.
7. *Пикарь А.С., Дерюгин Ю.Н.* и др. //Труды VI Забабахинских научных чтений. 2001. С. 1.
8. *Salon S., Wendling P.* // Megagauss Fields and Pulsed Power Systems. 1990. P. 189.
9. *White D. A., Rieben R. N., Wallin B. K.* // Megagauss 2006 IEEE Int. Conf. 2006. P.371
10. *Калантаров П. Л., Цейтлин Л. А.* Расчет индуктивностей: Справочная книга. 1986. 488 с.

ONE-DIMENSIONAL AND TWO-DIMENSIONAL MODELS OF THE HELICAL FLUX COMPRESSION GENERATOR: NUMERICAL ANALYSIS AND COMPARISON WITH EXPERIMENT

S. N. Sytova, V. V. Tikhomirov, S. L. Cherkas

Comparison of one-dimensional and two-dimensional models of the helical flux compression generator with experimental results demonstrates that both models allow to obtain good agreement with experiments. In the frame of two-dimensional model a method of exact calculation of generator inductance with liner inside was proposed. Software packages implementing both models allow to calculate all parameters of the helical flux compression generator with variable winding steps.

ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННАЯ ДИНАМИКА МИКРОПУЗЫРЬКОВЫХ КОНТРАСТНЫХ АГЕНТОВ В УЛЬТРАЗВУКОВЫХ ПОЛЯХ

А. А. Дойников

Ультразвук широко применяется в медицине и биологии [1–3]. В последние годы особое внимание привлекают технологии, основанные на использовании свободных (не имеющих оболочки) и так называемых контрастно-агентных микропузырьков. Последние представляют собой искусственно созданные газовые пузырьки микронного размера, заключенные в биологическую оболочку [4]. Оболочка необходима для того чтобы предотвратить быстрое растворение и слипание пузырьков. Контрастно-агентные пузырьки вводятся внутрь объекта (например, в кровеносную систему пациента) с целью повысить эффективность запланированного ультразвукового воздействия. Свободные пузырьки используются для той же цели, при этом они могут вводиться в объект извне, но могут и самопроизвольно возникать внутри объекта за счет акустической кавитации [5]. Присутствие пузырьков, которые усиливают ультразвуковой эхосигнал, позволяет существенно повысить качество изображения зондируемого объекта, обычно – внутренних органов пациента [3]. Эта техника широко используется в диагностической кардиологии для оценки состояния сердца, визуализации циркуляции крови и оценки перфузии миокарда [6]. Аналогичные методики применяются в радиологии и онкологии, где с их помощью исследуется кровяное течение в брюшной и периферийной сосудистой системе [7], а также в сосудах внутри опухолей [8]. Разрабатываются методики по использованию контрастно-агентных пузырьков для измерения физиологической и патологической перфузии мозга [9]. Примерами очень перспективных клинических применений контрастно-агентных технологий являются целевая интроскопия и локализованная доставка лекарства и генов [10, 11]. Для реализации этих методик создаются специальные инкапсулированные пузырьки, называемые целевыми контрастными агентами, которые поглощаются только определенными тканями или прилипают только к определенным местам в теле. В результате повышается акустический контраст между нормальными и аномальными частями органов, что улучшает выявление внутренних повреждений органов, воспалительных процессов и тромбов [12, 13]. Кроме того, целевые контрастные агенты могут переносить лекарство или гены, которые необходимо доставить к специфическому месту или ткани, что дает беспрецедентные возможности для высокоселективного терапевтического воздействия. Наряду с пользой присутствие микропузырьков может причинять вред. Динамика микропузырьков в незапланированном режиме может приводить к повреждению тканей, внутреннему кровотечению, гибели

клеток, образованию опасных свободных радикалов в крови и т. д. [14, 15]. Чтобы избежать вредных последствий и максимально повысить эффективность полезных процессов, необходимо хорошо знать физические механизмы вышеописанных явлений, уметь их моделировать и предсказывать результат тех или иных действий.

В ныне проводимых исследованиях доминирует экспериментальное направление, тогда как разработка теоретических основ динамики контрастных агентов существенно отстает. Общий подход, который используется в подавляющем большинстве теоретических работ, заключается в простом переносе результатов, полученных в области физической акустики, на биологические системы. При этом специфика биологических систем либо полностью, либо в весьма значительной степени игнорируется. Например, для описания радиальных пульсаций микропузырьков (и свободных, и заключенных в оболочку), находящихся в биологической жидкости (крови), используются различные формы уравнения Рэлея – Плэссета, которое было получено в физической акустике для обычных газовых пузырьков, окруженных ньютоновской жидкостью (водой). Для того чтобы учесть неньютоновские свойства крови и присутствие оболочки в уравнение Рэлея – Плэссета феноменологически вводятся различные дополнительные члены [16–19]. Однако эксперименты показывают, что такой полупирический подход не позволяет корректно описать ряд важнейших эффектов, происходящих в реальных биологических системах [20, 21]. В настоящее время совершенно очевидно, что дальнейшее развитие ультразвуковых микропузырьковых технологий настоятельно требует тщательных теоретических и численных исследований, которые должны строго учитывать специфическое реологическое поведение пузырьковой оболочки и окружающей биологической жидкости. Результаты, полученные при выполнении данной работы, позволяют продвинуться по пути решения указанной проблемы.

1. Контрастные агенты с альбуминовой и полимерной оболочкой

Наиболее математически строгая модель, описывающая радиальную пульсацию сферического газового пузырька с оболочкой из альбумина или полимера, была предложена Черчем [17]. Основным недостатком этой модели является пренебрежение трансляционным движением пузырька и акустическими потерями на переизлучение звука, происходящими вследствие конечной сжимаемости окружающей жидкости. Кроме этого, Черч некорректно вычислил внутренний радиус пузырьковой оболочки, соответствующий ненапряженному состоянию материала оболочки. В результате его модель может быть правомочной только для контрастных агентов с тонкой оболочкой, которая является полностью проницаемой для газа. Тогда как в настоящее время широко используются контрастные агенты с толстыми оболочками, которые обеспечивают продленное время жизни пузырьков.

Чтобы устранить недостатки модели Черча, был сделан строгий вывод физических уравнений, управляющих радиальной и трансляционной динамикой инкапсулированного газового пузырька в ультразвуковом поле. Этот вывод ос-

новывается на использовании Лагранжева формализма, предполагая, что инкапсулирующий слой ведет себя как несжимаемое вязкоупругое твердое тело, подчиняющееся материальному уравнению Кельвина – Войхта [22]. Поправки на сжимаемость окружающей жидкости были введены в уравнение радиального движения пузырька посредством вычисления кинетической и потенциальной энергии окружающей жидкости с точностью до первого порядка по числу Маха. При этом был использован подход, разработанный в работе [23]. Вязкие эффекты в окружающей жидкости и в пузырьковой оболочке учитывались посредством использования надлежащих диссипативных функций в процессе применения Лагранжевой техники. Было также получено корректное выражение для внутреннего радиуса пузырьковой оболочки, соответствующего ненапряженному состоянию материала оболочки. Вычисление было выполнено посредством использования строгих уравнений теории упругости, предполагая, что оболочка может быть произвольной толщины и непроницаемой для газа, как это имеет место в случае толстостенных контрастных агентов третьего поколения таких, как Quantison и Муомар [18]. Более подробно данный вывод описывается в статьях [24] и [25], которые были опубликованы по результатам настоящей работы. Окончательная система уравнений пузырькового движения имеет вид

$$\begin{aligned}
R_1 \ddot{R}_1 \left[1 + \left(\frac{\rho_L - \rho_s}{\rho_s} \right) \frac{R_1}{R_2} \right] + \dot{R}_1^2 \left[\frac{3}{2} + \left(\frac{\rho_L - \rho_s}{\rho_s} \right) \left(\frac{4R_2^3 - R_1^3}{2R_2^3} \right) \frac{R_1}{R_2} \right] - \frac{1}{c} \frac{\rho_L}{\rho_s} H = \\
= \frac{\rho_L}{\rho_s} \frac{\dot{x}^2}{4} + \frac{1}{\rho_s} \left[P_{g0} \left(\frac{R_{10}}{R_1} \right)^{3\gamma} - \frac{2\sigma_1}{R_1} - \frac{2\sigma_2}{R_2} - P_0 - P_{ac}(x, t) \right] - \\
- \frac{4\dot{R}_1}{\rho_s R_1 R_2^3} \left[\eta_L R_1^3 + \eta_s (R_{20}^3 - R_{10}^3) \right] - \frac{4\mu_s (R_{20}^3 - R_{10}^3)}{\rho_s R_2^3} \left(1 - \frac{R_{1e}}{R_1} \right) \left[1 + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R_{1e}}{R_1} \right) \left(1 - \frac{3R_1^3}{R_2^3} \right) \right], \\
m_b \ddot{x} + \frac{2\pi}{3} \rho_L \frac{d}{dt} (R_2^3 \dot{x}) = - \frac{4\pi}{3} R_2^3 \frac{\partial}{\partial x} P_{ac}(x, t) + F_d.
\end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $R_1(t)$ и $R_2(t)$ – внутренний и внешний радиусы пузырьковой оболочки, точка сверху обозначает производную по времени, ρ_L – равновесная плотность окружающей жидкости, ρ_s – плотность пузырьковой оболочки, c – скорость звука в окружающей жидкости, $x(t)$ – положение центра пузырька, P_{g0} – равновесное давление газа внутри пузырька, которое определяется как

$$P_{g0} = P_0 + \frac{2\sigma_1}{R_{10}} + \frac{2\sigma_2}{R_{20}} + 4\mu_s \left(1 - \frac{R_{10}^3}{R_{20}^3} \right) \left(1 - \frac{R_{1e}}{R_{10}} \right) \left[1 + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{R_{1e}}{R_{10}} \right) \left(1 - \frac{3R_{10}^3}{R_{20}^3} \right) \right], \quad (3)$$

R_{10} и R_{20} – внутренний и внешний радиусы оболочки в состоянии покоя, σ_1 и σ_2 – коэффициенты поверхностного натяжения на границах раздела газ – оболочка и жидкость – оболочка соответственно, P_0 – гидростатическое давление в окружающей жидкости, $P_{ac}(x, t)$ – задающее акустическое давление в точке на-

хождения пузырька, η_L – коэффициент сдвиговой вязкости окружающей жидкости, η_s – коэффициент сдвиговой вязкости оболочки, μ_s – модуль сдвига оболочки, R_{1e} – ненапряженное равновесное положение границы раздела газ – оболочка, определяемое как

$$R_{1e} = R_{10} \left[1 - \frac{1}{4\mu_s} \left(P_0 + \frac{2\sigma_2}{R_{20}} \right) \frac{R_{20}^3}{R_{10}^3} \right], \quad (4)$$

m_b – масса пузырька и, наконец, F_d обозначает силу вязкого сопротивления

$$F_d = -\frac{1}{4} \pi \eta_L R_2 \dot{x} (24 + 9\rho_L R_2 |\dot{x}| / \eta_L). \quad (5)$$

Функция H в уравнении (1), которая отвечает за акустические потери, вычисляется посредством следующего уравнения:

$$H = \left[1 + \left(\frac{\rho_L - \rho_s}{\rho_s} \right) \frac{R_1}{R_2} \right]^{-1} \left\{ R_1 \frac{dG}{dt} + 2R_1 \dot{R}_1 \ddot{R}_1 \left[1 + \left(\frac{\rho_L - \rho_s}{\rho_s} \right) \frac{R_1^4}{R_2^4} \right] + 2\dot{R}_1^3 \left[1 + \left(\frac{\rho_L - \rho_s}{\rho_s} \right) \frac{R_1^4 (2R_2^3 - R_1^3)}{R_2^7} \right] \right\}, \quad (6)$$

где G обозначает правую сторону (1). Уравнение (1) управляет радиальной пульсацией пузырька, а (2) – его трансляцией.

Таким образом, разработанная теоретическая модель включает два обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнения: радиальное уравнение (1) и трансляционное уравнение (2). Они дополняются уравнениями (3) – (6) и соотношением $R_2^3 - R_1^3 = R_{20}^3 - R_{10}^3$, которое вытекает из предположения о несжимаемости пузырьковой оболочки. Начальные условия для этих уравнений имеют вид: $R_1(0) = R_{10}$, $R_2(0) = R_{20}$, $\dot{R}_1(0) = \dot{R}_2(0) = 0$, $x(0) = x_0$, $\dot{x}(0) = 0$. Одновременное численное решение указанных уравнений позволяет получить изменяющийся во времени радиус инкапсулированного пузырька и его трансляционную траекторию.

2. Контрастные агенты с липидной оболочкой

Анализ экспериментальных данных, имеющих в литературе, показывает, что вязкоупругое твердое тело не является адекватной аппроксимацией для липидного покрытия. Специфический динамический отклик липидного монослоя на сжатие и растяжение, относительно низкие резонансные частоты липидных контрастных агентов и механизмы их разрушения указывают, что липидные оболочки обладают свойствами, нехарактерными для вязкоупругого твердого тела Кельвина – Войхта [21, 26, 27]. В экспериментальных статьях по липидным оболочкам сообщается, что они состоят из твердых зон, окруженных стекловидной или жидкой средой [28–31]. Разумно предположить, что такая структура имеет свойства вязкоупругой жидкости, а не вязкоупругого твердого тела.

Вследствие этого для контрастных агентов с липидной оболочкой была разработана модель, которая аппроксимирует реологическое поведение липидного монослоя посредством линейного 3-константного материального уравнения Олдройда. Подход, примененный при разработке данной модели, основывается на использовании граничных условий для давления на внутренней и внешней поверхности пузырьковой оболочки. В результате было получено следующее общее уравнение для радиальной пульсации инкапсулированного пузырька:

$$R_1 \ddot{R}_1 \left[1 + \beta \frac{R_1}{R_2} \right] + \dot{R}_1^2 \left[\frac{3}{2} + \beta \left(\frac{4R_2^3 - R_1^3}{2R_2^3} \right) \frac{R_1}{R_2} \right] = \frac{1}{\rho_s} \left[P_{g0} \left(\frac{R_{10}}{R_1} \right)^{3\gamma} - \frac{2\sigma_1}{R_1} - \frac{2\sigma_2}{R_2} - P_0 - P_{ac}(x, t) + 3 \int_{R_1}^{R_2} \frac{\tau_{rr}^{(S)}(r, t)}{r} dr + 3 \int_{R_2}^{\infty} \frac{\tau_{rr}^{(L)}(r, t)}{r} dr \right], \quad (7)$$

где $\beta = (\rho_L - \rho_s) / \rho_s$, $\tau_{rr}^{(S)}$ – девиатор напряжения для пузырьковой оболочки, а $\tau_{rr}^{(L)}$ – девиатор напряжения для окружающей жидкости. Было принято, что $\tau_{rr}^{(S)}(r, t)$ подчиняется следующему уравнению, известному как линейное 3-константное уравнение Олдройда [22]:

$$\tau_{rr}^{(S)} + \lambda_{s1} \frac{\partial \tau_{rr}^{(S)}}{\partial t} = 2\eta_s \left(v_{rr} + \lambda_{s2} \frac{\partial v_{rr}}{\partial t} \right). \quad (8)$$

Здесь $v_{rr} = \partial v / \partial r$ – радиальная компонента тензора скоростей деформации, v – скорость внутри оболочки, λ_{s1} – время релаксации оболочки, η_s – сдвиговая вязкость оболочки, а λ_{s2} – время ретардации оболочки. Можно показать, что девиатор $\tau_{rr}^{(S)}(r, t)$, удовлетворяющий уравнению (8), может быть записан как

$$\tau_{rr}^{(S)}(r, t) = -4\eta_s \frac{D_s(t)}{r^3}, \quad (9)$$

где функция $D_s(t)$ подчиняется уравнению

$$D_s + \lambda_{s1} \dot{D}_s = R_1^2 \dot{R}_1 + \lambda_{s2} (R_1^2 \ddot{R}_1 + 2R_1 \dot{R}_1^2). \quad (10)$$

Соответственно первый интеграл в (7) вычисляется как

$$3 \int_{R_1}^{R_2} \frac{\tau_{rr}^{(S)}(r, t)}{r} dr = -4\eta_s \frac{D_s(t) (R_{20}^3 - R_{10}^3)}{R_1^3 R_2^3}. \quad (11)$$

Реологическое поведение окружающей жидкости тоже аппроксимируется уравнением Олдройда:

$$\tau_{rr}^{(L)} + \lambda_{L1} \frac{\partial \tau_{rr}^{(L)}}{\partial t} = 2\eta_L \left(v_{rr} + \lambda_{L2} \frac{\partial v_{rr}}{\partial t} \right), \quad (12)$$

где η_L – сдвиговая вязкость жидкости, λ_{L1} – время релаксации жидкости, а λ_{L2} – время ретардации жидкости. В случае $\lambda_{L1} = \lambda_{L2} = 0$ (12) дает уравнение для

обычной вязкой жидкости. Поэтому предлагаемая здесь модель может использоваться как для описания лабораторных экспериментов, где в качестве окружающей жидкости обычно используется вода, так и для описания клинических приложений, где окружающей жидкостью является кровь. Выражение для $\tau_{rr}^{(L)}(r, t)$, удовлетворяющее (12), может быть представлено как

$$\tau_{rr}^{(L)}(r, t) = -4\eta_L \frac{D_L(t)}{r^3}, \quad (13)$$

где функция $D_L(t)$ является решением следующего уравнения:

$$D_L + \lambda_{L1} \dot{D}_L = R_1^2 \dot{R}_1 + \lambda_{L2} (R_1^2 \ddot{R}_1 + 2R_1 \dot{R}_1^2). \quad (14)$$

В результате второй интеграл в уравнении (7) принимает вид

$$3 \int_{R_2}^{\infty} \frac{\tau_{rr}^{(L)}(r, t)}{r} dr = -4\eta_L \frac{D_L(t)}{R_2^3}. \quad (15)$$

Подстановка (11) и (15) в (7) приносит

$$\begin{aligned} & R_1 \ddot{R}_1 \left[1 + \beta \frac{R_1}{R_2} \right] + \dot{R}_1^2 \left[\frac{3}{2} + \beta \left(\frac{4R_2^3 - R_1^3}{2R_2^3} \right) \frac{R_1}{R_2} \right] \\ &= \frac{1}{\rho_s} \left[P_{g0} \left(\frac{R_{10}}{R_1} \right)^{3\gamma} - \frac{2\sigma_1}{R_1} - \frac{2\sigma_2}{R_2} - 4\eta_L \frac{D_L(t)}{R_2^3} - 4\eta_s \frac{D_s(t)(R_{20}^3 - R_{10}^3)}{R_1^3 R_2^3} - P_0 - P_{ac}(x, t) \right]. \end{aligned} \quad (16)$$

Это уравнение может быть модифицировано, чтобы учесть трансляционное движение пузырька и акустические радиационные потери на переизлучение звука. Модификация выполняется путем прямого заимствования необходимых поправок из уравнений (1) и (2), полученных для альбуминовых контрастных агентов. В результате получаем

$$\begin{aligned} & R_1 \ddot{R}_1 \left[1 + \beta \frac{R_1}{R_2} \right] + \dot{R}_1^2 \left[\frac{3}{2} + \beta \left(\frac{4R_2^3 - R_1^3}{2R_2^3} \right) \frac{R_1}{R_2} \right] - \frac{1}{c} \frac{\rho_L}{\rho_s} H = \frac{\rho_L}{\rho_s} \frac{\dot{x}^2}{4} \\ &+ \frac{1}{\rho_s} \left[P_{g0} \left(\frac{R_{10}}{R_1} \right)^{3\gamma} - \frac{2\sigma_1}{R_1} - \frac{2\sigma_2}{R_2} - 4\eta_L \frac{D_L(t)}{R_2^3} - 4\eta_s \frac{D_s(t)(R_{20}^3 - R_{10}^3)}{R_1^3 R_2^3} - P_0 - P_{ac}(x, t) \right]. \end{aligned} \quad (17)$$

Функция H в (17) как и ранее находится из (6), но G в (6) есть теперь правая сторона (17), а не (1). Газовое давление внутри пузырька вычисляется как

$$P_{g0} = P_0 + \frac{2\sigma_1}{R_{10}} + \frac{2\sigma_2}{R_{20}}. \quad (18)$$

Трансляционное уравнение остается тем же самым, см. уравнение (2), с вязкой силой, даваемой выражением (5).

Таким образом, в случае контрастно-агентного пузырька с липидной оболочкой мы имеем систему из четырех обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений: (17), (2), (10) и (14). Эта система дополняется уравнениями

(6) для функции H , (5) для вязкой силы F_d и (18) для газового давления P_{g0} . Начальные условия задаются следующим образом: $R_1(0) = R_{10}$, $R_2(0) = R_{20}$, $\dot{R}_1(0) = \dot{R}_2(0) = 0$, $x(0) = x_0$, $\dot{x}(0) = 0$ и $D_s(0) = D_L(0) = 0$. Более подробно представленные здесь вычисления описываются в статье [32].

3. Динамика контрастных агентов с альбуминовой и полимерной оболочкой в режиме линейных осцилляций

Предполагая, что падающее ультразвуковое поле является слабым (диагностическим), и линеаризуя (1), получаем

$$\ddot{\xi} + \delta_{KV}\dot{\xi} + \omega_{0KV}^2\xi = -\frac{P_{ac}(t)}{\alpha\rho_s R_{10}}. \quad (19)$$

Величина ξ , которая обозначает малое изменение радиуса пузырька, определяется как $R_1(t) = R_{10} + \xi(t)$ при условии, что $|\xi| \ll R_{10}$. Индекс KV означает «Kelvin – Voigt», указывая, что реологическое поведение пузырьковой оболочки описывается уравнением Кельвина – Войхта. Предполагая, что акустическое давление $P_{ac}(t)$ имеет вид $P_{ac}(t) = P_a \exp(i\omega t)$, где P_a – амплитуда давления, а ω – задающая частота, для других величин, входящих в (19), получаем:

$$\alpha = 1 - (1 - \rho_L/\rho_s) R_{10}/R_{20}, \quad (20)$$

$$\delta_{KV} = \delta_r + \delta_{\eta L} + \delta_{\eta S}^{KV}, \quad (21)$$

$$\delta_r = \frac{\rho_L R_{10} \omega^2}{\alpha c \rho_s}, \quad (22)$$

$$\delta_{\eta L} = \frac{4\eta_L R_{10}}{\alpha \rho_s R_{20}^3}, \quad (23)$$

$$\delta_{\eta S}^{KV} = \frac{4\eta_s (R_{20}^3 - R_{10}^3)}{\alpha \rho_s R_{10}^2 R_{20}^3}, \quad (24)$$

$$\omega_{0KV}^2 = \frac{1}{\alpha \rho_s R_{10}^2} \left\{ 3\gamma P_{g0} - \frac{2\sigma_1}{R_{10}} - \frac{2\sigma_2 R_{10}^3}{R_{20}^4} + \frac{4\mu_s (R_{20}^3 - R_{10}^3)}{R_{20}^3} \left[1 - \frac{1}{4\mu_s} \left(P_0 + \frac{2\sigma_2}{R_{20}} \right) \left(3 + \frac{R_{20}^3}{R_{10}^3} \right) \right] \right\}, \quad (25)$$

где δ_{KV} – суммарная диссипативная постоянная, а ω_{0KV} – недемпфированная линейная резонансная частота пузырька. Основным интерес для практики, однако, представляет не ω_{0KV} , а реальная (демпфированная, учитывающая диссипативные потери) резонансная частота. Она вычисляется как

$$\omega_{KV} = \frac{1}{\beta\sqrt{3}} \left\{ \left[\beta^2 (\delta_{\eta L} + \delta_{\eta S}^{KV})^2 + 4\beta (\delta_{\eta L} + \delta_{\eta S}^{KV}) + 6\beta^2 \omega_{0KV}^2 + 1 \right]^{1/2} - 2\beta (\delta_{\eta L} + \delta_{\eta S}^{KV}) - 1 \right\}^{1/2}, \quad (26)$$

где $\beta = \delta_r/\omega^2 = \rho_L R_{10}/(\alpha c \rho_s)$.

Используя (19) – (26), был выполнен сравнительный анализ линейной радиальной динамики пузырьков с альбуминовым и полимерным покрытием по отношению к результатам Черча [17]. Этот анализ выявил, что выражения, полученные Черчем, недооценивают демпфированные резонансные частоты инкапсулированных пузырьков с вязкоупругим твердым покрытием. Было также обнаружено, что вязкое демпфирование в пузырьковой оболочке может приводить к отсутствию резонансного отклика. Этот эффект наблюдается, когда равновесный радиус пузырька меньше, чем определенное пороговое значение, причем, чем толще оболочка, тем больше пороговое значение радиуса. При радиусах ниже этого порога амплитуда радиальных осцилляций монотонно убывает при увеличении задающей частоты, не демонстрируя резонансного пика. Детали этого исследования опубликованы в статье [25].

4. Линейный анализ динамики контрастных агентов с липидной оболочкой

Линейный анализ уравнения (17), полученного для липидных контрастных агентов, был выполнен, предполагая, что окружающая жидкость – вязкая ньютоновская среда. В этом случае $\lambda_{L1} = \lambda_{L2} = 0$, и функция $D_L(t)$ становится равной

$$D_L(t) = R_1^2 \dot{R}_1. \quad (27)$$

Также предполагалось, что время ретардации липидной оболочки равно нулю. В результате уравнение (8) принимает вид

$$\tau_{rr}^{(S)} + \lambda_{S1} \frac{\partial \tau_{rr}^{(S)}}{\partial t} = 2\eta_S \frac{\partial v}{\partial r}. \quad (28)$$

Это уравнение известно как максвелловское материальное уравнение. Поэтому модель липидного пузырька будет далее называть максвелловской моделью. Заметьте также, что с нулевым временем ретардации уравнение для $D_S(t)$ принимает вид

$$D_S + \lambda_{S1} \dot{D}_S = R_1^2 \dot{R}_1. \quad (29)$$

Учитывая эти предположения и линеаризируя (17), получаем

$$\ddot{\xi} + \delta_M \dot{\xi} + \omega_{0M}^2 \xi = -\frac{P_{ac}(t)}{\alpha \rho_S R_{10}}, \quad (30)$$

где ξ определяется уравнением $R_1(t) = R_{10} + \xi(t)$ при условии, что $|\xi| \ll R_{10}$, а остальные величины записываются как

$$\alpha = 1 - (1 - \rho_L / \rho_S) R_{10} / R_{20}, \quad (31)$$

$$\delta_M = \delta_r + \delta_{\eta L} + \delta_{\eta S}^M, \quad (32)$$

$$\delta_r = \frac{\rho_L R_{10} \omega^2}{\alpha c \rho_S}, \quad (33)$$

$$\delta_{\eta L} = \frac{4\eta_L R_{10}}{\alpha \rho_s R_{20}^3}, \quad (34)$$

$$\delta_{\eta S}^M = \frac{4\eta_s (R_{20}^3 - R_{10}^3)}{\alpha \rho_s R_{10}^2 R_{20}^3 [1 + (\lambda \omega)^2]}, \quad (35)$$

$$\omega_{0M}^2 = \omega_0^2 + \lambda \omega^2 \delta_{\eta S}^M, \quad (36)$$

$$\omega_0^2 = \frac{1}{\alpha \rho_s R_{10}^2} \left(3\gamma P_{g0} - \frac{2\sigma_1}{R_{10}} - \frac{2\sigma_2 R_{10}^3}{R_{20}^4} \right). \quad (37)$$

Величина δ_M – суммарная диссипативная постоянная, а ω_{0M} – недемпфированная линейная резонансная частота для максвелловской модели. Чтобы оценить демпфированную резонансную частоту уравнения (30), ищем решение этого уравнения как

$$\xi(t) = A \exp(i\omega t + i\phi), \quad (38)$$

где

$$\phi = \arctan \left[\omega \delta_M / (\omega^2 - \omega_{0M}^2) \right], \quad (39)$$

$$A = P_a Q(\omega) / (\alpha \rho_s R_{10} \omega_0^2), \quad (40)$$

$$Q(\omega) = \omega_0^2 / \left[(\omega^2 - \omega_{0M}^2)^2 + \omega^2 \delta_M^2 \right]^{1/2}. \quad (41)$$

Резонансный отклик пузырька с максвелловской оболочкой соответствует максимуму резонансной функции $Q(\omega)$. $Q(\omega)$ является довольно сложной функцией ω . Поэтому она была исследована численно. Демпфированная резонансная частота, полученная в ходе этого исследования, обозначается ниже как ω_M .

Был проведен сравнительный анализ демпфированных резонансных частот, даваемых максвелловской оболочечной моделью и моделью с оболочкой Кельвина – Войхта. Полученные результаты были также сравнены с предсказаниями так называемой вязкой оболочечной модели, которая предполагает, что инкапсуляция ведет себя как обычная вязкая жидкость, а также с резонансными частотами свободных пузырьков эквивалентного размера. Пример этого сравнения демонстрируется на рис. 1, который показывает резонансную частоту инкапсулированного пузырька как функцию равновесного пузырькового радиуса для трех упомянутых выше моделей при трех значениях оболочечной вязкости: $\eta_s = 0.5, 1.0$ и 1.5 Па·с. Штриховая линия соответствует свободному пузырьку эквивалентного размера. Рис. 1, а показывает, что вязкая оболочка уменьшает резонансную частоту по сравнению со свободным пузырьком и приводит к исчезновению резонансного отклика у малых пузырьков.

Наоборот, оболочка Кельвина – Войхта, рис.1, б, увеличивает резонансную частоту по отношению к свободному пузырьку. Для малых пузырьков, однако, вязкое демпфирование внутри оболочки снова приводит к исчезновению резонанса. Максвелловская модель, рис.1, в, показывает специфическое поведение: если вязкость оболочки не очень высока, резонансная частота пузырька может быть как ниже, так и выше, чем у свободного пузырька.

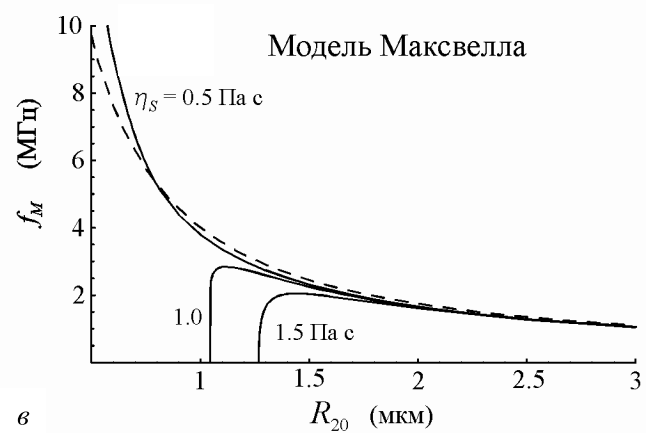
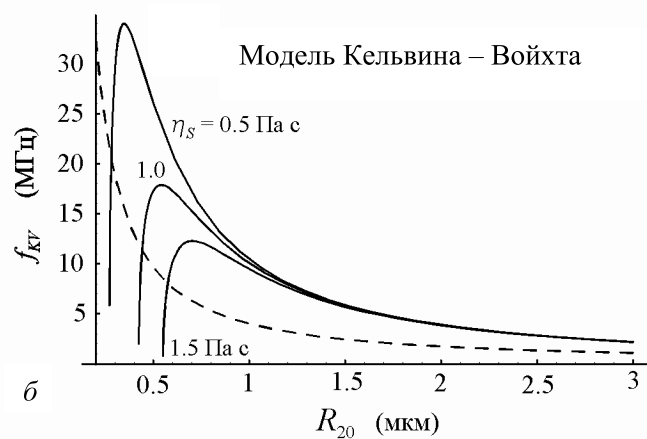
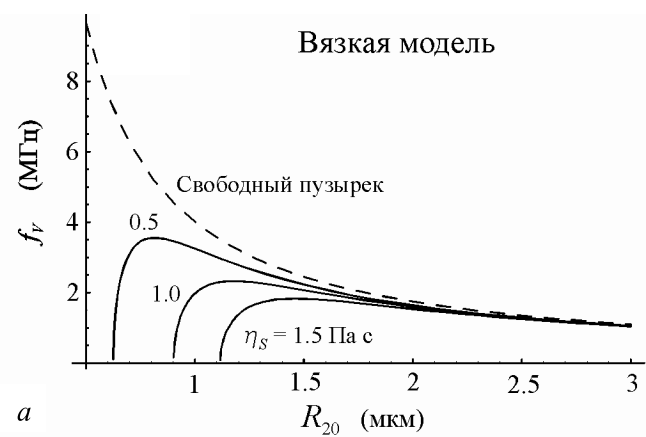


Рис. 1. Демпфированная резонансная частота как функция равновесного пузырькового радиуса для трех оболочечных моделей при трех значениях сдвиговой вязкости оболочки

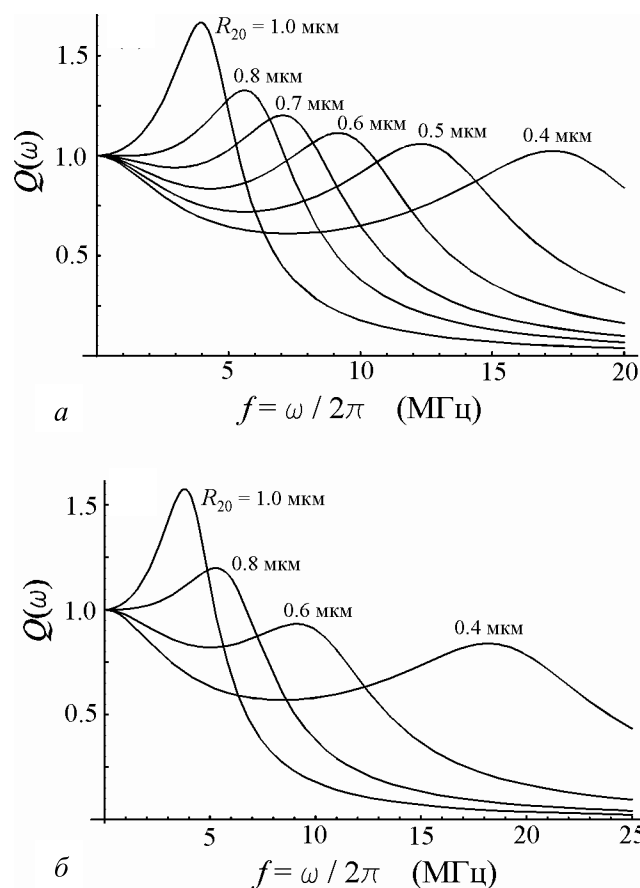


Рис. 2. Резонансная функция максвелловской оболочечной модели при различных значениях равновесного радиуса пузырька R_{20} :

$a - \lambda_{s1} = 0.025$ мкс, $\eta_s = 0.5$ Па с; $b - \lambda_{s1} = 0.02$ мкс, $\eta_s = 0.5$ Па с

Форма резонансной функции $Q(\omega)$ максвелловской модели, см. уравнение (41), тоже является специфической. Резонансные функции двух других моделей могут быть только двух типов: либо с глобальным резонансным пиком, либо, если резонансный отклик подавляется вязкостью оболочки, монотонно убывающими при возрастании задающей частоты.

На рисунке 2 показано, что резонансная функция максвелловской модели в диапазоне пузырьков размеров, соответствующих упругому режиму, может принимать форму кривой с локальным максимумом. Этот эффект приводит к появлению резонансного отклика у сколь угодно малых пузырьков. Однако интенсивность этой резонансной осцилляции может быть меньше, чем интенсивность нерезонансной осцилляции тех же пузырьков при более низкой задающей частоте (см. кривую для $R_{20} = 0.4$ мкм на рис. 2, б).

5. Акустические радиационные силы, действующие на пузырьки с альбуминовой и полимерной оболочкой

Чтобы вычислить радиационную силу, испытываемую контрастными агентами с альбуминовой и полимерной оболочкой, а также трансляционное движение агентов, вызываемое этой силой, были использованы уравнения (1) и (2). Вначале радиационная сила в слабом ультразвуковом поле была исследована, предполагая, что радиальная пульсация пузырька описывается уравнением (19). В этом случае радиационная сила вычисляется по формуле

$$\mathbf{F}_{en} = -\frac{4\pi}{3} \langle R_2^3(t) \nabla P_{ac}(\mathbf{r}, t) \rangle, \quad (42)$$

где $\langle \rangle$ обозначает усреднение по времени, а $\mathbf{r}$ – радиус-вектор центра пузырька. Выражение для внешнего радиуса пузырька $R_2(t)$ в линейном режиме определяется как

$$R_2 = R_{20} + \frac{R_{10}^2}{R_{20}^2} \xi(t). \quad (43)$$

Подстановка (43) в (42) приносит

$$\mathbf{F}_{en} = -4\pi R_{10}^2 \langle \xi(t) \nabla P_{ac}(\mathbf{r}, t) \rangle. \quad (44)$$

В случае плоской бегущей волны $P_{ac}(\mathbf{r}, t) = P_a \exp(i\omega t - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$, где $k = \omega/c$ – волновой вектор. Подставляя это выражение в (44), находим следующую формулу для $\xi(t)$:

$$\xi(t) = \frac{P_{ac}(\mathbf{r}, t)}{\alpha \rho_s R_{10} (\omega^2 - \omega_0^2 - i\omega\delta)}. \quad (45)$$

Подстановка (45) в (44) окончательно дает

$$\mathbf{F}_{en} = \frac{2\pi P_a^2 R_{10} \omega \delta k}{\alpha \rho_s \left[(\omega^2 - \omega_0^2)^2 + \omega^2 \delta^2 \right]}. \quad (46)$$

Радиационная сила на свободный пузырек вычисляется как в работе [33]

$$F_{fr} = \frac{2\pi P_a^2 R_{20} \omega \delta_f k}{\rho_L \left[(\omega^2 - \omega_{0f}^2)^2 + \omega^2 \delta_f^2 \right]}, \quad (47)$$

где

$$\delta_f = \frac{\omega^2 R_{20}}{c} + \frac{4\eta_L}{\rho_L R_{20}^2}, \quad (48)$$

$$\omega_{0f} = \frac{1}{R_{20} \sqrt{\rho_L}} \left(3\gamma P_0 + \frac{2(3\gamma - 1)\sigma}{R_{20}} \right)^{1/2}. \quad (49)$$

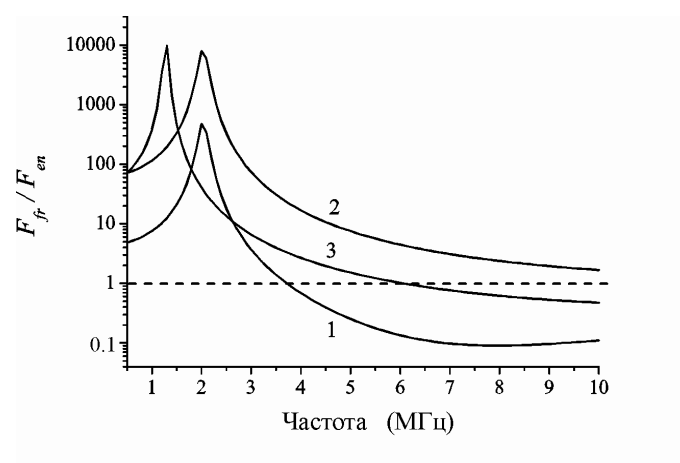


Рис. 3. Сравнение радиационных сил, действующих на инкапсулированный и свободный пузырек в слабом поле при разных задающих частотах: 1 – $R_{20} = 2$ мкм, $R_s = 15$ нм; 2 – $R_{20} = 2$ мкм, $R_s = 200$ нм; 3 – $R_{20} = 3$ мкм, $R_s = 200$ нм

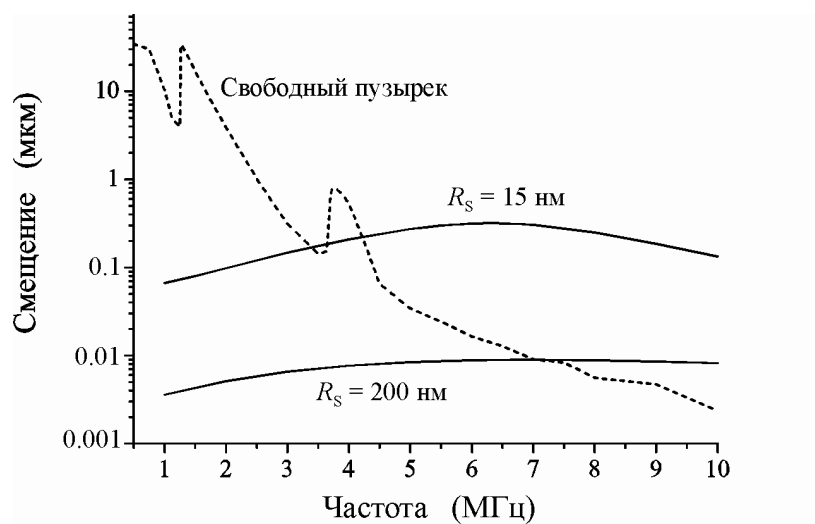


Рис. 4. Трансляционное смещение как функция задающей частоты для свободного и инкапсулированного пузырька

На рисунке 3 изображено отношение F_{fr}/F_{en} как функцию задающей частоты для трех пузырьков с различными значениями равновесного радиуса и толщины оболочки. Наличие инкапсуляции уменьшает амплитуду радиальной осцилляции контрастно-агентных пузырьков. По этой причине принято считать, что радиационная сила, действующая на инкапсулированный пузырек должна быть значительно меньше силы, действующей на свободный пузырек эквивалентного размера. Однако на рис. 3 видно, что это не так. При относительно

низких частотах, вблизи резонанса свободного пузырька, радиационная сила, испытываемая свободным пузырьком, действительно намного превышает силу, действующую на инкапсулированный пузырек. Однако при высоких частотах, в диапазоне резонанса инкапсулированных пузырьков, радиационная сила, испытываемая инкапсулированным пузырьком, превышает силу, действующую на свободный пузырек. Кривая 3 показывает, что этот эффект может иметь место даже для пузырька с толстой оболочкой, $R_S = 200$ нм, если его внешний радиус является достаточно большим.

На рисунке 4 показано трансляционное смещение свободного пузырька (штриховая линия) и двух эквивалентных инкапсулированных пузырьков с толщиной оболочки $R_S = \lim_{x \rightarrow \infty} 15$ нм и 200 нм при более сильном ультразвуковом воздействии. Пузырьки приводятся в движение 20-цикловым ультразвуковым импульсом с амплитудой давления 150 кПа. Смещение пузырьков из начального положения определяется после окончания импульса. Внешний радиус всех пузырьков равняется 2 мкм. Моделирование было выполнено посредством численного решения уравнений (1) и (2). Снова можно видеть, что при высоких частотах трансляционное смещение инкапсулированных пузырьков может быть значительно больше, чем свободных. Таким образом, в диапазоне относительно высоких частот инкапсулированные пузырьки способны перемещаться более эффективно, чем свободные пузырьки эквивалентного размера.

6. Акустические радиационные силы, действующие на пузырьки с липидной оболочкой

Для того чтобы оценить значения оболочечных параметров, которые используются в теоретической модели, разработанной для липидных контрастных агентов, были использованы имеющиеся в литературе экспериментальные данные для агента МР1950 [26]. Эти данные были получены для водного раствора МР1950, что позволяет положить $\lambda_{L1} = \lambda_{L2} = 0$. В результате уравнение (12) сокращается к ньютоновскому вязкому закону. Экспериментальные кривые, описывающие зависимость пузырькового радиуса от времени, и соответствующие трансляционные смещения были получены в работе [26] для 18 пузырьков с равновесными радиусами от 0.79 до 2.81 мкм. Пузырьки облучались 20-цикловым акустическим импульсом с амплитудой давления 180 кПа и частотой 2.25 МГц. Чтобы оценить оболочечные параметры, была выполнена подгонка теоретических и экспериментальных кривых, описывающих зависимость радиуса пузырька от времени. Для подгонки использовался метод наименьших квадратов. С этой целью вычислялся минимум следующей суммы:

$$S = 100 \frac{\sum_n (R_n^{exp} - R_n^{th})^2}{\sum_n (R_n^{exp})^2}, \quad (50)$$

где R_n^{exp} и R_n^{th} – экспериментальное и теоретическое значение мгновенного радиуса пузырька. Вычисления выявили, что время ретардации для липидного покрытия является фактически нулевым. Поэтому все последующие вычисления

были выполнены при $\lambda_{s2} = 0$. Кроме этого, для простоты коэффициент поверхностного натяжения на границе газ-оболочка, σ_1 , был установлен равным нулю [34]. Таким образом, сумма (50) фактически минимизировалась посредством варьирования трех оболочечных параметров: λ_{s1} , η_s и σ_2 . Значения остальных физических параметров, использованных при данных вычислениях, были следующими: $P_0 = 101.3$ кПа, $\rho_L = 1000$ кг/м³, $\eta_L = 0.001$ Па·с, $c = 1500$ м/с, $\gamma = 1.07$, $\rho_s = 1100$ кг/м³ и $R_s = R_{20} - R_{10} = 2$ нм.

Было обнаружено, что σ_2 изменяется случайным образом, независимо от равновесного размера пузырька, в диапазоне значений от 0 до 0.038 Н/м с арифметическим средним 0.0133 Н/м, тогда как λ_{s1} и η_s продемонстрировали явное увеличение с возрастанием равновесного радиуса пузырька. Полиномиальная аппроксимация полученных в результате подгонки значений λ_{s1} и η_s дает следующие соотношения, описывающие зависимость λ_{s1} и η_s от равновесного радиуса (или равновесного объема $V_{b0} = (4\pi/3)R_{20}^3$) инкапсулированного пузырька:

$$\lambda_{s1} = 0.0125 + 0.0024R_{20}^3 = 0.0125 + 0.00057V_{b0}, \quad (51)$$

$$\eta_s = 1.25 + 0.14R_{20}^3 = 1.25 + 0.033V_{b0}, \quad (52)$$

где единицы измерения R_{20} , λ_{s1} и η_s есть соответственно микроны, микросекунды и Па·с.

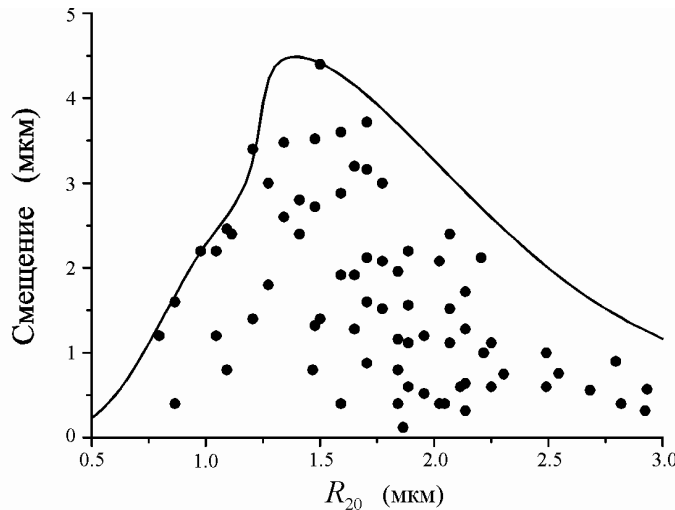


Рис. 5. Экспериментальные и теоретические значения трансляционного смещения для липидного контрастного агента МР 1950

Уравнения (51) и (52), с $\sigma_2 = 0.0133$ Н/м, были использованы для моделирования трансляционного смещения липидных контрастных агентов. Полученные результаты показаны на рис. 5. Экспериментальные значения трансляционного смещения, взятые из работы [26], показаны кружками. Теоретическое сме-

щение показано сплошной линией. Нетрудно видеть, что экспериментальные и теоретические значения находятся в удовлетворительном соответствии, что говорит об адекватности разработанной модели. Теоретическая кривая имеет вид огибающей по отношению к экспериментальным данным. Это объясняется следующими причинами. Теоретические расчеты основываются на предположении, что пузырьки находятся в неограниченной среде, тогда как экспериментальные измерения были сделаны для пузырьков, движущихся через 200-микронную трубку, стенки которой приводят к возникновению дополнительной силы вязкого сопротивления, замедляющей движение пузырьков. В результате теоретические значения трансляционного смещения выглядят несколько завышенными по отношению к экспериментальным данным.

Литература

1. Применение ультразвука в медицине: Физические основы. 1989.
2. Nyborg W. L. // Encyclopedia of Applied Physics. 1991. Vol. 2. P. 403.
3. Wells P. N. T. // Rep. Prog. Phys. 1999. Vol. 62. P. 671.
4. Goldberg B. B., Raichlen J. S., Forsberg F. Ultrasound Contrast Agents: Basic Principles and Clinical Applications. 2001.
5. Coakley W. T., Nyborg W. L. // Ultrasound: Its Applications in Medicine and Biology. 1978. Part I, Chap. 2.
6. Becher H., Burns P.N. Handbook of Contrast Echocardiography. 2000.
7. Forsberg F. et al. // J. Ultrasound Med. 1995. Vol. 14. P. 949.
8. Ferrara K.W. et al. // Acad. Radiol. 2001. Vol. 7. P. 824.
9. Postert T., Muhs A. et al. // Stroke 1998. Vol. 29. P. 1901.
10. Lindner J. R. // Am. J. Cardiol. 2002. Vol. 90. P. 72J.
11. Dayton P. A., Ferrara K. W. // J. Magn. Reson. Im. 2002. Vol. 16. P. 362.
12. Forsberg F., Goldberg B. B., Merton D. A. // Radiology. 1999. Vol. 210. P. 125.
13. Lindner J. R., Song J. et al. // Circulation. 2000. Vol. 102. P. 2745.
14. Frizzell L. A. Ultrasound: its chemical, physical, and biological effects. 1988. P. 287.
15. Dalecki D., Child S. Z. et al. // Ultrasound Med. Biol. 1997. Vol. 23. P. 1435.
16. De Jong N., Cornet R., Lancee C.T. // Ultrasonics 1994. Vol. 32. P. 447.
17. Church C. C. // J. Acoust. Soc. Am. 1995. Vol. 97. P. 1510.
18. Frinking P. J. A., de Jong N. // Ultrasound Med. Biol. 1998. Vol. 24. P. 523.
19. Hoff L., Sontum P. C., Hovem J. M. // J. Acoust. Soc. Am. 2000. Vol. 107. P. 2272.
20. Sboros V., MacDonald C. A. et al. // Ultrasonics. 2002. Vol. 40. P. 579.
21. Morgan K. E. et al. // IEEE Trans. UFFC. 2000. Vol. 47. P. 1494 .
22. Bird R. B., Armstrong R. C., Hassager O. Dynamics of Polymeric Liquids. 1987.
23. Doinikov A. A. // Phys. Fluids. 2005. Vol. 17. 128101. P. 1.
24. Doinikov A. A. // Far East J. Appl. Math. 2006. Vol. 25. P. 159.
25. Doinikov A. A., Dayton P. A. // J. Acoust. Soc. Am. 2006. Vol. 120. P. 661.
26. Dayton P. A., Allen J. S., Ferrara K. W. // J. Acoust. Soc. Am. 2002. Vol. 112. P. 2183.
27. Bloch S. H., Wan M. et al. // Appl. Phys. Lett. 2004. Vol. 84. P. 631.
28. Borden M. A. Longo M. L. // Langmuir. 2002. Vol. 18. P. 9225.
29. Kim D. H., Costello M. J. et al. // Langmuir. Vol. 19. P. 8455.
30. Borden M. A., Pu G., Runner G. J., Longo M. L. // Colloids and Surfaces. 2004. Vol. B 35. P. 209.
31. Borden M. A. et al. // Langmuir. 2006. Vol. 22. P. 4291.

32. *Doinikov A. A., Teterev A. V. // Proc. of the 13th Int. Congress on Sound and Vibration (ICSV13), 2006. ISBN: 3-95-01554-5-7.*
33. *Doinikov A. A. Bubble and Particle Dynamics in Acoustic Fields: Modern Trends and Applications. Kerala. Research Signpost. 2005. P. 95.*
34. *Marmottant P. et al. // J. Acoust. Soc. Am. 2005. Vol. 118. P. 3499.*

SPATIO-TEMPORAL DYNAMICS OF MICROBUBBLE CONTRAST AGENTS IN ULTRASOUND FIELDS

A. A. Doinikov

Theoretical models have been developed that govern the oscillation and translation dynamics of ultrasound contrast agent microbubbles with encapsulating shells of albumin, polymer, and lipid. The model for albumin- and polymer-shelled contrast agents is based on the assumption that the rheological behavior of such shells can be described by a viscoelastic solid following the Kelvin-Voigt constitutive equation. The model for lipid-shelled contrast agents treats the lipid shell as a viscoelastic fluid following the linear 3-constant Oldroyd equation. The proposed models allow one to trace by numerical simulation the radial and translational motions of contrast agent microbubbles in an ultrasound field. The ability of the developed models to predict the spatio-temporal dynamics of currently available contrast agents has been examined. To estimate the values of the shell parameters appearing in the model for lipid-shelled bubbles, theoretical radius-time curves were fitted by the least squares method to experimental data available in the literature. It has been found that the relaxation time and the shear viscosity of lipid monolayer shells are dependent on the equilibrium radius of the bubble, with increasing values for increasing equilibrium radii. The regression relationships representing the best-fit values of the shell parameters as a function of equilibrium bubble radius were obtained. The relationships were then used to simulate the translational motion of lipid-shelled microbubbles of various radii. Theoretical translational displacement was compared to experimentally measured displacement for lipid-shelled contrast agents. It has been shown that the developed model for lipid-coated contrast agents provides satisfactory agreement with the experimental measurements.

PROTEIN CHEMICAL LIGATION AS AN INVALUABLE TOOL FOR STRUCTURAL NMR

A. Shekhtman*

1. Introduction

Structural analysis of proteins and their complexes comes to the forefront of the efforts to gain comprehensive knowledge of biological processes within the cell [1–3]. Protein NMR spectroscopy becomes the technique of choice for structural characterization of proteins and their complexes when the molecular weight does not exceed approximately 30 kDa [4, 5]. Though X-ray crystallography remains the gold standard for high-resolution determination of protein structures, the availability of NMR analysis expands the repertoire of structural biology to include flexible and otherwise non-crystallizable structural targets, such as multi-domain systems where separate domains are connected by flexible linkers [6–8]. The ability of NMR spectroscopy to characterize the dynamics of these systems on multiple timescales at atomic resolution is unique among spectroscopic methods and can provide necessary insights into the biological function of the corresponding molecules [4, 9].

The barrier for the application of NMR spectroscopy to characterize larger protein targets is the increased spectral complexity of these large proteins and to the significant line-width broadening associated with unfavorable relaxation properties. At the same time, there is a strong need to have a technique which adequately describes the molecular interactions of modular proteins consisting of multi-domain structures. Structural analysis of separate domains from these systems may not be adequate due to the inter-domain and intra-molecular regulatory interactions. Multi-domain proteins created through genetic shuttling are very common, especially, in eukaryotic systems [10]. Usually, the molecular weight of a single protein domain is about 10 kDa [7]. Thus, multi-domain proteins are difficult NMR targets due to their increasingly large molecular weight. Newly developed NMR techniques based on transverse relaxation optimized (TROSY) methodology significantly alleviates problems related to the increased line-width of the NMR signals and makes it possible to work with proteins and protein complexes of molecular weights beyond 100 kDa [11].

Although observable, NMR signals from the large proteins exhibit extreme spectral overlap, which cannot be resolved even in three- or four-dimensional NMR spectra [12]. The way to decrease structural complexity is to use samples where only few amino acids are labeled with NMR active nuclei, thus, editing out signals from the rest of the molecule [13]. Though powerful, this approach is limited because of the semi-uniform distribution of specific amino acids within the primary structure of proteins, which leads to the inability to obtain sequence specific information without highly non-trivial resonance assignments.

Expressed protein ligation presents a very valuable addition to the existing repertoire of protein over-expression technologies for NMR sample preparation [14–16].

* The State University of New York at Albany, USA.

It allows one to isotopically label part of the full-length protein leaving the rest of the protein cryptic. This approach dramatically decreases the spectral complexity of the NMR data since isotope edited NMR experiments leave only resonances originating from the isotopically labeled segment of the protein. Segmental labeling can be used both to expand structural NMR characterization of the proteins to much larger sizes and to obtain highly specific information about protein structure using the labeled segment as a chemical probe. Segmental labeling has successfully been used to study by NMR diverse modular systems such as the SH3-SH2 domains from abl kinase [17], the bacterial σ^A factor [18] and the Gyrase intein system [19].

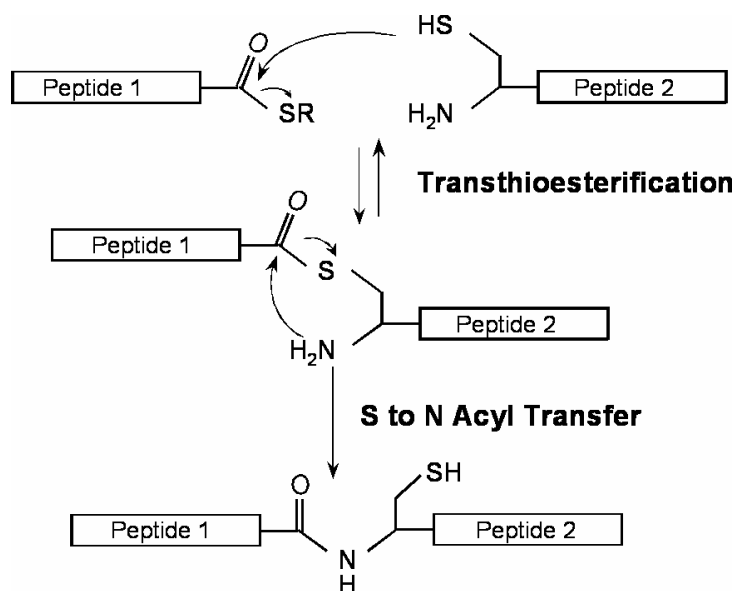


Fig. 1. General mechanism of protein chemical ligation

2. Method

The general methodology of expressed protein ligation is based on the reaction between the C-terminal thioester of the N-terminal segment of the protein and the N-terminal cysteine residue of the C-terminal segment [20, 21] (Fig. 1). The critical issue for the sample construction is the position of the ligation site, which is usually chosen in a loop region not involved in the biological activity of the protein. This minimizes the introduction of any possible structural change at the ligation site and, more importantly, reduces the possibility to affect the biological function of the protein. The reaction is mild enough to be performed under native conditions when one or both precursor fragments are folded [15]. The C-terminal α -thioester can be produced using either solid phase peptide synthesis or bacterially over-expressed protein-intein fusion precursor with subsequent intein cleavage [16].

The total synthesis of peptides is well developed and provides essentially complete control over the regio- and stereospecific placement of isotopic labels within the peptidic structure. It is essential to use this method if information about selected bonds in a full-length protein is needed. It works well when the synthetic product does not exceed about 3 kDa. The economies and time-scales of such synthesis essentially preclude routine use of this technique for synthesis of larger peptidic fragments.

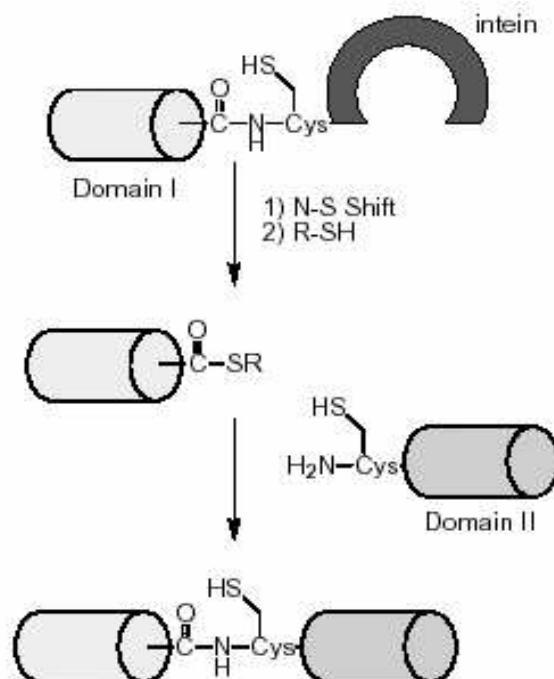


Fig. 2. General mechanism of expressed protein ligation using intein fusion construct

The intein-based technique to generate polypeptide C-terminal α -thioesters was proposed and shown to work on various systems [16]. It is based on genetically engineered inteins to release the N-terminal extein of the N-extein-intein fusion with a C-terminal α -thioester group. The intein cleavage reaction is very robust and is accomplished using thiol containing compounds, such as ethanethiol and 2-mercaptoethanesulfonic acid (MESNA).

The N-terminal cysteine-containing fragment of the ligation reaction (Fig. 2) can be created using either factor Xa protease to release the final product from a specific fusion system or mutated inteins which release the N-terminal cysteine segment. Both methods are proven to be effective and can be interchangeably used to generate the desired product [15].

Either one or two domains of the full-length proteins can be separately labeled with an NMR active nuclei using EPL. The general issues of isotopic labeling for NMR are well known. Molecular size consideration dictates extensive use of deuteration to alleviate line broadening associated with proton-proton relaxation in large molecular systems. The reduced proton (REDPRO) approach [22] of isotopic labeling provides a useful trade-off between the need for proton density to obtain structural information using NMR and requirement of isolated protons to eliminate proton-proton relaxation. The REDPRO procedure has the potential for applications which include structural determination, mapping of chemical shift changes, and for the study of higher molecular weight cases.

3. Applications

Expressed protein ligation has been successfully used to characterize diverse multi-domain systems such as the abl SH32 dual domain system [17] and bacterial sigma factor [18] using NMR spectroscopy. A semi-synthetic approach to EPL was also used to characterize an unusual scissile bond between the N-extein and intein [19].

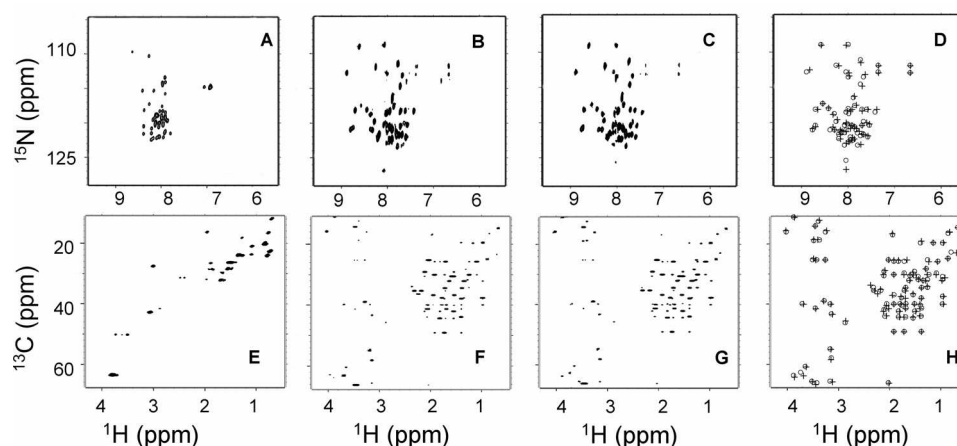


Fig. 3. Effect of the molecular context on the solution structure of bacterial sigma factor region 4.2. (A-C) $^1\text{H}\{^{15}\text{N}\}$ HSQC-TROSY spectra of isolated region 4.2 (A), region 4.2 in the context of full-length bacterial sigma factor (B), region 4.2 in the context of bacterial sigma factor without region 1.1 (C); (E-G) $^1\text{H}\{^{13}\text{C}\}$ HSQC spectra of isolated region 4.2 (E), region 4.2 in the context of full-length bacterial sigma factor (F), region 4.2 in the context of bacterial sigma factor without region 1.1 (G); (D and H) Comparison of the reconstructed $^1\text{H}\{^{15}\text{N}\}$ HSQC-TROSY and $^1\text{H}\{^{13}\text{C}\}$ HSQC spectra of the truncated bacterial sigma factor (circles) and full-length bacterial sigma factor (crosses), using chemical shifts extracted from individual spectra (B, C and F,G)

Bacterial sigma-factor binds to the RNA polymerase to form a holoenzyme competent for DNA transcription [23]. RNA polymerase itself does not bind to the promoter DNA region and completely relies on sigma-factor for DNA recognition. Para-

doxically, sigma-factor alone does not bind to DNA due to autoinhibition [24]. It was shown that the small acidic N-terminal domain Region 1.1 regulates binding of the C-terminal Region 4.2 of sigma factor to the DNA promoter region. It was hypothesized that Region 1.1 obstructs the DNA binding surface of region 4.2, thus preventing its interaction with DNA [25]. Using EPL segmental labeling, two constructs were created [18]. One construct was a full-length sigma factor with REDPRO labeled domain 4.2 and domains 1 through 4.1 unlabeled. The second construct was truncated form of sigma factor consisting of unlabeled domains 1.2 through 4.1 and REDPRO labeled 4.2. NMR spectra of the backbone amide protons and side-chains showed no significant change in chemical shifts between the two constructs (Fig. 3). Due to the exquisite sensitivity of the NMR chemical shift to the changes in the chemical environment, it was concluded that there is no direct interaction between domains 1.1 and 4.2. A new model of indirect, electrostatic interaction between domains 1.1 and 4.2 was proposed. Essentially, this study used segmental labeling to create a sequence specific probe of the tertiary structure of the protein without absolute need for laborious NMR resonance assignments. Semi-synthesis of a segmental isotopically labeled protein and NMR was used to decipher the mechanism of intein splicing autocatalysis [19].

The critical issue of the intein splicing reaction is the conformation of the scissile protein bond between the N-extein and the intein. Crystallographic studies found significant conformational heterogeneity in the scissile (-1) peptide bond ranging from normal *trans* [26, 27], distorted *trans* [28] and *cis* [29] conformation. NMR chemical shifts and the scalar coupling constant $^1J_{NC}$ are exquisitely sensitive to peptide bond conformation [30] and have been used to probe the conformation of the scissile (-1) peptide bond in the small intein *Mxe* GyrA. A N-extein containing a ^{13}C labeled C-terminal carbonyl was synthesized using Boc-SPPS [31]. It was chemically ligated to the [U- ^{15}N] wild type intein, *Mxe* GyrA as well as the [U- ^{15}N] inactive mutant GyrA(H75A), thus, creating a unique ^{13}C - ^{15}N bond between the extein and intein. Using isotope edited NMR experiments [32], the scalar coupling constant $^1J_{NC}$ of the labeled scissile bond was extracted from wild type and mutant GyrA. The significant difference in the coupling constant between the wild type N-extein-GyrA and inactive mutant N-extein-GyrA(H75A) suggests a distorted *trans* bond at the extein-intein junction existing in solution. Since twisted amide bonds are known to be significantly more susceptible to alkaline hydrolysis, this study supports the “ground-state destabilization” model as a part of the mechanism of autocatalysis [19].

4. Conclusions

Expressed protein ligation provides a unique opportunity to obtain structural high-resolution information about chemically defined segments of large proteins and protein complexes using NMR spectroscopy. It complements recently developed transverse relaxation optimized (TROSY) based NMR techniques to provide NMR windows into molecular masses of 100 kDa and more. Combination of semisynthesis and expressed protein ligation creates new possibilities of analyzing unusual electron configurations within full-length proteins using NMR observables.

References

1. *Burley S. K., Bonanno J. B.* // *Methods Biochem. Anal.* 2003. Vol. 44. P. 591.
2. *Christendat D., Yee A.* et al. // *Prog. Biophys. Mol. Biol.* 2000. Vol. 73. P. 339.
3. *Koonin E. V., Wolf Y. I., Karev G. P.* // *Nature.* 2002. Vol. 420. P. 218.
4. *Cavanagh J., Fairbrother W. J.* et al. // *Protein NMR Spectroscopy: Principles and practice.* San Diego, 1996. P. 1.
5. *Montelione G. T., Zheng D.* et al. // *Nat. Struct. Biol.* 2000. Vol. 7. P. 982.
6. *Bax A., Kontaxis G., Tjandra N.* // *Methods Enzymol.* 2001. Vol. 339. P. 127.
7. *Cowburn D.* // *J. of Cellular Biochemistry.* 1995. P. 24.
8. *Fushman D., Cowburn D.* // *Biological Magnetic Resonance.* New York. 2003. P. 20, 53.
9. *Palmer A. G., Grey M. J., Wang C.* // *Methods Enzymol.* 2004.
10. *Gerstein M., Lin J., Hegyi H.* // *Pac. Symp. Biocomput.* 2000. P. 30.
11. *Riek R., Pervushin K., Wuthrich K.* // *Trends Biochem. Sci.* 2000. Vol. 25. P. 462.
12. *Salzmann M., Pervushin K.* et al. // *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 1998. Vol. 95. P. 13585.
13. *Matthews S.* // *Methods Mol. Biol.* 2004. Vol. 278. P. 35.
14. *Cowburn D., Muir T. W.* // *Nuclear Magnetic Resonance of Biological Macromolecules.* 2001. Vol. 339. P. 41.
15. *Cowburn D., Shekhtman A.* et al. // *Methods Mol. Biol.* 2004. Vol. 278. P. 47.
16. *Muir T. W.* // *Annu. Rev. Biochem.* 2003. Vol. 72. P. 249.
17. *Xu R., Ayers B., Cowburn D., Muir T. W.* // *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A.* 1999. Vol. 96. P. 388.
18. *Camarero J. A., Shekhtman A.* et al. // *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A.* 2002. Vol. 99. P. 8536.
19. *Romanelli A., Shekhtman A.* et al. // *Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A.* 2004. Vol. 101. P. 6397.
20. *Dawson P. E., Kent S. B.* // *Annu. Rev. Biochem.* 2000. Vol. 69. P. 923.
21. *Dawson P. E., Muir T. W.* et al. // *Science.* 1994. Vol. 266. P. 776.
22. *Shekhtman A., Ghose R.* et al. // *FEBS Lett.* 2002. Vol. 524. P. 177.
23. *Severinova E., Severinov K.* et al. // *J. Mol. Biol.* 1996. Vol. 263. P. 637.
24. *Gross C. A., Chan C.* et al. // *Cold Spring Harb Symp. Quant. Biol.* 1998. Vol. 63. P. 141.
25. *Dombroski A. J., Walter W. A., Gross C. A.* // *Genes Dev.* 1993. Vol. 7. P. 2446.
26. *Ding Y., Xu M. Q., Ghosh I.* et al. // *J. Biol. Chem.* 2003. Vol. 278. P. 39133.
27. *Mizutani R., Nogami S.* et al. // *J. Mol. Biol.* 2002. Vol. 316. P. 919.
28. *Poland B. W., Xu M. Q., Quioco F. A.* // *J. Biol. Chem.* 2000. Vol. 275. P. 16408.
29. *Klabunde T., Sharma S.* et al. // *Nat. Struct. Biol.* 1998. Vol. 5. P. 31.
30. *Juranic N., Moncrieffe M. C.* et al. // *J. Am. Chem. Soc.* 2002. Vol. 124. P. 14221.
31. *Schnolzer M., Alewood P.* et al. // *Int. J. Pept. Protein Res.* 1992. Vol. 40. P. 180.
32. *Konrat R., Muhandiram D. R.* et al. // *J. Biomol. NMR.* 1997. Vol. 9. P. 409.

БЕЛКОВОЕ ХИМИЧЕСКОЕ ЛЕГИРОВАНИЕ КАК ЭФФЕКТИВНЫЙ ИНСТРУМЕНТ ДЛЯ СТРУКТУРНОГО ЯМР

А. Шехтман

В работе сделан обзор последних приложений метода белкового легирования для ЯМР исследований структуры протеинов и протеиновых комплексов. Эта уникальная методология позволяет создавать химерные белки, которые имеют определенные химические сегменты, помеченные ЯМР активными ядрами (^{15}N и ^{13}C), оставляющие без изменений белковые свойства. Этот метод приводит к существенному сокращению спектральной сложности ЯМР и открывает новые возможности для анализа структур и структурных взаимодействий очень больших (>100 к а. е. м.) биологических молекул и биологических механизмов.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОНТЕ-КАРЛО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ ДОЗОВЫХ НАГРУЗОК НА ОРГАНЫ И ТКАНИ ПАЦИЕНТА ВО ВРЕМЯ РЕНТГЕНОЛОГИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

С. А. Кутень, А. А. Хрущинский, В. Ф. Миненко*, Т. С. Кухта*

В настоящее время широкое применение для целей дозиметрии рентгенологических исследований в медицине приобрели численные методы расчета переноса ионизирующего излучения, в частности метод Монте-Карло [1]. Это было обусловлено бурным развитием вычислительной техники и созданием весьма эффективных программных продуктов, таких как EGS [2], MCNP [3] и MCNPX [4]. Для работы названных программных продуктов требуются такие исходные данные для расчета дозы в теле человека, как модель объекта облучения и модель источника рентгеновского излучения.

Настоящая работа посвящена моделированию источника рентгеновского излучения и созданию программы оценки дозы облучения различных органов во время типичных рентгенологических исследований (требуемый для таких исследований энергетический диапазон лежит выше 40 кэВ и не охватывает маммографию).

Анализ вопросов, связанных с разработкой эффективной модели спектра рентгеновской трубки для дозовых вычислений, показал, что проблему вычисления дозовых нагрузок на все тело человека и его отдельные органы во время радиологических процедур целесообразно решать в два этапа. На первом этапе рассчитывается распределение дозы для моноэнергетического источника гамма-квантов. На втором этапе проводится свертка моноэнергетического отклика со спектром излучения реального рентгеновского источника. Это разбиение обусловлено исключительно сложностью разработки эффективной модели рентгеновской трубки, справедливой для широкой области изменения более чем десятка параметров, описывающих различные режимы работы рентгеновских аппаратов разного типа.

Таким образом, на первом этапе для заданных геометрических параметров рентгенологической процедуры (расстояние источник-поверхность объекта облучения (РИП), пол облучения, координаты центрации пучка, угол проекции и наклон в вертикальной плоскости, размер фокуса) рассчитываются дозовые распределения $D(r, E)$ для любой выбранной точки r облучаемого объекта при фиксированной энергии источника гамма-квантов E . Предполагается, что испускаемые источником гамма-кванты равномерно распределены по фокусному пятну трубки.

На этапе разработки, в качестве объекта облучения был взят антропоморфный физический фантом типа Алдерсона – Рендо. Фантом просканировали на компьютерном томографе с целью получения его томографических изображений. Томограммы были затем использованы для создания воксельной модели фантома. Дальнейшая работа проводилась с использованием разработанной воксель-

* ГУО БелМАПО, Минск.

ной модели фантома. Соответствующая система координат, принятая при описании фантома Алдерсона – Рендо, показана на рис. 1. Один из вариантов базовой координатной сетки для вычисления объемных дозовых распределений в воксельной модели фантома типа Алдерсона – Рендо (приведен на рис. 2 для сечения $z = 46$ см, соответствующего разрезу на уровне легких). Точками обозначены места локализации детекторов определенного типа. В задаче оценки поглощенной дозы различными тканями при рентгенографических исследованиях разумно выбрать в качестве элементарного детектора точечный детектор MCNP с неаналоговым ускорением набора необходимой статистики. В указанном слое размещено 108 точечных детекторов MCNP.

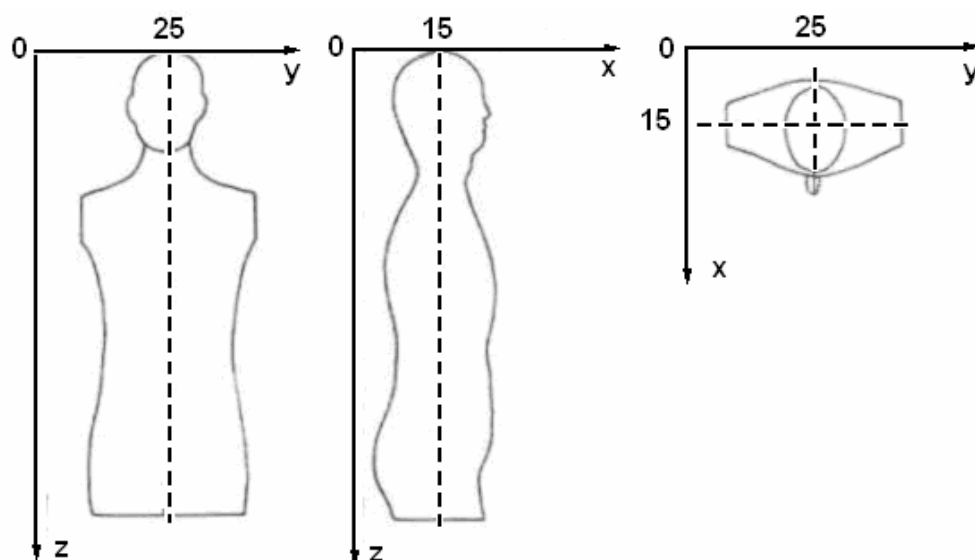


Рис. 1. Система координат для фантома Алдерсона – Рендо

Дискретный шаг в пространстве определяется схемой размещения точечных детекторов MCNP в облучаемом теле.

Выбор шага дискретизации энергетической области определяется спектром рентгеновской трубки, который зависит от анодного напряжения. Этот шаг должен быть подобран таким образом, чтобы воспроизводились все особенности спектра рентгеновской трубки, в частности пики характеристического рентгеновского излучения. Это означает, что для практических целей дискретный шаг в энергетической области должен быть неравномерным – сравнительно большим в области вне пиков характеристического излучения и достаточно мелким в области этих пиков. Окончательный результат для пространственного распределения поглощенной дозы в фантоме будет являться интегральной сверткой моноэнергетического отклика $D(\vec{r}, E)$ с энергетическим спектром $G_0(E)$ рентгеновской установки в ее фокусе:

$$D(\vec{r}) = \int D(\vec{r}, E) G_0(E) dE. \quad (1)$$

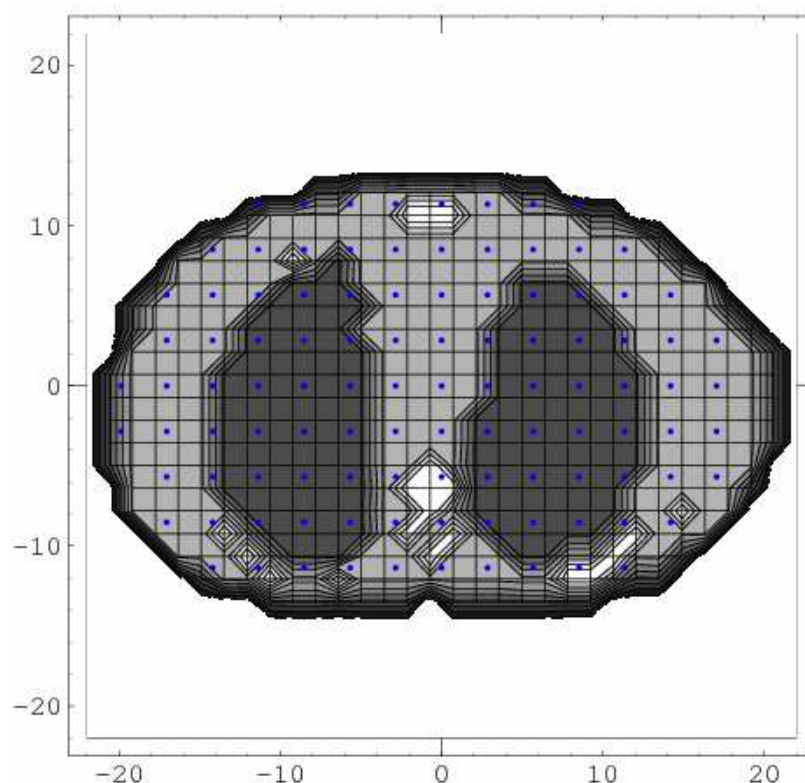


Рис. 2. Один из вариантов базовой координатной сетки для вычисления объемных дозовых распределений в фантоме Алдерсона – Рендо $z = 46$ см (108 точечных детекторов MCNP в слое)

Фактически, в связи с использованием воксельного фантома, дозовые распределения $D(r, E)$ должны быть рассчитаны для сетки точечных детекторов MCNP для параллелепипеда, разбитого на множество объемных вокселей. Пространственное распределение $D(r, E)$ затем используется для расчета соответствующей дозы в выделенном органе.

Несмотря на то что формула (1) в принципе решает задачу вычисления поглощенной дозы в органе от любого источника рентгеновского излучения путем разбиения ее на две части: вычисление дозы от моноэнергетического источника и последующую ее свертку с выбранным модельным спектром рентгеновского аппарата, она оказалась практически неприменимой по техническим причинам. К сожалению, на компьютере с частотой процессора 3 ГГц расчет дозового распределения $D(r, E)$ для моноэнергетического источника с энергией E для одной проекции облучения при фиксированных остальных параметрах длится семь дней. Поэтому в связи с практической невозможностью проведения расчетов с моноэнергетическим источником основное внимание было уделено разработке эффективной модели рентгеновского источника.

1. Физико-математическая модель рентгеновского источника для моделирования работы рентгеновской трубки с учетом ее характеристик

Для моделирования работы рентгеновской трубки с учетом ее характеристик нами была использована «TASMIP»-модель рентгеновской трубки с вольфрамовым анодом, работающей в диапазоне анодных напряжений 30–140 кВ [5]. Наше описание рентгеновского аппарата, основанное на «TASMIP»-модель рентгеновской трубки, в настоящий момент включает следующие параметры:

напряжение на аноде;

- размер и форма фокусного пятна;
- расстояние «источник – поверхность фантома» (РИП);
- поле облучения;
- толщина основного и дополнительного фильтров;
- пульсация анодного напряжения (риплл);
- ток в цепи катод – анод;
- расстояние «источник – формирующее устройство»;
- характеристики формирующего устройства;
- «TASMIP»-модель рентгеновской трубки.

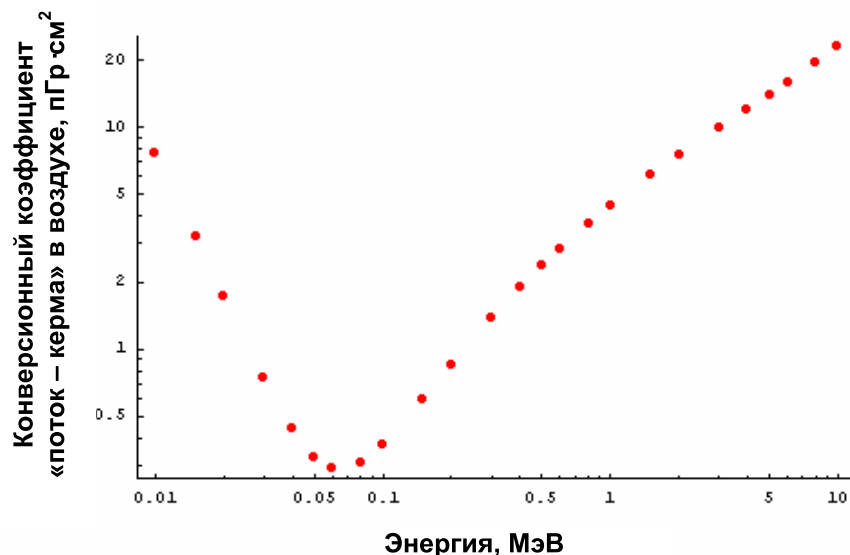


Рис. 3. Энергетическая зависимость конверсионного коэффициента «поток – керма» $F(E)$ в воздухе [2]

Проведена верификация модели рентгеновской трубки путем оценки интенсивности потока излучения и путем расчета дозы. Верификация интенсивности излучения основана на сравнении экспозиционной дозы, создаваемой модельным источником на расстоянии R в воздухе, и измеренной в этой точке аналогичной экспериментальной величиной.

Любой модельный источник рентгеновского излучения оперирует с величиной, близкой к потоку квантов, которую необходимо конвертировать в дозовую величину типа керма. Энергетическая зависимость конверсионного коэффициента «поток – керма» для фотонов в воздухе, взятая из работы [6] (см. рис. 3), проинтерполирована аналитической функцией $F(E)$ (пГр*см²), используемой далее как при верификации интенсивности рентгеновского источника, так и при дозовых расчетах в воздухе.

В модели «TASMIP» число фотонов, испускаемых источником в энергетическом интервале $(E, E+dE)$, $dE = 1$ кэВ за 1 с на расстоянии $R_0 = 100$ см от фокуса, приходящихся на 1 мм² площади и на 1 мА анодного тока при заданном напряжении V и его пульсации (ripple) ζ , дается табулированной функцией $I_0(V, \zeta, E, d)$ (фотон/(мАс*кэВ*мм²)) для заданного фильтра (эквивалентная толщина d мм алюминия). Для примера на рис. 4 приведен спектр рентгеновской трубки в «TASMIP»-модели для параметров трубки $V = 120$ кВ, $\zeta = 0$ в отсутствие фильтра и с типичным фильтром 2.5 мм Al. Пики на рис. 4 соответствуют K-линиям характеристического рентгеновского излучения вольфрамового анода. Мягкое характеристическое рентгеновское излучение L-линий в области 8–11 кэВ для целей рентгеновской диагностики несущественно и не рассматривается в рамках «TASMIP»-модели.

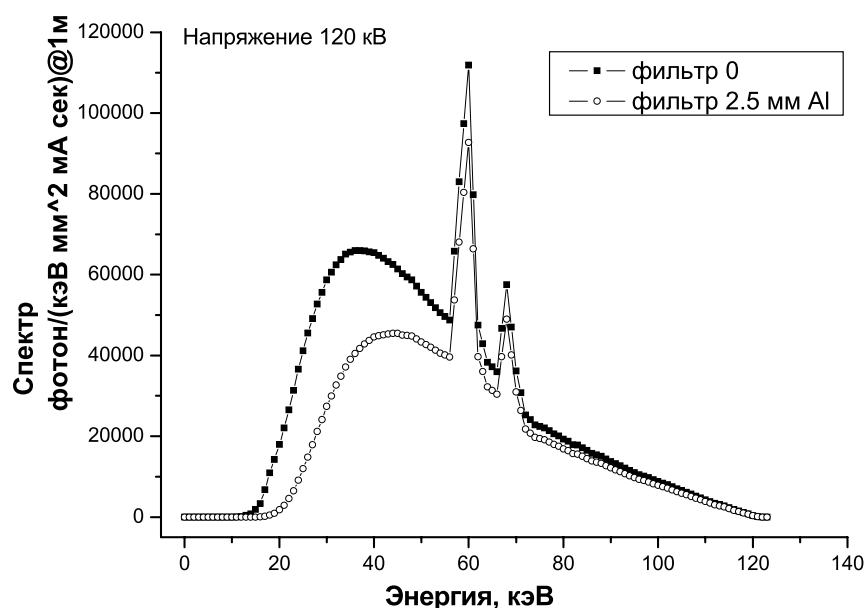


Рис. 4. Энергетический спектр рентгеновской трубки в «TASMIP»-модели для параметров трубки $V=120$ кВ, $\zeta=0$, в отсутствие фильтра $d=0$ и с фильтром $d=2.5$ мм Al

Интегрируя эту функцию источника, фактически являющейся плотностью потока фотонов на расстоянии R_0 от фокуса трубки, с зависящим от энергии конверсионным коэффициентом $F(E)$, мы получим керму в воздухе. Окончательное выражение зависит от выбора единиц измерения кермы. Если ее измерять в мГр, то величина кермы, даваемая «TASMIP» источником на расстоянии R от фокуса и приходящаяся на 1 мАс, будет определяться выражением:

$$K'(V, \zeta, d)(\text{мГр} / \text{мАс}) = 10^{-4} \frac{R_0^2}{R^2} \int_{E_1}^{E_2} I_0(V, \zeta, E, d) F(E) dE, \quad (2)$$

где числовые множители обусловлены согласованием единиц измерения конверсионного коэффициента «поток – керма» и потока в «TASMIP»-модели. E_1 и E_2 – начальная и граничная энергии спектра рентгеновского источника. Первая из них определяется фильтрами аппарата, вторая – анодным напряжением.

Ради краткости назовем величину $K'(V, \zeta, d)$ (мГр/мАс) «удельной» кермой. Зависимость «удельной» кермы от анодного напряжения в модели «TASMIP» имеет параболический характер и приведена на рис. 5 для различной фильтрации на расстоянии 1 м от фокуса в отсутствие пульсации напряжения $\zeta = 0$.

Этому теоретическому значению «удельной» кермы в воздухе может быть поставлен в соответствие аналогичный параметр $K(\mu)$, извлекаемый из экспериментальной зависимости кермы от величины произведения тока трубки на длительность экспозиции в мАс, μ , измеряемой на расстоянии R от фокуса. Как правило, для нормально функционирующих рентгеновских трубок эта зависимость

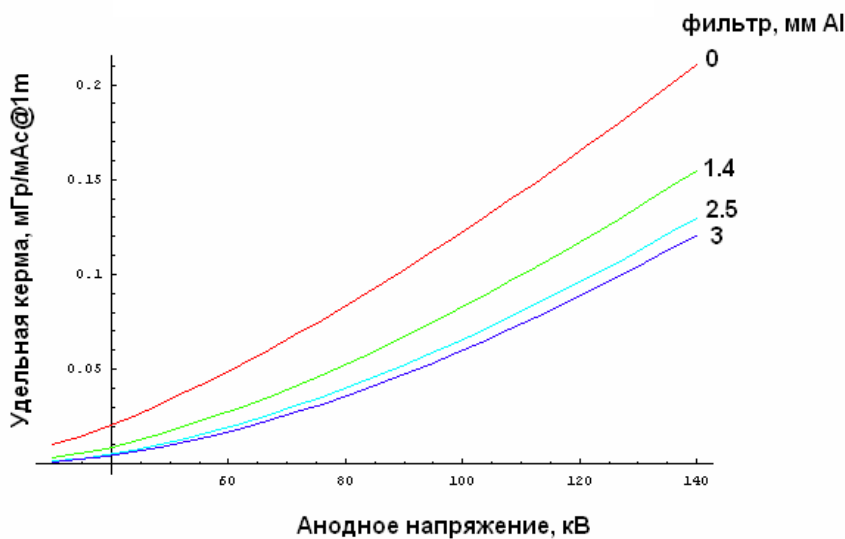


Рис. 5. Зависимость «удельной» кермы (мГр/мАс) от анодного напряжения в модели «TASMIP» при различной фильтрации (нулевой риппл $\zeta=0$)

очень слабо отличается от линейной, и функция $K(\mu)$ может быть аппроксимирована первыми двумя членами своего разложения в ряд Тейлора:

$$K(\mu) = K_0 + K'(0)\mu + 1/2 K''(0)\mu^2, \quad (3)$$

где K_0 – некоторая постоянная, характеризующая трубку. Пример такой экспериментальной зависимости $K(\mu)$ приведен на рис. 6 для рентгеновского аппарата Mevasim при анодном напряжении 85 кВ (РИП = 100 см, поле облучения 5 см × 5 см). Здесь же представлен результат сглаживания (фитирования) ее параболой:

$$K(x) = -0.0158 + 0.0375x - 8.6556 \cdot 10^{-7} x^2.$$

Нелинейность параметра $K(\mu)$, определяемая вторым членом (3), чрезвычайно мала.

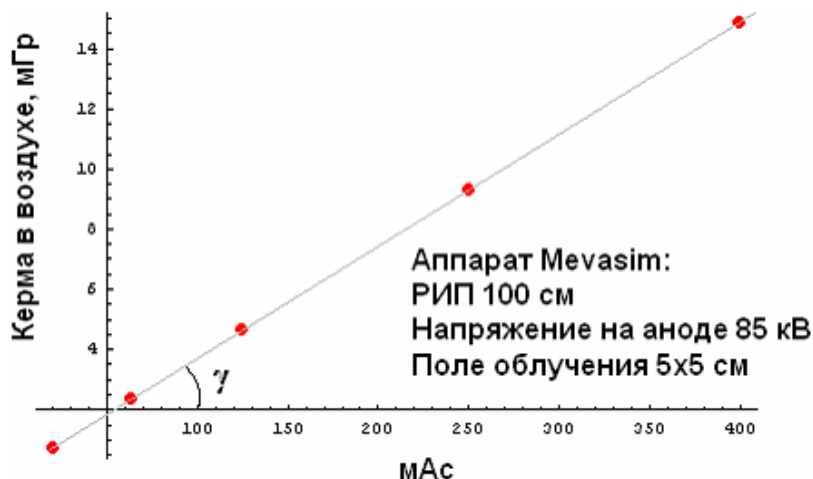


Рис. 6. Экспериментальная зависимость «воздушная керма – МАс» для рентгеновского аппарата Mevasim

При корректном описании работы рентгеновской трубки модельным источником «TASMIP» величина $K'(V, \zeta, d)$ (1) должна совпадать с производной $K'(0) = \left. \frac{dK}{d\mu} \right|_{\mu=0}$ или с тангенсом угла $tg\gamma$ наклона экспериментальной характеристики $K(\mu)$:

$$K'(V, \zeta, d) = tg\gamma = K'(0) \quad (4)$$

Одна из верификаций интенсивности в модели «TASMIP» рентгеновской трубки основана на проверке равенства (4) для различных режимов работы трубки.

Следует отметить, что хорошо себя зарекомендовавшая для дозиметрических расчетов полуэмпирическая модель «TASMIP» рентгеновской трубки основана на анализе экспериментальных данных для конкретной рентгеновской трубки с вольфрамовым анодом [5].

2. О влиянии пульсаций анодного напряжения

Пульсации анодного напряжения (или риппл) количественно характеризуются риппл-фактором (RF) вида:

$$RF = \frac{V_{\max} - V_{\min}}{V_{\max}} 100 \%, \quad (5)$$

где $V_{\max}$ и $V_{\min}$ – максимальное и минимальное значение анодного напряжения соответственно.

Самый значительный эффект от наличия пульсаций напряжения, типичные значения которого составляют $RF \sim 5 - 10 \%$ [7], по-видимому, все же заключается не в энергетическом перераспределении поглощения излучения в фантоме, а в относительном уменьшении радиационного выхода источника при наличии риппла. Это видно из рис. 7, где приведены спектры «TASMIP»-источника в отсутствие и при наличии риппла для напряжения 80 кВ при отсутствии фильтрации и для типичного фильтра 2.5 мм. Наличие риппла практически не изменяет положение максимума спектра, но заметно уменьшает его амплитуду, и как следствие, интенсивность излучения, в грубом приближении пропорциональную площади под спектром. Количественно уменьшение площади под спектром зависит от фильтрации.

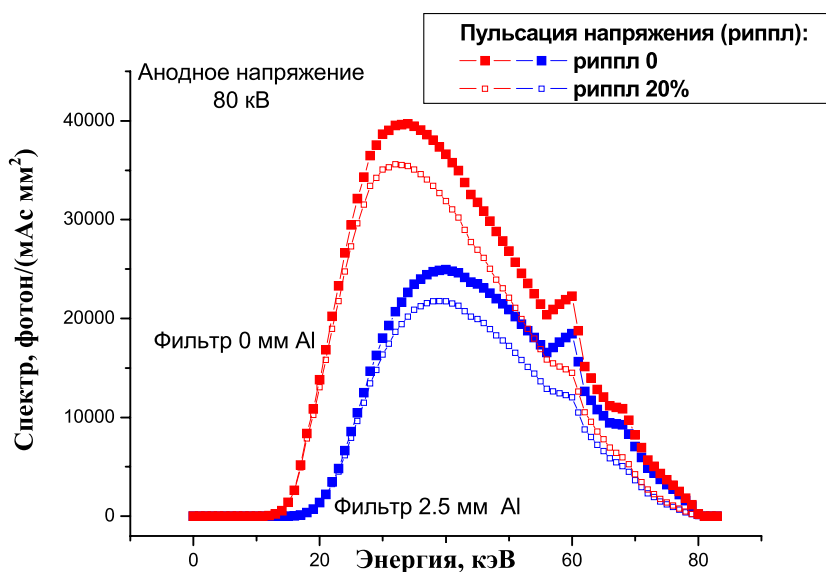


Рис. 7. Влияние риппла на форму спектра излучения для «TASMIP»-источника (анодное напряжение 80 кВ)

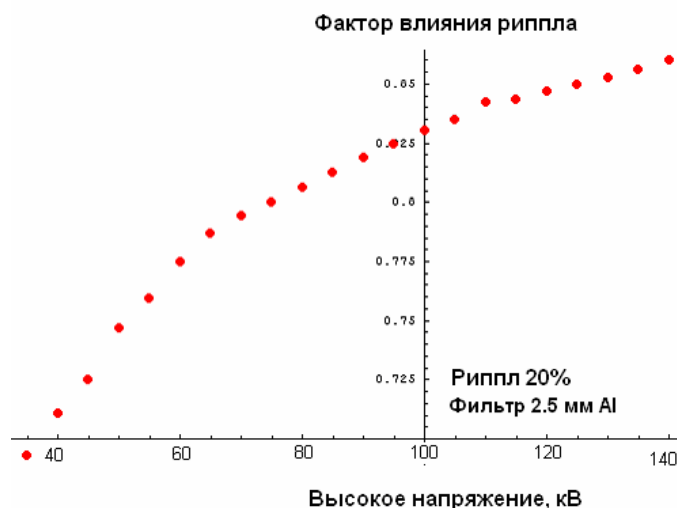


Рис. 8. Фактор влияния риппла в зависимости от напряжения для «TASMP»-источника рентгеновского излучения

В первом приближении, считая радиационный выход пропорциональным площади под спектром, можно дать оценку относительного уменьшения радиационного выхода источника из-за риппла. Такие данные приведены в табл. 1 при риппле 20 % (высокое напряжение 80 кВ) для разной фильтрации.

Таблица 1

Оценка относительного уменьшения радиационного выхода источника из-за наличия риппла для типичного анодного напряжения 80 кВ

Фильтрация, мм Al	0	2.5	4	6
Относительное уменьшение радиационного выхода источника при риппле 20 % (высокое напряжение 80 кВ)	16.7 %	19.3 %	20.5 %	21.9 %

Вводя фактор влияния риппла как отношение площадей под спектром при наличии и в отсутствие риппла, можно получить зависимость влияния риппла от напряжения. Для типичного фильтра 2.5 мм Al такая зависимость приведена на рис. 8 для «TASMP»-источника при риппле 20 %.

В целом в первом приближении можно считать, что риппл сводится к уменьшению радиационного выхода на 20–30 %. Более точные оценки для изменения радиационного выхода требуют, как было показано выше, привлечения энергетической зависимости конверсионного коэффициента «поток – керма» $F(E)$ в воздухе.

3. Результаты верификации в модели «TASMP» для различных типов рентгеновских трубок

Существуют различные способы верификации моделей рентгеновского излучателя: керма в воздухе – сравнение теории и эксперимента, расчет F6 функционала в воздухе в рамках MCNP, слой половинного ослабления – сравнение

теории и эксперимента, расчет F5 функционала MCNP для продольного и поперечного распределения поглощенной дозы в водном и тканеэквивалентном фантомах. Результаты верификации интенсивности в модели «TASMIP» для аппарата Mevasim приведены на рис. 9, где показана зависимость удельной воздушной кермы (мГр/мАс) от анодного напряжения. Для удобства приведен также ряд теоретических кривых $K'(V, \zeta, d)(1)$ при различной фильтрации. Напомним, что в соответствии с документацией полный внутренний фильтр аппарата Mevasim соответствует эффективной толщине 2.5 мм Al. Следует отметить, что существует известное смещение понятий при определении точного значения толщины эквивалентного алюминиевого фильтра для конкретной установки. Часто используемые термины «основной» фильтр и «дополнительный» в русско-язычном варианте не совсем соответствуют английским терминам inherent and additional filters. На рис. 9 видно, что если предположить, что установка Mevasim характеризуется суммарным фильтром 3 мм Al, то в целом наблюдается хорошее согласие между рассчитанной и экспериментально измеренной удельной воздушной кермы для разных напряжений. С ростом напряжения различие между ними слегка увеличивается.

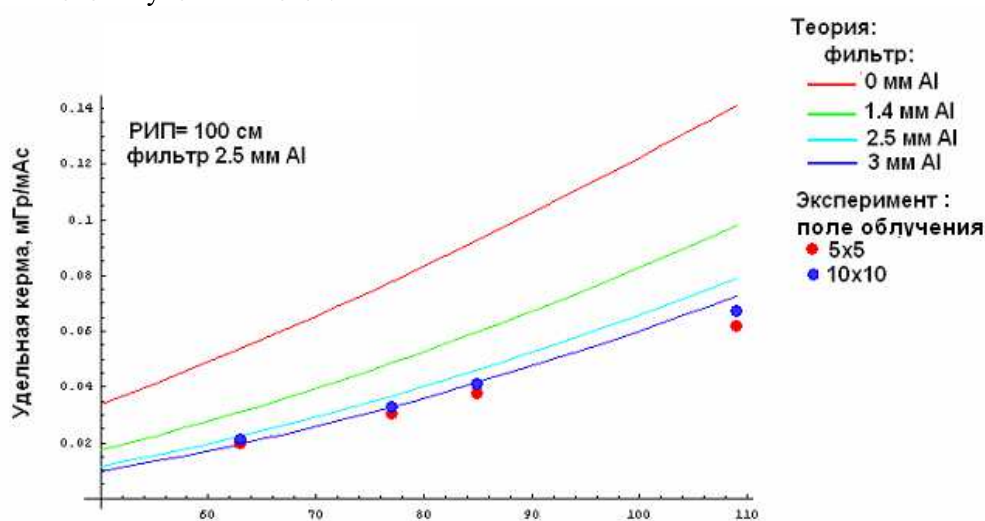


Рис. 9. Сравнение теоретической и экспериментальной зависимости удельной воздушной кермы от анодного напряжения для рентгеновского аппарата Mevasim (РИП 100 см, фильтр 2.5 мм Al)

Приведенная интерпретация показывает реальную возможность коррекции модели рентгеновского источника с целью соответствия ее предсказаний экспериментальным данным конкретной установки. Другая интерпретация этих данных, на наш взгляд, более соответствующая действительности, состоит в том, что мы имеем конкретное различие в предсказанной и измеренной удельной керме, вызванное разными причинами. Отношения теоретически рассчитанной и экспериментально измеренной удельной воздушной кермы для разных напряжений и полей облучения систематизированы в табл. 2 и показаны для удобства на рис. 10 (отношение «теория/эксперимент» ТЕ).

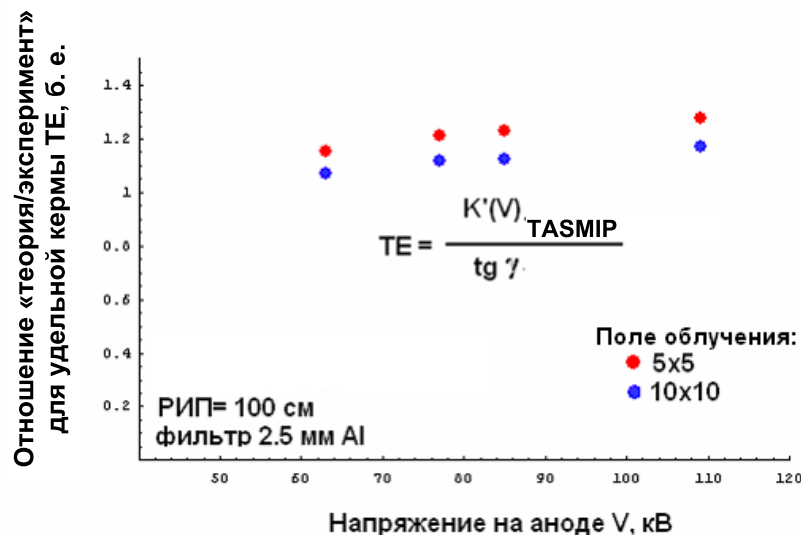


Рис. 10. Отношение «теория/эксперимент» для удельной воздушной кермы (мГр/мАс) для рентгеновского аппарата при различных анодных напряжениях и полях облучения (РИП 100 см, фильтр 2.5 мм Al)

Обратим внимание, что в соответствии с рис. 9, 10, измеренная в воздухе керма на расстоянии РИП = 1 м от источника зависит от поля облучения, хотя такой зависимости в модели «TASMIP» не предусматривается. Физически керма в воздухе определяется только расстоянием до источника и не может зависеть от поля облучения, что и содержится в модели «TASMIP». Однако измерения кермы проводятся на рентгеновской установке с формирующим устройством на некотором расстоянии от него. В этом случае вклад в показания будут давать процессы рассеяния излучения на формирующем устройстве и воздухе.

Таблица 2

Отношение «теория/эксперимент» TE для удельной воздушной кермы (мГр/мАс) для рентгеновского аппарата при различных анодных напряжениях и полях облучения (РИП 100 см, фильтр 2.5 мм Al)

Напряжение на аноде, кВ	Отношение «теория/эксперимент» TE , б. е. $TE = K'(V)_{TASMIP} / tg(\gamma)$			
	63	77	85	109
Поле облучения 5×5 см	1.153	1.214	1.230	1.279
Поле облучения 10×10 см	1.072	1.117	1.126	1.174

Для характеристики эффекта поля облучения при измерении кермы в воздухе на рентгеновском аппарате введем количественный показатель F_{field} – фактор поля облучения, равный относительной разности удельной воздушной кермы для двух полей облучения:

$$F_{field} = \frac{tg(\gamma_1) - tg(\gamma_2)}{tg(\gamma_1)}, \quad (6)$$

где $\gamma_{1,2}$ – угол наклона характеристики «керма – мАс» для двух полей облучения 1 и 2 соответственно.

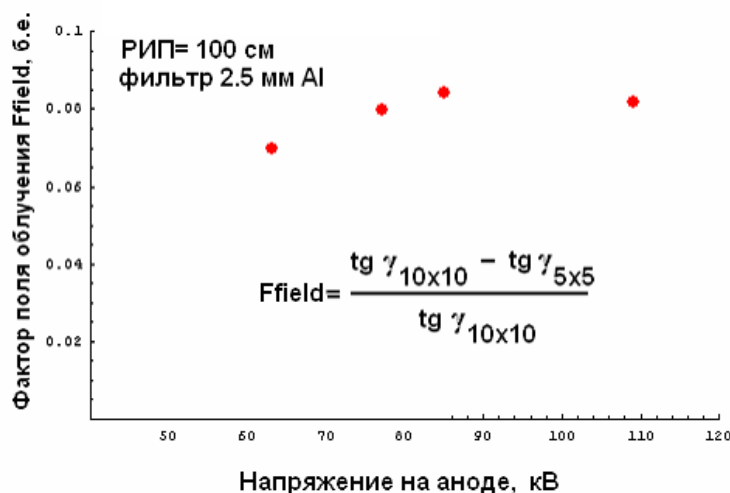


Рис. 11. Зависимость фактора поля облучения для удельной воздушной кермы от анодного напряжения для рентгеновского аппарата Mevasim (РИП 100 см, фильтр 2.5 мм Al)

Зависимость фактора поля облучения F_{field} от анодного напряжения для рентгеновского аппарата Mevasim (РИП 100 см, фильтр 2.5 мм Al) приведена на рис. 11. В среднем он составляет 7–9 % в области напряжений 63–110 кВ. По-видимому, величина F_{field} обусловлена в большей степени процессами рассеяния квантов в воздухе, чем процессами рассеяния их в Pb диафрагме.

Действительно, типичная толщина диафрагмы формирующего устройства составляет порядка 1 мм Pb, что составляет свыше 5 длин свободного пробега фотона в Pb для энергии кванта 63 кэВ. По этой причине рассеяние излучения как таковое сильно подавлено в Pb диафрагме. В то же время длина свободного пробега фотона в воздухе составляет 185 см для энергии 63 кэВ. В этом случае при расстоянии 1 м от источника до детектора (ионизационная камера) процессы рассеяния квантов в воздухе будут давать вклад в показание детектора. Чем больше поле облучения, тем больше воздуха вовлекается в процессы рассеяния, тем больше керма, показываемая прибором. Такое поведение кермы, измеренной в воздухе на рентгеновском аппарате, согласуется с рис. 9–11.

4. О модификации «TASMP»-модели для описания рентгеновских трубок с W-Re анодом

Иллюстративные материалы (см. табл. 2 и рис. 10) свидетельствуют о возрастании отношения «теория/эксперимент» TE для удельной воздушной кермы с ростом напряжения с 15 % при низких напряжениях (63 кВ) до 28 % при высоких напряжениях (109 кВ), причем величина TE больше единицы. Такое расхождение может быть лишь частично компенсировано за счет изменения толщины

фильтра (см. рис. 9). Даже если компенсировать величину TE изменением фильтра на низких энергиях, расхождение останется порядка 10 %. Такое расхождение может быть обусловлено естественными причинами: «TASMIP»-модель описывает спектр рентгеновской трубки с вольфрамовым анодом, в то время как анод в аппарате Mevasim сделан из сплава вольфрама с рением с примесью молибдена и графита. Типичное массовое отношение рения к вольфраму есть 0.1 (оно практически фиксировано, т. к. диктуется различными техническими причинами). Поскольку заряды W и Re практически одинаковы, тормозное излучение, создаваемое 10 % сплавом вольфрама с рением, будет таким же, как и создаваемое 100 % вольфрамом. В то же время амплитуда характеристического излучения, создаваемого 10 % сплавом вольфрама с рением, будет на 10 % меньше амплитуды характеристического излучения от 100 % вольфрама (характеристическое излучение молибдена лежит в низкоэнергетичной области спектра и не представляет интереса для диагностических рентгенологических обследований). По этой причине, чтобы «TASMIP»-модель описывала рентгеновскую трубку с W-Re анодом, амплитуду всех линий характеристического излучения (линии W) в «TASMIP»-модели необходимо уменьшить на 10 %.

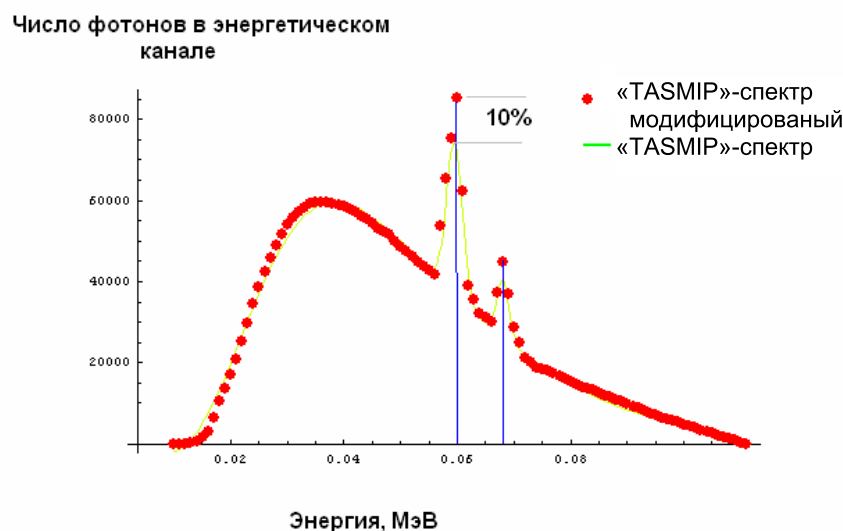


Рис. 12. Модификация «TASMIP»-модели для рентгеновской трубки с W-Re анодом

Пример такой модификации спектра «TASMIP»-источника показан на рис. 12 для напряжения 109 кВ. Для этого форма спектра представлялась в аналитическом виде посредством фитирования его с помощью двух гауссианов, описывающих характеристическое излучение вольфрама, и подставки типа импульса с затянутым задним фронтом. Последний может быть описан различными математическими полиномиальными представлениями. В данном случае подставка хорошо описывается логнормальным распределением. В модифицированном спектре амплитуды обоих пиков уменьшены на 10 %.

Для отработки вопросов, связанных с верификацией модели рентгеновской трубки при расчетах глубинных распределений поглощенной дозы в водном и тканеэквивалентных фантомах, разработана программа автоматической генерации входного файла в коде MCNP. В коде MCNP проведены вычисления мощности поглощенной дозы на глубинах 2, 5, 10, 15, 22, 26 см в водном фантоме при различных напряжениях на аноде и различных полях облучения с точностью от 0.5 % до 2.5 %. Сравнение экспериментального значения мощности поглощенной дозы, создаваемой рентгеновской трубкой OPTILIX в водном фантоме, с расчетной величиной, основанной на «TASMIP»-модели рентгеновской трубки, показывает их совпадение на глубине 10 см в пределах ошибки измерений для всего диапазона анодных напряжений 63–109 кВ (диапазон имеющихся измерений).

Сравнение как удельной кермы в воздухе, так и глубинных распределений мощности поглощенной дозы в водном фантоме, даваемых другими типами рентгеновских трубок, требует отдельного обсуждения. В целом соответствующие расчеты выполнены для трех типов рентгеновских трубок.

5. Определение доз облучения в органах

В принципиальном плане определение дозовых нагрузок на орган не сильно отличается от определения его объема. Схематично объем в одном слое определяется характерным сечением в данном слое и высотой слоя. При расчете площади контура, используя метод накопленной фазы, суммируются все центры прямоугольников внутри контура. Суммирование прямоугольников (их центров) происходит с единичным весом (все прямоугольники эквивалентны между собой). При расчете дозовой нагрузки на какой-либо слой органа, указанные прямоугольники должны суммироваться с весом, равным значению дозы в данной точке (центр прямоугольника), полученной в результате MCNP вычислений с решеткой точечных детекторов. В общем случае шаг на сетке прямоугольников не обязан совпадать с шагом решетки точечных детекторов (шаг MCNP вычислений). В таком случае мы будем вынуждены проводить интерполяцию MCNP результатов, чтобы получить их величины в центрах прямоугольников. В первом приближении в качестве шага на сетке прямоугольников можно использовать шаг MCNP решетки. Тогда подсчитывая точки внутри контура с соответствующими весами, получим дозовую нагрузку на данный слой органа. Суммируя их по слоям с соответствующим элементарным объемом (элементарный объем в MCNP решетке), получим дозу на орган размерности $\text{доза} \times \text{объем}$. В итоге, разделив полученную величину на объем органа, получим среднюю дозовую нагрузку на орган.

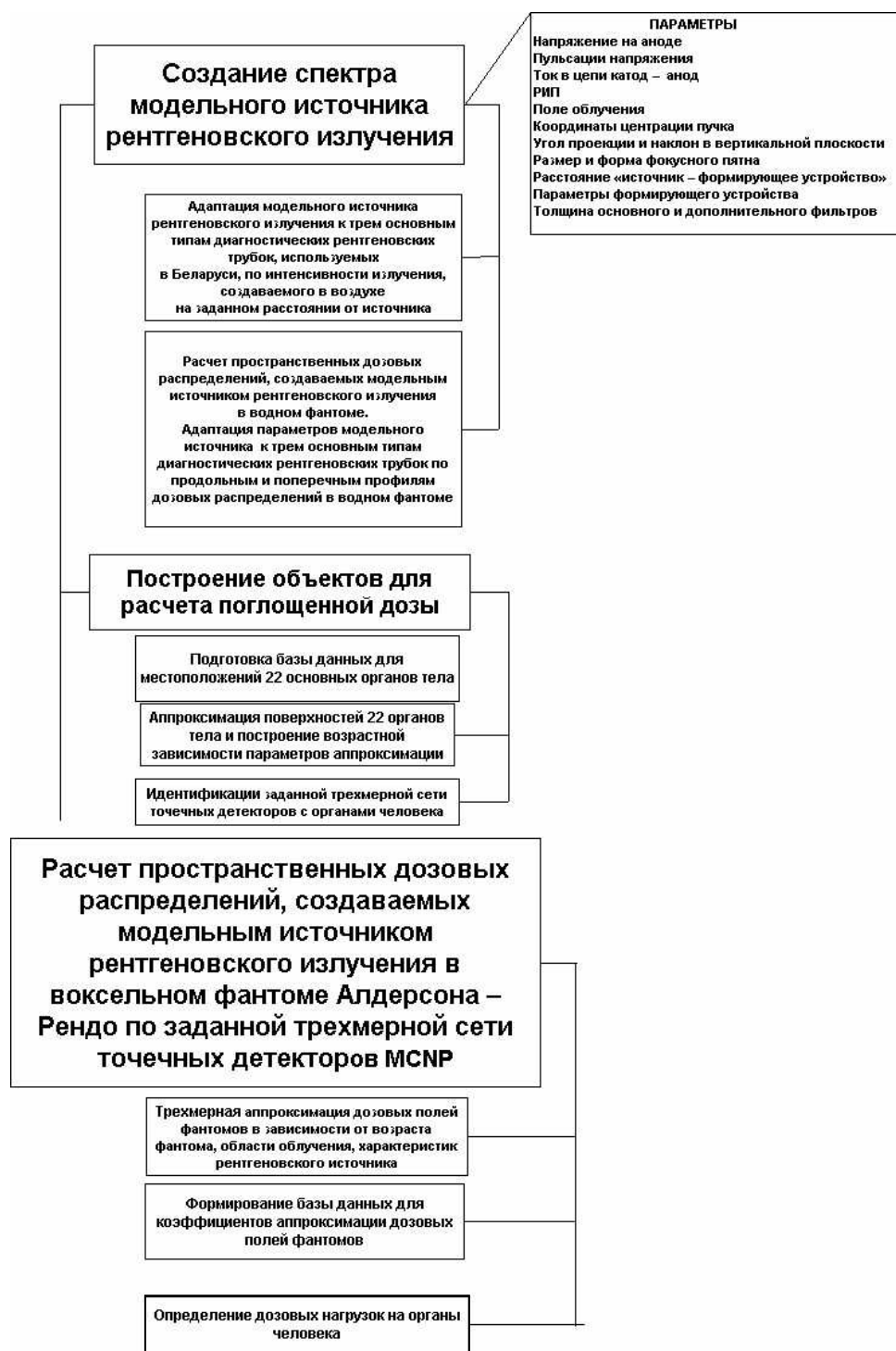


Рис. 13. Блок-схема алгоритма определения доз облучения в органах и тканях пациента

Оказалось, что такая процедура эффективно работает для больших органов, в отдельный слой которого попадает хотя бы одна точка MCNP решетки. Для малых органов типа тимуса, сам орган целиком лежит внутри одной полосы MCNP решетки, т. е. в него не попадает ни одна точка из этой решетки. В этом случае отыскиваются ближайшие к центру органа (или центру его ветви, если орган в слое состоит из нескольких ветвей как для тимуса или щитовидной железы) в данном слое MCNP результаты и производится их двумерная интерполяция на центр ветви или центр органа. Основанием для элемента объема в этом случае служит площадь контура ветви или органа.

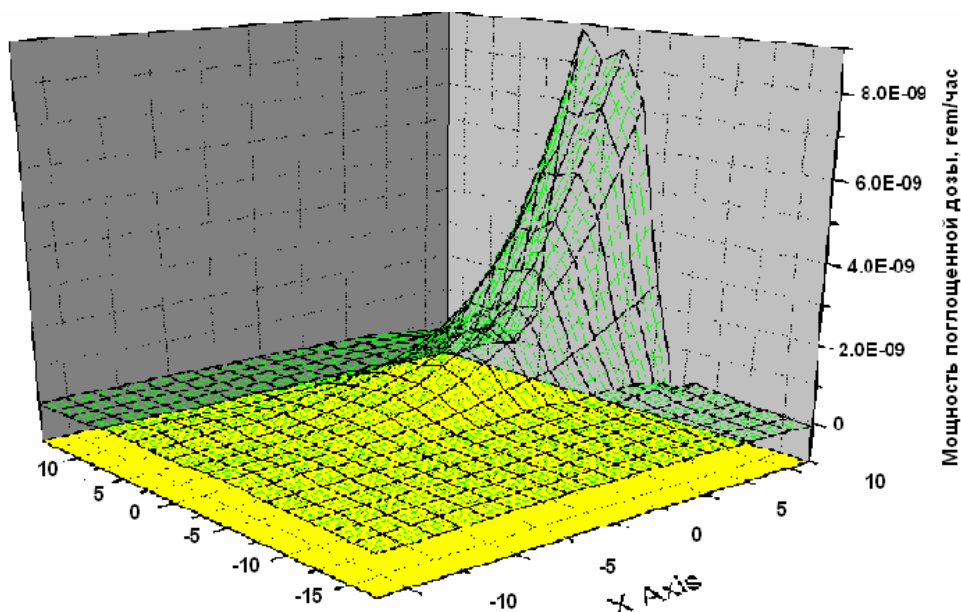


Рис. 14. Распределение мощности эквивалентной дозы (сЗв/ч) в слое $z = 46$ см в фантоме Алдерсона – Рендо для «TASMIP»-модели рентгеновской трубки (РИП 75 см, напряжение 109 кВ, поле облучения 10×10 см, фильтр 2.5 мм Al)

6. Алгоритм определения доз облучения в органах и тканях пациента в зависимости от характеристик источника излучения

Изложенное выше составляет основу алгоритма определения доз облучения в органах и тканях пациента в зависимости от характеристик источника излучения. Обобщенная блок-схема алгоритма определения доз облучения в органах и тканях пациента с учетом параметров источника приведена на рис. 13. В соответствии с вышесказанным алгоритм определения доз облучения в органах и тканях пациента состоит из трех основных блоков:

- создание спектра модельного источника рентгеновского излучения;
- построение объектов для расчета поглощенной дозы;

- расчет пространственных дозовых распределений, создаваемых модельного источника рентгеновского излучения в воксельном фантоме Алдерсона – Рендо по заданной трехмерной сети точечных детекторов MCNP;
- блок непосредственного расчета дозовых нагрузок на органы.

На рисунках 14 и 15 приведено распределение мощности эквивалентной дозы (сЗв/ч) в показанном на рис. 1 слое $z = 46$ см фантома Алдерсона – Рендо для «TASMP»-модели рентгеновской трубки, выполненное посредством Монте-Карло моделирования процессов переноса излучения в фантоме.

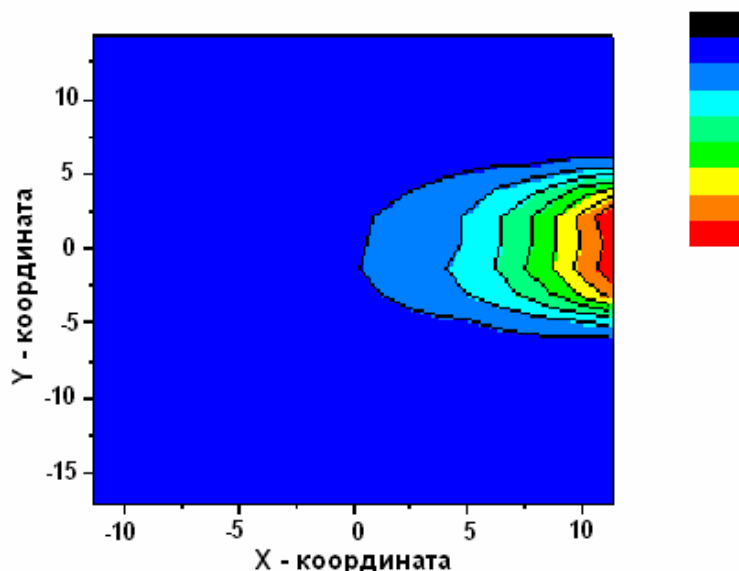


Рис. 15. Контурное распределение мощности эквивалентной дозы (сЗв/ч) в слое $z = 46$ см в фантоме Алдерсона – Рендо для «TASMP»-модели рентгеновской трубки (РИП 75 см, напряжение 109 кВ, поле облучения 10×10 см, фильтр 2.5 мм Al)

7. Определение дозовых нагрузок на пациентов с различными физиологическими данными

Изменение алгоритма и соответствующих программ для пациентов различного возраста производится в соответствии с методикой [8, 9]. Исходный фантом Алдерсона – Рендо с критическими органами преобразуется новый фантом в зависимости от роста и веса пациента с новыми размерами по методике [8, 9].

В соответствии с [8, 9], в работе используется соотношение между весом и ростом пациента и размером области таза, талии и торса пациента, характерное для жителей Беларуси. Аналитически коррекция стандартного фантома производится методом подбора линейной зависимости размеров тела от веса и роста. Преобразование контуров тела и органов в зависимости от веса и роста производится в следующей последовательности:

1) пропорциональное увеличение (уменьшение) расстояния между слоями;
 2) вычисление на основе линейной зависимости стандартного веса от роста определяются весовая категория пациента (избыточный вес, стандарт, недостаточный вес);

3) для стандартного пациента производится послойная коррекция тела и органов пропорционально отлнчнй роста от стандарта;

4) для пациента с избыточным весом производится дополнительная коррекция контура тела с использованием уравнений регрессии, определяющих зависимость увеличения размеров торса, талии и таза в зависимости от избыточного веса. Внутренние органы в этом случае дополнительно не корректируются, предполагая, что увеличение размеров тела и веса происходит за счет жировой ткани;

5) для пациента с недостаточным весом производится одновременная коррекция контуров тела и внутренних органов по аналогичной зависимости;

6) зависимость размеров тела от веса и роста используется отдельно для мужчины и женщины;

7) область бюста и таза в базовом фантоме различны для мужчины и женщины.

Вышеописанные изменения для пациента с другими, нежели у стандартного фантома Алдерсона – Рендо, характеристиками требуют перестройки самого воксельного фантома и соответственно новой решетки MCNP детекторов. Хотя алгоритм и реализован в программе Mathematica, соответствующие MCNP расчеты не проводились по причине их исключительной трудоемкости даже для стандартного фантома.

8. Тестирование и верификация разработанного программного пакета

Верификация разработанного программного пакета проводилась двумя путями. Было проведено сравнение результатов расчета по известной российско-финской программе «Оргдоза» [10] доз на внутренние органы при рентгенологическом исследовании органов брюшной полости и результатов расчета для тех же условий облучения с помощью нашего пакета. Полученные результаты показаны для сравнения в табл. 3.

Таблица 3

Результаты расчета доз облучения внутренних органов при рентгенологическом исследовании брюшной полости

Орган	Поглощенная доза, мГр			
	Оргдоза		Собственные вычисления	
	Проекция ПЗ	Проекция Б	Проекция ПЗ	Проекция Б
Желудок	0.025	0.018	0.025	0.022
Печень	0.019	0.0053	0.021	0.0037
Пищевод	0.00033	0.00026	0.0043	0.0032
Надпочечники	0.0085	0.0097	0.0076	0.0057
Почки	0.0033	0.01	0.0042	0.012
Поджелудочная железа	0.015	0.016	0.013	0.026
Селезенка	0.0064	0.02	0.0065	0.021
Желчный пузырь	–	–	0.058	0.0053

Полученные результаты показывают хорошее совпадение результатов собственных расчетов с результатами известного программного продукта «Оргдоза». Наблюдаемые несущественные различия скорее всего связаны с различиями в оценках объема облучаемой ткани, а не с описанием модели источника излучения.

Следующий путь верификации состоял в сравнении результатов измерений дозы в органах на физическом фантоме типа Алдерсона – Рендо с результатами оценки доз с помощью разработанного программного пакета. Для сравнения был взят вариант облучения органов брюшной полости в прямой передне-задней проекции. Измерения проводили на рентгеновском аппарате «SIREGRAPH CF». Условия проведения измерений были следующие: анодное напряжение – 70 кВ, произведение тока трубки на экспозицию – 0.9 мАс, фильтр 2.5 мм Al, расстояние источник – поверхность фантома 100 см, размеры поля облучения на поверхности фантома 30 × 24 см, центр поля облучения на 60 см от «макушки» фантома.

В качестве дозиметров были использованы термолюминесцентные детекторы ДТУ-01. Погрешность измерения в диапазоне доз 0.1–10 мГр равна ±30 %. В табл. 4 показаны результаты измерений дозы в отдельных органах и результаты расчета.

Таблица 4

Результаты измерения и расчета поглощенной дозы в отдельных органах

Орган	№ слоя	№ точки	Поглощенная доза, мГр	
			измерения	расчет
Желудок	24	169	0.12	0.138
Поджелудочная железа	22	13	0.6	0.459
Легкое правое	18	87	0.07	0.077
Сердце	18	х	менее 0.1	0.047

В пределах погрешностей измерения дозы с помощью ТЛ дозиметров наблюдается полное совпадение результатов расчета с данными прямых измерений в антропоморфном фантоме взрослого человека типа Алдерсона – Рендо.

9. Заключение

Представленный в данной работе алгоритм определения доз облучения в органах и тканях пациента в зависимости от характеристик источника излучения для пациентов разного возраста для основных видов рентгенологических исследований реализован в виде пакета компьютерных программ вычисления доз облучения в органах и тканях для пациентов разного возраста и пола для основных видов рентгенологических исследований. Весь программный пакет можно представить в виде трех частей: первая из них в коде Mathematica модифицирует стандартный воксельный фантом Алдерсона – Рендо взрослого человека с учетом возрастных и других особенностей пациента и создает входной файл для MCNP кода расчета поглощенной дозы на решетке точечных детекторов MCNP. Необходимый для входного файла спектр излучения рентгеновского источника предоставляется второй частью программного пакета. Запуск входного файла осуществляется под управлением специального Perl-скрипта.

В третьей части программного пакета происходит построение математических образов органов стандартного фантома Алдерсона – Рендо взрослого человека, а также их необходимая коррекция с учетом возрастных и других особенностей пациента. Здесь также происходит расчет дозовых нагрузок на органы, используя результаты MCNP вычислений.

Выполнены расчеты дозовых распределений и определены дозовые нагрузки на органы для стандартного фантома Алдерсона – Рендо взрослого человека для 25 типичных рентгенологических исследований.

Тестирование и верификация разработанного программного пакета позволяют рекомендовать его для широкого применения в рентгенодиагностических кабинетах учреждений здравоохранения.

Литература

1. Ay M., Shahriari M. et al. // Phys. Med. Biol. 2004. Vol. 49. P. 4897.
2. Nelson W.R., Hirayama H., Rogers W. O. The EGS Code System. Stanford Linear Accelerator Centre report SLAC-265. 1985.
3. MCNPXTM – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 4C, LA-13709-M. April 2000.
4. MCNPXTM User's Manual, Version 2.4.0, LA-CP-02-408. September 2002.
5. Boone J. M., Seibert J. A. // Med. Phys. 1997. Vol. 24. P. 1661.
6. International Commission on Radiological Protection. ICRP-23: Reference man: anatomical, physiological and metabolic characteristics.
7. Ay M.R., Shahriari M. et al. // Phys. Med. Biol. 2004. Vol. 49. P. 4897.
8. Servomaa A., Ranniko S. et al. A topographically and anatomically unified phantom model for organ dose determination in radiation hygiene. STUK A87. 1989.
9. Ranniko S., Ermakov I. et al. // The British J. Radiology. 1997. Vol. 70. P.708.
10. Программный продукт «Расчет эффективных доз и доз на органы пациента за счет рентгенодиагностических процедур «ОРГДОЗА» /ЦНИРРИ МЗ РФ. СПб., 1997.

IMPLEMENTAION OF MONTE CARLO SIMULATIONS FOR ASSESSMENT OF DOSE BURDENS ON THE TISSUES AND ORGANS OF PATIENTS DURING DIAGNOSTIC X-RAY INVESTIGATIONS

S. A. Kutsen, A. A. Khrutchinsky, V. F. Minenko*, T. S. Kuhta*

A voxel model of anthropomorphic tissue-equivalent Rando-like physical phantom has been developed from its CT-scan images for Monte Carlo simulations of transport of Roentgen radiation emitted by typical X-ray apparatus. Apparatus models based on TASMIP model for X-ray tube spectrum are verified using measurements of kerma-in-air and in-depth absorbed dose distribution for physical phantom with three commonly used in Belarus X-ray apparatus. X-ray source model includes an anode high voltage, anode current, voltage ripple, focus, filtration, distance “source – surface”, forming device characteristics, irradiation field, X-ray beam position as well as irradiation projection and inclination in a vertical plane.

The package of computer programs of calculation of dose burdens on the tissues and organs of the patients of different age has been developed for the basic types of diagnostic x-ray investigations using preliminary Monte Carlo simulations of transport of X-ray through the voxel model of the patient.

* Belarusian Medical Academy of Postgraduate Education, Minsk, Belarus.

КОНЦЕПЦИЯ, ЗАДАЧИ И РЕЗУЛЬТАТЫ СОЗДАВАЕМОЙ СЕТИ КОМПЬЮТЕРНОГО ЦИТОГЕНЕТИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА НАСЕЛЕНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ В ПОСТЧЕРНОБЫЛЬСКИЙ ПЕРИОД

В. И. Иванов, А. Н. Лазарчик

Экологическая ситуация на большей части территории Республики Беларусь в постчернобыльский период характеризуется наличием низкодозовой радиации и вредных факторов техногенной природы. Это свидетельствует о том, что значительная часть населения постоянно испытывает достаточно сильное мутагенное давление сочетанного типа. Хроническое воздействие данных факторов может оказать критическое генотоксичное влияние на генетический статус человеческой популяции в республике, в частности, в форме резкого увеличения частоты и тяжести генетических (врожденные пороки развития, пренатальная гибель, нарушение репродуктивности, стерильность) и онкологических заболеваний.

В настоящее время общепризнанным является факт, что формирующаяся в результате хронического воздействия генотоксичных факторов генетическая нестабильность ведет не только к новообразованиям, но может быть также ответственна и за ряд ее отдаленных феноменов, реализующихся на организменном уровне [1–5].

Анализ процесса малигнизации клеток и дальнейшей опухолевой прогрессии показывает, что они тесно связаны с реорганизацией генома, который во многих случаях выражается структурными или численными абберациями хромосом и изменениями их отдельных областей. В настоящее время известны многочисленные примеры хромосомных перестроек, которые либо обуславливают предрасположенность к развитию онкологических заболеваний, либо могут являться прямой причиной злокачественной трансформации [4]. Опухолевая прогрессия также часто связана с появлением клеточных клонов, несущих новые хромосомные перестройки и отличающихся от исходного штамма целым рядом признаков, имеющих непосредственное значение для прогнозирования развития заболевания и выбора оптимальной стратегии лечения [5].

Коварность хронического воздействия малых доз радиации заключается еще и в ее трудно прогнозируемом развитии, так как в этом случае основную роль начинают играть стохастические процессы и возможные последствия ее воздействия на организм человека определяются характером и местом распределения энергий в каком-то критическом, наиболее уязвимом микрообъеме (т. е. в ядре отдельной клетки или даже в его части) [6, 7]. Причем, если при воздействии высоких доз индивидуальные особенности организма (радиочувствительность, активность репарационных систем, функциональное состояние всего организма и отдельных его систем и органов) не играют сколь-нибудь существенной роли, то по мере снижения дозовых нагрузок их значение возрастает и в области малых доз индивидуальное функциональное состояние, возраст, радио-

чувствительность, могут стать определяющими для генетических и соматических изменений.

В этой связи только долговременный широкомасштабный цитогенетический мониторинг на популяционном уровне по всей территории республики, необходимость осуществления которого обоснована нами в работах [8, 9], может обеспечить определение достоверной коллективной дозы населения и в то же время на индивидуальном – дать реальную оценку повреждающих факторов, что является существенно важным для выявления индивидуумов цитогенетического и онкологического рисков и прогнозировании возможных последствий как хронического радиационного воздействия, так и сочетанных мутагенных факторов в целом.

Несмотря на многообразие методов цитогенетической диагностики (биодозиметрии), общепризнанным и официально утвержденным ВОЗ (1985, 1986) и МАГАТЭ (1992) является только классический цитогенетический метод, основанный на учете специфических хромосомных aberrаций в лимфоцитах периферической крови.

В настоящее время классический цитогенетический метод представляет собой основной инструмент отслеживания состояния генома человека в активно меняющихся экологических условиях. Однако в связи с необходимостью анализа и систематизации информации большого количества цитогенетических препаратов и трудоемкостью их анализа, особенно в случае оценки числовых aberrаций (анализ до 500–1000 метафаз на одного пациента, эффективная реализация цитогенетического метода в рамках широкомасштабного цитогенетического мониторинга требует использования специальных высокоскоростных программно-аппаратных алгоритмов обработки хромосомных биопрепаратов.

В результате выполненных нами работ [8, 10–12] впервые в Республике Беларусь осуществлена разработка компьютерного цитогенетического комплекса («Хромосома-01»). Прибор ориентирован на быструю обработку больших объемов цитогенетической информации (морфометрический анализ хромосом и микроядер клеток человека) и предназначен для использования в качестве базовых региональных станций создаваемой общереспубликанской сети компьютерного цитогенетического мониторинга.

Комплекс «Хромосома» обеспечивает: автоматизированную оценку и дифференциальный учет всех основных типов aberrаций хромосом, включая кольцевые и дицентрические хромосомы, являющиеся маркерами радиационного воздействия, кариотипирование хромосом по Денверской классификации, эффективное сжатие, архивацию и передачу цитогенетической информации; статистическую обработку и анализ результатов мониторинга, установление корреляционных связей между частотой цитогенетических аномалий и радиационно-экологическим состоянием территорий, социальным статусом, возрастом и общим состоянием здоровья обследуемых, наряду с цитогенетической диагностикой вести и цитологические исследования с созданием компьютерной базы данных соматических тканей лиц с наследственной, врожденной и онкологической патологией, объединение ряда базовых региональных станций «Хромосома» в единую общереспубликанскую телекоммуникационную сеть цитогенетического

мониторинга с созданием общей компьютерной цитогенетической и цитологической базы данных.

Одной из основных задач при разработке комплекса «Хромосома» для обеспечения возможности создания на его базе общереспубликанской сети цитогенетического мониторинга была необходимость разработки скоростных алгоритмов анализа морфометрических параметров хромосомного набора (длины плеч хромосомы, положение центромеры, центромерный и плечевой индексы и т. д.) с учетом особенностей отечественных хромосомных биопрепаратов. Это связано с тем, что методы оценки и реконструкции поглощенных биологических доз основываются на анализе структурных и числовых aberrаций хромосом человека, которые могут быть обнаружены именно морфометрическими методами [8, 13, 14].

Известные и доступные нам для тестирования программно-аппаратные алгоритмы современных систем автоматизированного анализа хромосом человека, такие как Karyo 3.1 (фирма «ВидеоТест», С.-Петербург), KaryoService (разработка МИФИ), Lucia Karyo (Чехия), используют упрощенный подход к анализу, основанный на определении только средней линии хромосомы и положения центромеры (теломеры и длины отдельных плеч хромосомы не определяются). Такая методика применима для анализа специально приготовленных цитогенетических препаратов, где у отдельных хромосом сестринские хроматиды не разделены [15]. В случае же, когда сестринские хроматиды достаточно сильно расходятся (а именно эта ситуация наиболее характерна для отечественных препаратов), данная методика приводит к многочисленным грубым ошибкам классификации хромосом. В связи с этим возникла необходимость в разработке эффективных программно-аппаратных алгоритмов, ориентированных на специфику применения в отечественной практике компьютерного цитогенетического мониторинга.

В общем виде процедура компьютерного автоматизированного анализа хромосом человека может быть представлена в виде следующих основных блоков: блока выделения изолированных объектов и определения их внешних контуров (блока сегментации); блока идентификации хромосом и определения характерных точек хромосомы, таких как центромера и теломеры; блока измерения морфометрических и фотометрических параметров хромосом; блока классификации хромосом на основе измеренных параметров в соответствии с Денверской международной классификацией [16].

В данной работе приводим краткое описание одной из частей разработанного нами скоростного алгоритма анализа хромосом, а именно блока сегментации изображения, во многом определяющего эффективность и быстродействие комплекса «Хромосома».

Исходные предпосылки: цифровой образ микроизображения (метафазной пластинки) хромосомного биопрепарата и записан в памяти компьютера. Это цифровое изображение представляет собой прямоугольную многоэлементную матрицу, каждый элемент которой (отдельный пиксель) соответствует точке изображения определенной оптической плотности препарата. Изображение счи-

таем монохромным, то есть каждому пикселю ставится в соответствие число, пропорциональное яркости данной точки изображения.

Так как изображение метафазной пластинки представляет собой совокупность темных объектов на светлом фоне, то признаком принадлежности некоторой точки изображения объекту является малое (ниже некоторого фиксированного порога) значение яркости этой точки. В соответствии с выбранным уровнем порога множество точек изображения разбивается на два подмножества: подмножество точек, принадлежащих объектам, и подмножество точек, принадлежащих фону. Задача сегментации состоит в разбиении первого подмножества на отдельные объекты и кодирование геометрических форм этих объектов в удобном для дальнейшего анализа виде. Учитывая специфику изображений метафазных пластинок – наличие слипшихся, перекрывающихся и т. д. объектов – следует отметить достаточно жесткое требование к алгоритму сегментации, заключающееся в том, что алгоритм должен разделять объекты любой сколь угодно сложной формы.

В основу разработанного алгоритма сегментации, приведенного ниже, были положены следующие критерии построения максимально быстрого алгоритма:

1. Алгоритм должен протестировать на принадлежность объектам каждую точку изображения, причем обращаться к одной и той же точке минимальное число раз (в идеальном случае один раз).

2. При анализе изображения алгоритм должен использовать естественную последовательность расположения пикселей в памяти компьютера, то есть выполнять построчный анализ изображения.

3. Кодирование формы выделенных объектов должно производиться в терминах дискретных изображений, то есть не следует использовать характеристики, которые применяются для описания непрерывных кривых, например, кривизна дуги.

Соблюдение этих критериев обеспечило разработку алгоритма, у которого минимизировано число обращений к оперативной памяти и количество расчетных операций, что эквивалентно максимизации быстродействия. Основными элементами, которыми оперирует алгоритм, являются хорда, сегмент, объект, дискретный вектор и векторный контур.

Хорда – это непрерывная часть строки изображения, принадлежащая некоторому объекту. Она однозначно определяется двумя точками (левой и правой) или четырьмя целыми числами (их координатами).

Сегмент – это совокупность последовательно перекрывающихся хорд, причем в одной строке изображения сегменту может принадлежать только одна хорда. Перекрывающимися хордами называются хорды, расположенные в соседних строках, проекции которых на ось X перекрываются (рис. 1). Кроме того, два сегмента, содержащие хорды из одной строки, не должны содержать перекрывающихся хорд (рис. 2).

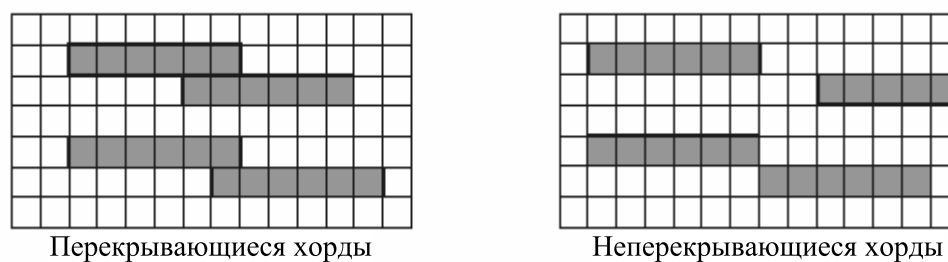


Рис. 1. Хорды

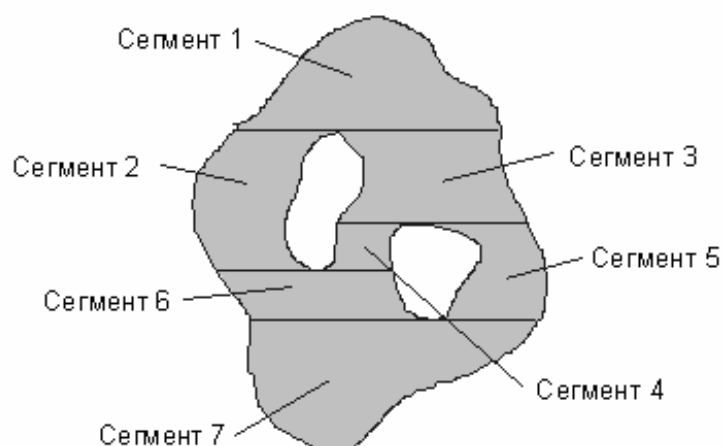


Рис. 2. Объект – совокупность связанных сегментов

Объектом будем называть совокупность связанных сегментов. Сегменты называются связанными, если последняя хорда одного сегмента перекрывается с первой хордой другого или наоборот. Например, у объекта, изображенного на рис. 2, сегмент 1 связан с сегментами 2 и 3, сегмент 3 связан с сегментами 4 и 5 и т. д. Очевидно, что список связанных сегментов однозначно характеризует отдельный объект изображения и содержит полную информацию о его форме. Однако, как показывает анализ, описание объекта на основе списка сегментов является неудобным в задачах классификации объектов по их форме. Более приемлемым следует признать описание формы, основанное на построении контуров объектов.

Контуром, как известно, называется множество внешних точек плоского объекта. В нашем случае контур представляет собой последовательность дискретных пикселей изображения, расположенных на краю объекта. В связи с этим оказалось удобным ввести понятия дискретного вектора и векторного контура.

Дискретный вектор, как и обычный вектор на плоскости, характеризуется направлением (углом азимута) и длиной с той лишь разницей, что азимут дискретного вектора может принимать восемь фиксированных значений, условно обозначенных от 0 до 7 (рис. 3, а), и длина его должна быть кратна размеру пикселя в соответствующем направлении.

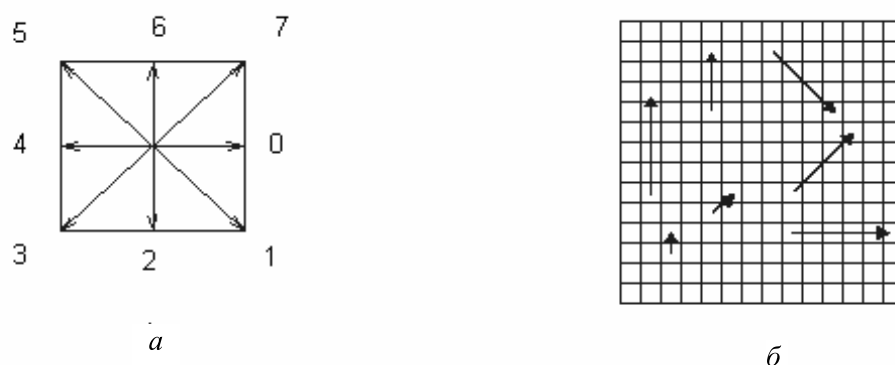


Рис. 3. Дискретные векторы

Следовательно, дискретный вектор всегда направлен либо вдоль сетки растра, либо по диагонали, а его начало и конец расположены в центрах пикселей (рис. 3, б).

Понятие дискретного вектора оказывается весьма удобным для описания контура плоской фигуры дискретного изображения. Для этой цели нами введен еще один объект – векторный контур, определяемый как последовательность дискретных векторов, расположенных на пикселях контура объекта, при этом начало одного вектора совпадает с концом предыдущего, а точками стыковки векторов являются пиксели, в которых контур изменяет свое направление (рис. 4). Таким образом, векторный контур однозначно определяет контур объекта и обеспечивает достаточно компактную его кодировку в терминах дискретного изображения. Похожая процедура кодирования контура была предложена в работе [17], но в ней использовались лишь дискретные векторы единичной длины, что в данном случае снижает эффективность алгоритма.

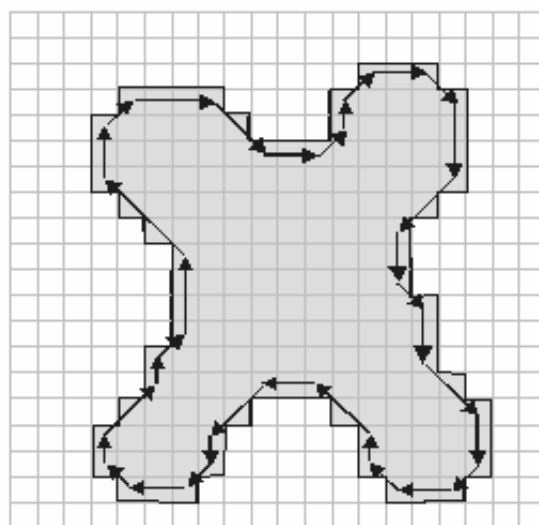


Рис. 4. Векторный контур

Как показал дальнейший анализ, векторный контур оказался весьма удобным инструментом для машинного исследования формы плоских объектов с целью их классификации.

Предложенный алгоритм сегментации использует для описания объекта как список сегментов, так и векторный контур. Сегментное описание используется для представления и манипуляций визуальной копией объекта на экране дисплея, а векторный контур – для анализа формы и процедуры классификации. С целью дальнейшей оптимизации алгоритма по быстродействию в соответствии с критериями 1 и 2 процессы построения сегментов и векторных контуров объектов выполняются параллельно.

Основные операции алгоритма сегментации заключаются в следующем. Базовым циклом алгоритма в соответствии с критерием 2 является просмотр и анализ отдельной строки раstra. Анализ строк выполняется последовательно сверху вниз. Начальной процедурой цикла является процедура поиска очередной хорды в текущей строке. Процедура просматривает пиксели строки слева направо и при обнаружении пикселя с яркостью ниже пороговой фиксирует левый конец хорды. После этого ищется первый пиксель с яркостью выше пороговой, который определяет правый конец хорды. Выделенная хорда в виде трех целых чисел (номера строки, X-координаты левого конца и X-координаты правого конца) передается программному блоку предварительного анализа принадлежности хорды каким-либо открытым сегментам открытых объектов. Открытыми объектами и сегментами называются те объекты и сегменты, которые имеют хорды в предыдущей строке. После завершения работы этого блока управление вновь передается начальной процедуре, которая ищет следующую хорду. Данный процесс продолжается до тех пор, пока не будет найдена последняя хорда в данной строке. После этого управление передается блоку окончательного построения сегментов и контуров объекта. На этом базовый цикл завершается, и происходит переход к следующей строке раstra.

Программный блок предварительного анализа хорды проверяет последние хорды всех открытых сегментов на предмет перекрытия с текущей хордой и отмечает все случаи перекрытия. Если хорда оказывается общей для сегментов, принадлежащих различным открытым объектам, то производится слияние этих объектов в один. Блок предварительного анализа необходим в силу того, что на этом этапе невозможно произвести присоединение хорды к конкретному сегменту конкретного объекта, так как следующая, пока неизвестная, хорда данной строки может существенно изменить структуру объекта.

Блок окончательного построения сегментов получает управление после того, как будут найдены все хорды текущей строки. Он производит окончательную перестройку структуры всех открытых объектов в соответствии с данными предварительного анализа всех текущих хорд, найденных в данной строке. Если какому-либо открытому сегменту не принадлежит ни одна из текущих хорд, то сегмент закрывается, т. е. он не будет участвовать в дальнейших изменениях структуры объекта, причем, если этот сегмент является последним в списке сег-

ментов объекта, то закрывается также и весь объект, который считается полностью построенным.

В том случае, когда текущая хорда не перекрывается ни с одним из открытых сегментов, создается новый открытый объект, в котором первый открытый сегмент состоит из одной этой хорды.

Если текущая хорда перекрывается только с одним сегментом, который не перекрывается с другими текущими хордами, то данная хорда присоединяется к этому сегменту и становится его последней хордой, при этом сегмент остается открытым.

Если же текущая хорда перекрывается с несколькими открытыми сегментами, то все эти сегменты закрываются, и создается новый открытый сегмент на основе текущей хорды, связанный с этими закрытыми сегментами.

Если какой-либо открытый сегмент перекрывается с несколькими текущими хордами, то такой сегмент закрывается, а на базе текущих хорд создаются новые открытые сегменты, связанные с закрытым сегментом.

Параллельно с изменением структуры сегментов в данном блоке проводится построение внешних и внутренних контуров объектов. Так, операция открытия нового объекта сопровождается созданием внешнего контура этого объекта.

Операция закрытия сегментов приводит либо к слиянию контуров (внешнего с внутренним, внутреннего с внутренним), либо к замыканию внутренних контуров. Создание новых открытых сегментов приводит к созданию новых внутренних контуров. Здесь следует отметить, что незамкнутый внутренний контур в дальнейшем может стать частью внешнего контура в результате слияния с последним.

Каждый сегмент справа и слева ограничен участками двух контуров (исключение составляют первый и последний сегменты объекта, ограниченные одним внешним контуром), которые будем называть прилегающими. В процессе присоединения текущей хорды к открытому сегменту производится добавление к каждому из прилегающих векторных контуров одного или двух векторов в зависимости от соотношения координат текущей хорды и последней хорды сегмента. На рис. 5 приведены возможные варианты построения для левого (а) и правого (б) прилегающего контура.

В отношении процедуры слияния различных контуров следует отметить, что при анализе сложных фигур могут возникать достаточно запутанные комбинации вновь создаваемых и объединяемых контуров, которые должны корректно обрабатываться программой. Это обстоятельство обуславливает определенную сложность программного кода, реализующего данный алгоритмический блок. С другой стороны, эту сложность можно рассматривать в качестве платы за эффективность в плане быстродействия системы.

Результатом выполнения алгоритма сегментации является список объектов, выделенных из исходного изображения хромосомного препарата. Каждый объект содержит список связанных сегментов, принадлежащих объекту, внешний контур, список внутренних контуров и сами контуры. Каждый сегмент содержит список входящих в него хорд. Таким образом, в памяти компьютера формируется набор данных, которые полностью характеризуют форму и параметры объектов, обнаруженных на исходном изображении метафазной пластинки. Эти дан-

ные являются исходным материалом для последующего морфометрического анализа выделенных плоских объектов (хромосом, микроядер), вычисления их геометрических параметров и проведения классификации.

Успешная эксплуатация трех экземпляров разработанного комплекса «Хромосома» в РНПЦ радиационной медицины и экологии человека (РНПЦ РМ и ЭЧ, г. Гомель) и Гомельском государственном медицинском университете показала высокую эффективность разработанных алгоритмов и их хорошую адаптацию к отечественным хромосомным препаратам.

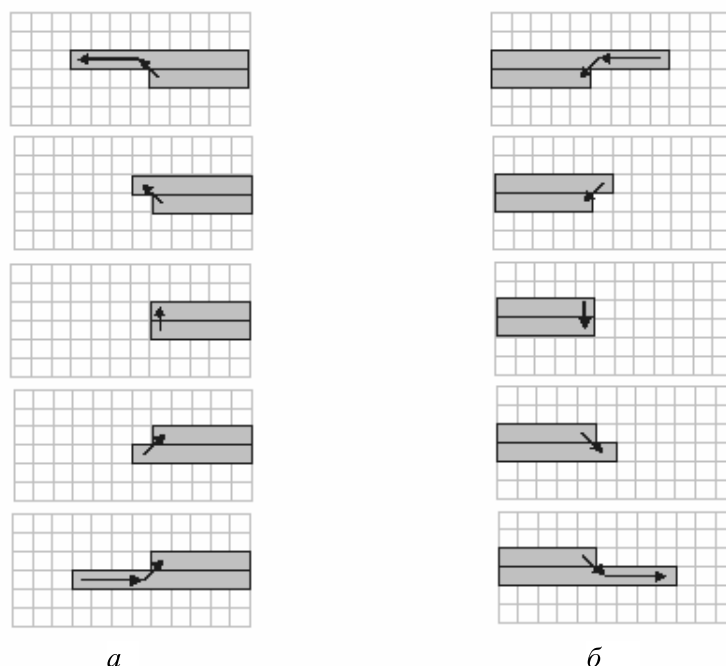


Рис. 5. Возможные варианты построения для левого (а) и правого (б) прилегающего контура

Полученные нами совместно с РНПЦ РМ и ЭЧ результаты установочного цитогенетического мониторинга на комплексе «Хромосома» по выборке 252 пациента [10, 18] позволили сделать следующие выводы.

Наиболее выраженное нарастание маркеров радиационного воздействия отмечено у мужчин Брестской области и женщин Гомельской области.

Уровень геномной нестабильности при сравнении взрослого и детского населения в различных областях республики был более выражен у детей и подростков (за исключением мужчин Минской области и женщин Гомельской области), что свидетельствует о существенно большей чувствительности детей к факторам экологического неблагополучия и косвенно указывает на нарастание генотоксичного фактора в последние годы (именно поэтому высокий уровень нестабильности генома отмечается у детей).

Суммарное количество aberrаций у детей $3.78 \pm 0.41 \%$ – достаточно высоко и находится на верхней границе нормы или несколько ее превышает (относительно ранее опубликованных данных).

Обращает на себя внимание наличие aberrаций стабильного типа («атипичные хромосомы»), что свидетельствует о нарастании уровня генетического риска, так как они могут проходить «сито» митоза и передаваться по наследству в ряду клеточных генераций.

С увеличением возраста обследуемых наблюдается нарастание количества дицентрических и кольцевых хромосом. В то же время, в параллель с этим, наблюдается и рост частоты полиплоидных клеток. Последнее является весьма неблагоприятным признаком, так как связано с тенденцией ослабления одной из старейших форм генетической защиты – увеличением дозы гена.

Региональные особенности цитогенетического статуса в основном были обусловлены aberrациями неспецифического типа (одионые фрагменты) и параметрами, характеризующими явление геномной нестабильности – общей частотой aberrаций и aberrантных клеток. На рис. 6 приведены распределения региональных особенностей цитогенетического статуса у детей. Суммарные данные свидетельствуют о том, что наиболее выраженная дестабилизация генома отмечается у детей из Брестской области (частота хромосомных aberrаций $5.79 \pm 0.57\%$, в условном контроле (Минская область) – $3.12 \pm 0.68 \%$, $P < 0.05$).

Следует также отметить, что именно в этой группе отмечена самая высокая частота стабильных aberrаций (атипичных клеток – $0.06 \pm 0.03 \%$, против $0.05 \pm 0.03 \%$ в Гомельской области, в условном контроле они полностью отсутствуют).

Таким образом, данные убедительно свидетельствуют о том, что в Брестской популяции наблюдаются существенно более глубокие изменения генома, чем в Гомельской и тем более в Минской области.

Суммируя все изложенное выше, можно констатировать:

- выраженность мутационного давления по территории Республики варьирует в достаточно широких пределах;
- у лиц, проживающих в экологически неблагоприятных условиях, отмечаются серьезные нарушения стабильности генома соматических клеток;
- отмечается аномально высокий уровень aberrаций хромосом у детей Брестской области.

Выявленные тенденции нарастания уровня цитогенетического риска требуют ускорения создания полноценной общереспубликанской сети цитогенетического мониторинга, минимальный объем которой должен состоять из 10–12 региональных станций, объединенных в единую телекоммуникационную сеть с общей компьютерной базой данных. В рамках данной задачи в течение ближайших 3 лет планируется ввести в эксплуатацию еще 5–7 станций «Хромосома» в ряде медицинских учреждений, специализирующихся в области радиационной цитогенетики, пренатальной диагностики, врожденных и наследственных патологий, онкологии.

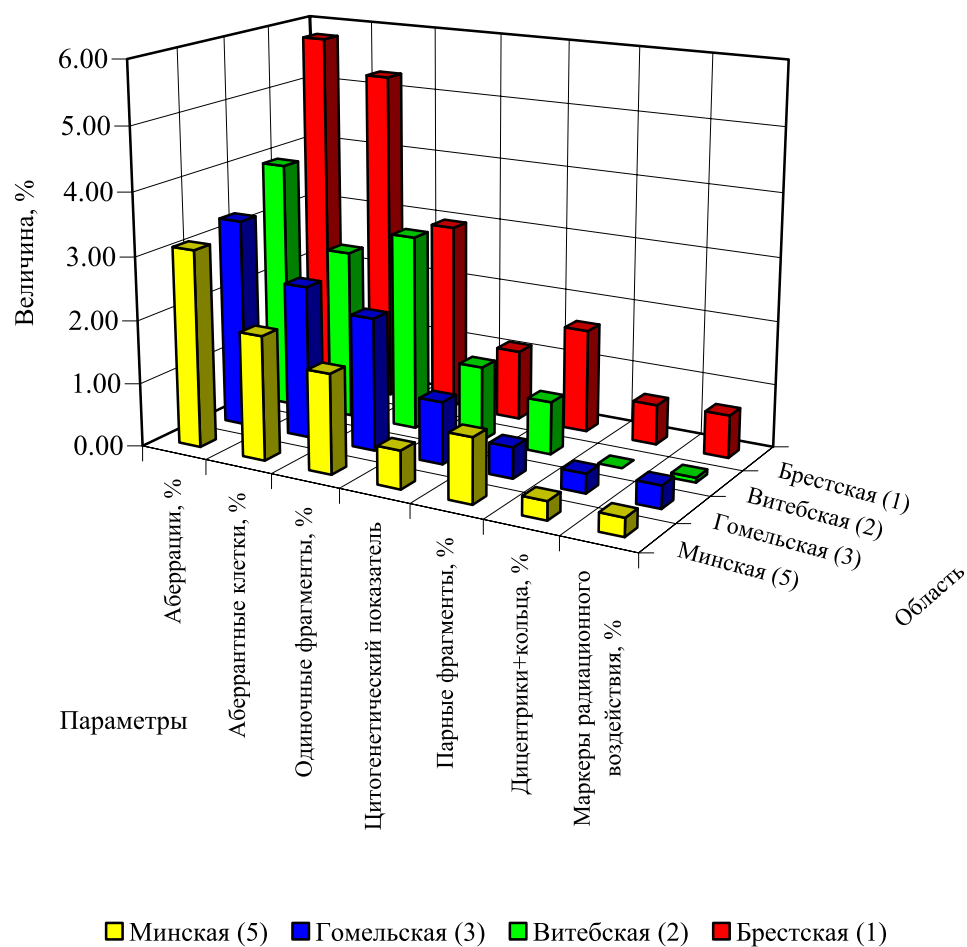


Рис. 6. Распределения региональных особенностей цитогенетического статуса у детей

В наиболее сложных случаях цитогенетических патологий и подозрениях на онкозаболевания, в плане изучения более тонкой морфологии генетических изменений на молекулярном уровне хромосом, например, исследований распределения и концентрации ДНК и других хромосоμοобразующих веществ, предусматривается возможность дополнения используемого классического метода цитогенетического анализа, как основного метода широкомасштабного цитогенетического мониторинга, осваиваемыми нами в настоящее время методиками и разрабатываемыми программно-аппаратными средствами для селективной окраски хромосом и высокоточного измерения параметров хромосом на молекулярном уровне спектральными методами – FISH, in situ гибридизацией.

Решение проблем по созданию общереспубликанской сети компьютерного цитогенетического мониторинга, как задачи широкомасштабного обследования, систематизации, обработки и обобщения цитогенетической информации на популяционном уровне позволит:

- ретроспективно верифицировать индивидуальные и коллективные дозы лучевых нагрузок;
- проследить территориально-временную динамику цитогенетических нарушений;
- дифференцированно оценивать степень генотоксичности неблагоприятных экологических факторов окружающей среды;
- обнаруживать появление клонов клеток с хромосомными aberrациями – маркерами возможной опухолевой трансформации;
- своевременно выявлять, контролировать и осуществлять необходимые лечебные, реабилитационные и профилактические мероприятия с категориями населения цитогенетического и онкологического рисков;
- определять генотоксичные территории Республики Беларусь;
- прогнозировать возможные отдаленные медико-генетические последствия хронического воздействия малых доз радиации и техногенных факторов на организм человека в постчернобыльский период.

Литература

1. Воробцова И. Е. // Радиобиология. 1994. Т. 31, № 1. С. 568.
2. Ллойд Д. К., Эдварс А. А. // Гематология и трансфузиология. 1993. Т. 38. С. 3.
3. Спутковский Д. М. // Вестник Российской АМН. 1992. № 4. С. 39.
4. Mitelman F. et al. // Nature Genetics. Special issue. 1997. P. 415.
5. Potter A. M., Watmore A. // Human Cytogenetics: a practical approach. 1992. Vol. 11. P. 27.
6. Севаньяев А. В. // Радиобиология. 1991. Т. 31. Вып. 4. С. 600.
7. Севаньяев А. В., Моисеенко В. В., Цыб А. Ф. // Радиационная биология. Радиоэкология. 1994. Т. 34. Вып. 6. С. 782.
8. Разработать и создать опытный образец компьютерной системы микроядерного анализа и кариотипирования хромосом человека для оперативной диагностики состояния критических систем организма при радиационных и токсических воздействиях. Отчет НИОКР, гос. рег. № 19993108. Минск. НИИ ЯП БГУ, 1999. 46 с.
9. Иванов В. И., Лазарчик А. Н. // Тр. междунар. науч.-техн. конф. «Вузовская наука», Минск, 2000. С. 58.
10. Разработать и создать программно-методические и аппаратные средства генетического мониторинга населения Республики Беларусь, провести установочный мониторинг и сформировать компьютерные базы данных. Отчет НИОКР, гос. рег. № 2002876. Минск, НИИ ЯП БГУ, 2002. 42 с.
11. Провести модернизацию, изготовить и поставить опытный образец программно-аппаратного цитогенетического комплекса «Хромосома –01». Отчет НИОКР, гос. рег. № 2005304. Минск, 2005. 16 с.
12. Модернизация, изготовление, инсталляция и отладка у Заказчика двух компьютерных цитогенетических анализаторов «Хромосома-01» для изучения цитогенетического статуса различных групп населения, получившего дополнительные дозы

- облучения в результате катастрофы на ЧАЭС, в том числе и у больных раком щитовидной железы. Отчет НИОКР, гос. рег. № 20053340. Минск, 2006. 28 с.
13. *Иванов В. И., Лазарчик А. Н.* // Фундаментальные и прикладные физические исследования 1986–2001 гг. 2001. С.334.
 14. *Захаров А.Ф., Бенюш В. А. и др.* // Хромосомы человека. (Атлас). АМН СССР. 1982. С.186.
 15. *Moradi M., Setarehdan K.* // Pattern Recognition Letters. 2006. Vol. 27. P. 19.
 16. *Гиндилис В. М., Иваницкий Г. Р.* // Сб. Современные проблемы машинного анализа биологических структур. 1970. С. 34.
 17. *Freeman H.* // IRE Trans. Electronic Computers. 1961. Vol. EC-10. P. 260.
 18. *Мельнов С. Б., Иванов В. И. и др.* // Достижения медицинской науки Беларуси. 2003. Вып. 8. С. 16.

**CONCEPTION, TASKS AND RESULTS OF CONSTRUCTING
COMPUTER SYSTEM OF CYTOGENETIC MONITORING OF
POPULATION OF REPUBLIC OF BELARUS IN THE
POSTCHERNOBYL PERIOD**

V. I. Ivanov, A. N. Lazarchik

Development of a computer cytogenetic complex created in Belarus is discussed. This complex is oriented on the rapid processing of large volumes of cytogenetic information such as a morphometric analysis of chromosomes and micronuclei of humans cells.

The basic concept, tasks and results of computer system of cytogenetic monitoring of population of Republic of Belarus in the postchernobyl period is described. It is shown that this complex can be used as a base regional station in the constructing republic network of computer cytogenetic monitoring.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИНСПЕКТИРУЕМЫХ ПАРАМЕТРОВ ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА МЕТОДОМ ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

**С. В. Черепица, С. М. Бычков, А. Н. Коваленко, А. Л. Мазаник,
Н. М. Макоед, Н. Н. Гремяко*, Д. Е. Кузменков**, Я. Л. Лучинина****

Развитие методов газовой хроматографии с применением высокоэффективных капиллярных колонок позволило получать достаточно полную картину детального углеводородного состава (Detailed Hydrocarbon Composition – ДНС) бензинов и бензиновых фракций. На основе данных ДНС в ряде работ [1–8] было предложено расчетным методом получать эффективные параметры нефтепродуктов, в том числе и inspectируемые параметры автомобильных бензинов.

В работах [9–11] впервые были приведены данные о метрологически аттестованной методике определения основных inspectируемых параметров автомобильных бензинов методом газовой хроматографии. В 2001 г. разработан, утвержден и введен в действие государственный стандарт СТБ 1276–2001 [12] Республики Беларусь, регламентирующий методику определения параметров автомобильных бензинов. В 2001 г. лаборатория аналитических исследований Института ядерных проблем Белгосуниверситета была аккредитована на право проведения испытаний автомобильных бензинов по указанным выше нормативным документам. Два года интенсивной работы в рамках аккредитованной лаборатории показали, что имеется достаточно большой спрос на исследование дизельного топлива. Достижения в области газовой хроматографии дизельного топлива с точки зрения inspectируемых параметров данного нефтепродукта не велики. Распределение по температурам кипения – единственный показатель, на который имеется нормативный документ [3]. Была поставлена задача «минимум» – определять фракционный состав, цетановое число, плотность и температуру вспышки дизельного топлива по данным ДНС.

Измерения физико-химических свойств дизельного топлива выполняют газохроматографическим методом. Жидкая проба топлива вводится в хроматограф, который оборудован пламенно-ионизационным детектором и кварцевой капиллярной колонкой с неполярной неподвижной жидкой фазой полидиметилсилоксана. В инжекторе проба переводится в паровую фазу и гелиевым газом носителем переносится в колонку, в которой углеводородные компоненты разделяются в порядке их температур кипения. Компоненты улавливаются пламенно-ионизационным (ПИД) детектором по мере их выхода из колонки. Сигнал детектора обрабатывается регистрирующей системой, которая обнаруживает пики, определяет площади под ними и идентифицирует их путем сравнения параметров удерживания с табличными параметрами. Содержание индивидуальных углеводородов определяется нормализацией площади. Цетановое число и фракционный состав определяют расчетным методом по содержанию индивидуальных веществ в анализируемой пробе. Плотность и температуру вспышки определяют расчетным методом по цетановому числу и фракционному составу.

* ОАО «Мозырский НПЗ».

** ГЭКЦ МВД Республики Беларусь.

1. Экспериментальные исследования

Измерения дизельного топлива проводили с использованием следующего оборудования (табл. 1, 2).

Таблица 1

Измерительное оборудование

Характеристики измерительного оборудования	Оборудование
Газовый хроматограф в комплекте с пламенно-ионизационным детектором с пределом детектирования не более $2 \cdot 10^{-12}$ гС/с и возможностью программирования температуры термостата колонки от 50 до 320 °С со скоростью 2 °С/мин.	КристалЛюкс-4000
Система регистрации, обработки и хранения хроматографических данных	UniChrom ¹ [13–4]
Колонка хроматографическая капиллярная кварцевая с неполярной неподвижной жидкой фазой полидиметил-силоксана длиной 100 м, диаметром 0.25 мм и толщиной пленки 0.5 мкм	Rtx [®] -1 PONA

Таблица 2

Условия хроматографирования

Объект	Параметры	Значения
Программа температуры термостата колонки	Начальная температура	50 °С
	Длительность начального изотермического участка	5 мин
	Скорость нагрева термостата	2 °С /мин
	Конечная температура	320 °С
	Длительность конечного изотермического участка	0 мин
Инжектор	Температура	300 °С
	Коэффициент деления потока при 35 °С	1:100
	Объем вводимой пробы	0.2 – 0.6 мкл
Детектор	Тип	ПИД
	Температура	300 °С
	Расход водорода (топливный газ)	30 мл/мин
	Расход воздуха (окисляющий газ)	300 мл/мин
	Расход гелия (поддув)	до 30 мл/мин
Газ-носитель	Тип	гелий
	Давление на входе в колонку	400 кПа
	Расход через колонку при 50 °С составляет	3.3 мл/мин

¹ Система UniChrom в комплексе с хроматографом КристалЛюкс-4000 используется для контроля и управления режимами хроматографа. Программное обеспечение системы UniChrom позволяет выполнять обработку и расчет параметров автомобильных бензинов и дизельного топлива по МВИ.

Измерения проводили в аккредитованной лаборатории аналитических исследований Института ядерных проблем Белгосуниверситета. Анализировали контрольные образцы дизельного топлива.

Контрольные образцы готовили на Мозырском нефтеперерабатывающем заводе (МНПЗ) и рассылали в аккредитованные лаборатории для анализа нефтепродуктов стандартными методами [15–19]. Таким образом, каждый контрольный образец дизельного топлива был исследован в ЦЗЛ МНПЗ, ЦЗЛ ННПЗ (Новополоцкий нефтеперерабатывающий завод) и в 202 лаборатории химмотологического Центра Министерства обороны Республики Беларусь.

По полученным данным были определены метрологические характеристики образцов: аттестованные значения фракционного состава, цетанового числа, плотности, температуры вспышки и границы абсолютной погрешности аттестованной характеристики при доверительной вероятности 0,95 [20].

2. Идентификация и содержание индивидуальных углеводородов в топливе

В дизельное топливо входят компоненты разных классов – парафины, ароматические углеводороды, циклические углеводороды, непредельные углеводороды и другие соединения. Нормальные парафины и ароматические соединения составляют основу данного нефтепродукта. Локализованные пики нормальных парафинов и распределенные ароматические соединения определяют общий особый вид хроматограммы дизельного топлива (рис. 1). Количество пиков на хроматограмме в зависимости от образца нефтепродукта и используемого метода интегрирования колеблется от 700 до 900. Четко видимую гребенку пиков образуют нормальные парафины от C5 до C28, что легко проверить путем измерения смеси нормальных парафинов в указанных выше условиях.

Для решения задачи «минимум» более детальная идентификация индивидуальных углеводородов, входящих в состав дизельного топлива, не требуется.

Содержание индивидуальных соединений X_i определяется методом внутренней нормализации по формуле

$$X_i = \frac{A_i}{\sum_{j=1}^L A_j}, \quad (1)$$

где A_i – площадь под пиком i -го компонента; A_j – площадь под пиком j -го компонента; j – индекс суммирования, пробегающий последовательно по всем пикам хроматограммы; L – количество пиков на хроматограмме.

Относительные коэффициенты чувствительности ПИД для всех соединений близки к единице и в расчете концентраций не учитываются.

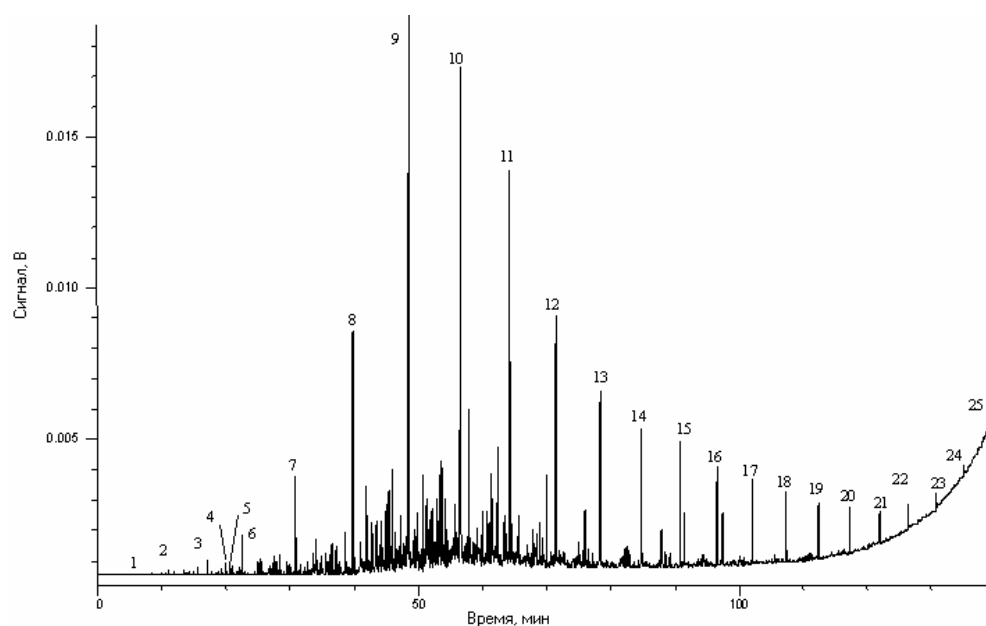


Рис. 1. Общий вид хроматограммы дизельного топлива

1. n-Pentane	8. n-Decane	15. n-Heptadecane	22. n-Tetracosane
2. n-Hexane	9. n-Undecane	16. n-Octadecane	23. n-Pentacosane
3. n-Heptane	10. n-Dodecane	17. n-Nonadecane	24. n-Hexacosane
4. 2-Methylheptane	11. n-Tridecane	18. n-Eicosane	25. n-Heptacosane
5. 4-Methylheptane	12. n-Tetradecane	19. n-Heneicosane	
6. n-Octane	13. n-Pentadecane	20. n-Docosane	
7. n-Nonane	14. n-Hexadecane	21. n-Tricosane	

3. Цетановое число дизельного топлива

В основе газохроматографического метода определения цетанового числа положено предположение, что каждому индивидуальному компоненту топлива можно поставить в соответствие определенный эффективный цетановый коэффициент. Эффективное цетановое число топлива, как смеси, находится суммированием произведений доли индивидуальных компонентов на их эффективные цетановые коэффициенты. С целью упрощения процедуры расчета вся хроматограмма разбивается на 47 групп:

$$A = \sum_{i=1}^{47} X_i \cdot A_i, \quad (2)$$

где X_i – суммарная доля углеводородов i -й фракции; A_i – эффективное цетановое число для i -й фракции в соответствии с табл. 3.

Эффективные октановые коэффициенты нами найдены методом линейной регрессии по хроматографическим данным образцов аттестованного топлива. Полученные эффективные октановые коэффициенты представлены в табл. 3.

Таблица 3

**Состав и физико-химические свойства фракций
дизельного топлива**

Фракция дизельного топлива		$A (\pm 0.1)$
1	до н-пентана	36.1
2	н-пентан	82.1
3	между н-пентаном и н-гексаном	53.0
4	н-гексан	34.4
5	между н-гексаном и н-гептаном	78.7
6	н-гептан	47.3
7	между н-гептаном и н-октаном	13.6
8	н-октан	36.5
9	между н-октаном и н-нонаном	52.6
10	н-нонан	52.6
11	между н-нонаном и н-деканом	39.9
12	н-декан	42.9
13	между н-деканом и н-ундеканом	52.4
14	н-ундекан	52.7
15	между н-ундеканом и н-додеканом	43.7
16	н-додекан	42.7
17	между н-додеканом и н-тридеканом	39.9
18	н-тридекан	32.7
19	между н-тридеканом и н-тетрадеканом	29.5
20	н-тетрадекан	98.7
21	между н-тетрадеканом и н-пентадеканом	75.6
22	н-пентадекан	72.9
23	между н-пентадеканом и н-гексадеканом	56.0
24	н-гексадекан	81.7
25	между н-гексадеканом и н-гептадеканом	44.9
26	н-гептадекан	57.2
27	между н-гептадеканом и н-октадеканом	54.0
28	н-октадекан	56.3
29	между н-октадеканом и н-нонадеканом	54.8
30	н-нонадекан	54.3
31	между н-нонадеканом и н-эйкозаном	54.5
32	н-эйкозан	63.1
33	между н-эйкозаном и н-генэйкозаном	49.1
34	н-генэйкозан	57.2

Фракция дизельного топлива		$A (\pm 0.1)$
35	между н-генэйкозаном и н-докозаном	57.8
36	н-докозан	52.3
37	между н-докозаном и н-трикозаном	53.3
38	н-трикозан	57.5
39	между н-трикозаном и н-тетракозаном	55.8
40	н-тетракозан	60.0
41	между н-тетракозаном и н-пентакозаном	48.2
42	н-пентакозан	53.1
43	между н-пентакозаном и н-гексакозаном	35.6
44	н-гексакозан	66.3
45	между н-гексакозаном и н-гептакозаном	38.0
46	н-гептакозан	43.2
47	после н-гептакозана	55.2

В таблице использовано следующее обозначение: A – эффективное цетановое число, рассчитанное методом линейной регрессии, с погрешностью не более ± 0.1 единицы.

Анализ результатов определения цетанового числа (рис. 2) показал, что отклонение цетанового числа, рассчитанного по хроматограмме, от цетанового числа, полученного на стандартном одноцилиндровом двигателе [15], не превышает 0.5 цетановых единиц.

4. Фракционный состав

Фракционный состав определяется в два этапа. Сначала определяется распределение фракций по температурам кипения в соответствии с [20], а потом выполняется переход от температур кипения к температурам отгона по [17]. Данный метод отличается от [3] тем, что расчет выполняется по хроматограмме, представляющей собой дискретный спектр пиков. Здесь четко известно положение нормальных парафинов и отпадает надобность в предварительной калибровке системы смесью нормальных парафинов.

Зависимость температур кипения по [3] и температур отгона по [17] представляет собой полином вида

$$T_{\chi} = -9.12 \cdot 10^{-6} \cdot (T_{\chi}^*)^3 + 8.007 \cdot 10^{-3} \cdot (T_{\chi}^*)^2 - 1.446 \cdot T_{\chi}^* + 268.0, \quad (3)$$

где T_{χ}^* – температура кипения χ процентов смеси по [20] в °C; T_{χ} – температура отгона в °C, соответствующая χ проценту отгона нефтепродукта по [17].

Отклонение температуры отгона, измеренной по хроматограмме и по [17] не превышает 15 °C.

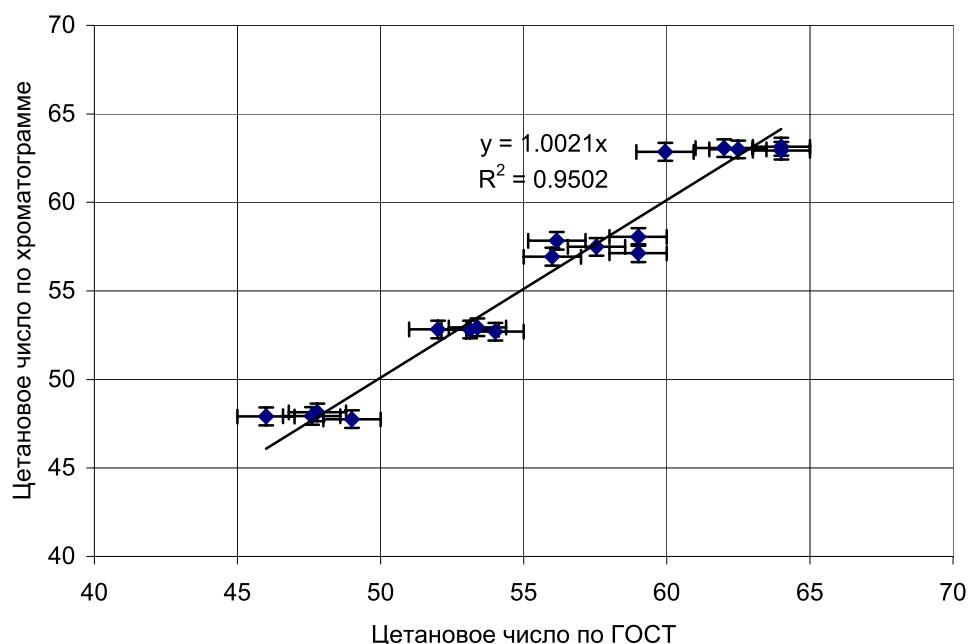


Рис. 2. Расхождения между цетановыми числами, измеренными по ГОСТ 3122 и по хроматограмме. Отклонение от среднего результатов измерений по ГОСТ 3122 составляют ± 2 цетановые единицы. Отклонение от среднего результатов измерений по хроматограмме не превышают ± 0.5 цетановых единиц

Пример кривой разгонки, полученной по хроматографическим данным, приведен на рис. 3.

5. Плотность

Плотность дизельного топлива ρ , г/см³, при 15 °С рассчитывают по формуле

$$\rho = 1.0593 - \sqrt{0.5352 + 0.000715 \cdot T_{50} - 0.1263 \cdot (\lg T_{50})^2 + 0.00129 \cdot A}, \quad (4)$$

где A – цетановое число, вычисленное по формуле (2); T_{50} – температура, °С, отгона 50 % дизельного топлива, вычисленная по формуле (3).

6. Температура вспышки, определяемая в закрытом тигле

Экспериментально было установлено, что температура вспышки дизельного топлива линейно зависит от цетанового числа (рис. 4).

Температуру вспышки, °С, рассчитывают по формуле

$$T_v = 0.675 \cdot A + 30.8, \quad (5)$$

где A – цетановое число, вычисленное по формуле (2).

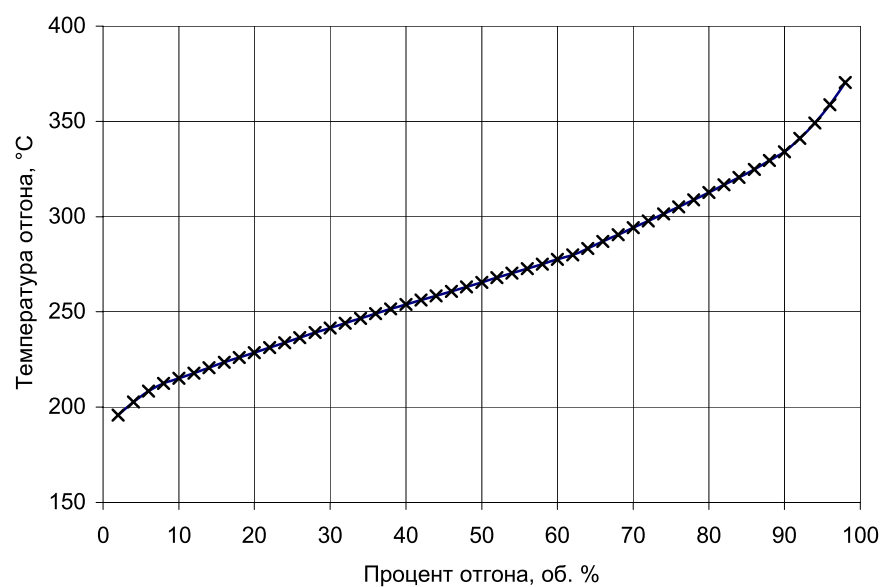


Рис. 3. Пример кривой разгонки дизельного топлива, получаемой по хроматограмме

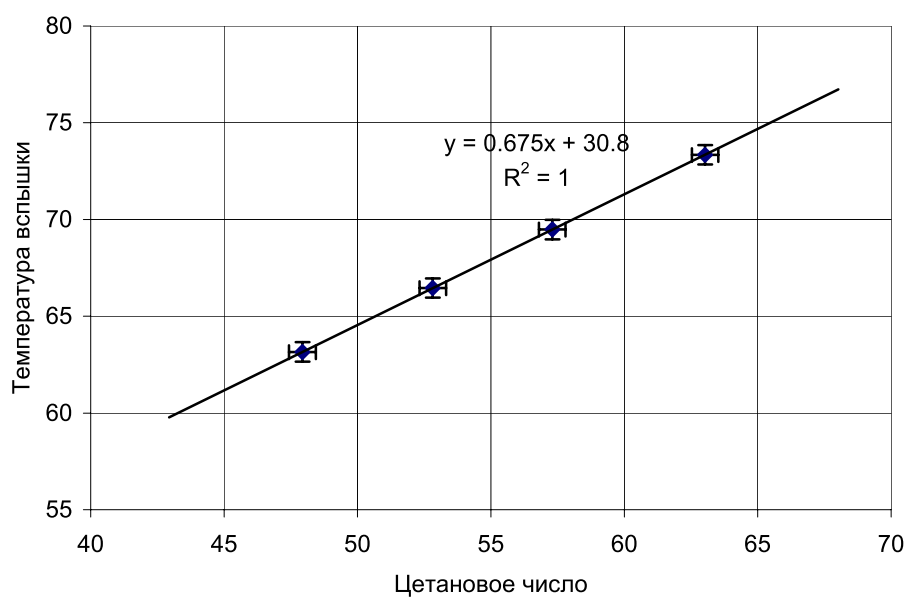


Рис. 4. Зависимость температуры вспышки от цетанового числа дизельного топлива

7. Метрологические характеристики методики

Разработанная методика обеспечивает определение физико-химических свойств дизельного топлива с погрешностями, не превышающими значений, приведенных в табл. 4.

Таблица 4

Характеристики погрешности измерений цетанового числа, фракционного состава, плотности и температуры вспышки

Наименование показателя качества	Показатель сходимости $\sigma_{ex,P}^0[\Delta]$ при доверительной вероятности 0.95	Границы основной абсолютной погрешности при доверительной вероятности 0.95
Цетановое число	0.3	± 3.0
Фракционный состав, представленный температурами, °C:		
50 % отгона	1.5	± 15.0
96 % отгона	1.5	± 15.0
Плотность при 20 °C, кг/м ³	1.4	± 8.0
Температура вспышки, определяемая в закрытом тигле, °C	0.2	± 6.0

Представленные в таблице значения абсолютной погрешности обусловлены погрешностями контрольных образцов дизельного топлива. Возможно уменьшение погрешности методики за счет увеличения аккредитованных лабораторий, принимающих участие в аттестации образцов.

8. Заключение

Таким образом, по результатам только одного газохроматографического измерения образца дизельного топлива, длящегося порядка 140 мин, можно определить в комплексе такие важные его характеристики, как: содержание нормальных парафинов, фракционный состав, соответствующий ГОСТ 2177, цетановое число, соответствующее ГОСТ 3122, плотность, соответствующую ГОСТ 3900, температуру вспышки, соответствующую ГОСТ 6356.

Разработанная методика комплексного анализа параметров дизельного топлива может использоваться как альтернативная методам по ГОСТ, ISO, ASTM и EN. Ее могут использовать организации, не имеющие специфического оборудования для воспроизведения стандартных методов. Стабильность воспроизводимости результатов позволяет четко выявлять несоответствие продуктов ГСМ их сертификатам, когда имеются факты фальсификации смешения и разбавления ГСМ.

Потребителями данной методики могут быть любые производители, поставщики, переработчики или получатели нефтепродуктов или нефтяных фракций, а также контрольные лаборатории и организации по исследованию нефти и нефтепродуктов. Возможность расчета на основе данных углеводородного анализа довольно большого количества эффективных параметров как промежуточных, так и товарных видов нефтепродуктов позволяет использовать данную

МВИ при построении на нефтеперерабатывающих предприятиях системы прогнозирования и оптимизации процессов компаундирования при производстве бензинов, реактивного и дизельного топлива [20].

Литература

1. МВИ.МН 998-99 Методика газохроматографического определения параметров автомобильных бензинов.
2. СТБ 1276-2001 Топлива для двигателей внутреннего сгорания. Бензин неэтилированный. Методика определения параметров.
3. ASTM D 2887-93 Standard Test Method for Boiling Range Distribution of Petroleum Fractions by Gas Chromatography.
4. ГОСТ 6356-75 Нефтепродукты. Метод определения температуры вспышки в закрытом тигле.
5. Бычков С. М., Гацуха С. В. и др. // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2000. Т. 66. С.58.
6. Бычков С. М., Гацуха С. В. и др. // Pittsburgh Conference on Analytical Chemistry and Applied Spectroscopy. 2000. P.1621.
7. Бычков С. М., Гацуха С. В. и др. // Химия и технология топлива и масел. 2001. № 4 (508). С. 44.
8. ТУ РБ 14597800.001-98 Система регистрации, обработки и хранения спектрометрической информации ЮНИХРОМ 97. Технические условия.
9. Restek. Каталог хроматографических аксессуаров за 2001 г. С. 26.
10. ГОСТ 3122-67 Топлива дизельные. Метод определения цетанового числа.
11. ГОСТ 2177-99 Нефтепродукты. Методы определения фракционного состава.
12. ГОСТ 3900-85 Нефть и нефтепродукты. Методы определения плотности.
13. ГОСТ 27768 Топливо дизельное. Определение цетанового индекса расчетным методом.
14. Черепица С. В., Мазаник А. Л. // Тр. междунар. науч.-практ. конф. «Качество-99», 1999 г. С. 146.
15. ГОСТ 305-82 Топливо дизельное. Технические условия.
16. ТУ 38.1011348-99 Топливо дизельное экологически чистое. Технические условия.
17. ТУ 38.401-58-110-94 Топливо дизельное экспортное. Технические условия.
18. ТУ 38.101889-00 Топливо дизельное зимнее ДЗп с депрессорной присадкой. Технические условия.
19. ТУ 38.001355-99 Топливо летнее для дизелей. Технические условия.
20. Черепица С. В., Бычков С. М. и др. // Химия и технология топлива и масел. 2003. № 6. С. 45.

DETERMINATION OF THE BASIC INSPECTED DIESEL FUELS PARAMETERS BY GAS CHROMATOGRAPH METHOD

S. V. Charapitsa, S. M. Bychkow, A. M. Kavalenka, A. L. Mazanik,
M. M. Makajed, N. N. Hremiaka*, D. E. Kuzmiankou**, J. L. Luchynina**

Gas chromatograph method for determination of the basic inspected diesel fuels parameters has been developed. In one measurement, that lasts about 140 minutes, concentration of normal paraffins, boiling range distribution, cetane number, density, ignition point of diesel fuel sample could be determined. The method could be used by any manufacturer, contributor, oil refinery or consumers of petrochemicals or petroleum fractions as testing laboratories and petroleum/petrochemicals research organizations.

* Mosyr Refinery, Belarus.

** State Expert Forensic Center of Republic of Belarus.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЭТАНОЛА В КАЧЕСТВЕ ВНУТРЕННЕГО СТАНДАРТА ПРИ ГАЗОХРОМАТОГРАФИЧЕСКОМ КОЛИЧЕСТВЕННОМ ОПРЕДЕЛЕНИИ СОДЕРЖАНИЯ ТОКСИЧНЫХ МИКРОПРИМЕСЕЙ В ВОДКЕ И СПИРТЕ ЭТИЛОВОМ. ОТ ИДЕИ ДО ВНЕДРЕНИЯ В ПОВСЕДНЕВНУЮ ПРАКТИКУ

**С. В. Черепица, С. М. Бычков, А. Н. Коваленко, А. Л. Мазаник,
Н. М. Селемина*, О. Б. Серединская****

Правила приемки при изготовлении водки и спирта этилового регламентируют предельное содержание токсичных микропримесей. В соответствии с ГОСТ 5363-93 [1], ГОСТ 5964-93 [2] и ГОСТ Р 51652-2000 [3] нормируется содержание следующих микропримесей: альдегид уксусный (ацетальдегид), этиловый эфир уксусной кислоты (этилацетат), метиловый эфир уксусной кислоты (метилацетат), спирт метиловый (метанол), спирт изопропиловый (2-пропанол), спирт пропиловый (1-пропанол), спирт изобутиловый (2-метил-1-пропанол), спирт бутиловый (1-бутанол), спирт изоамиловый (3-метил-1-бутанол). Аналогичные правила приемки на предельное содержание летучих токсичных микропримесей в алкогольных напитках (spirits drinks) содержатся в нормативных документах ЕС [4].

Правила приемки как в ГОСТ, так и в нормативных документах ЕС, регламентируют предельное содержание в объемных процентах для метанола и в миллиграммах для всех остальных перечисленных выше токсичных микропримесей в пересчете на безводный спирт (absolute alcohol).

Для количественного определения содержания токсичных микропримесей в водке и спирте этиловом был разработан газохроматографический экспресс-метод по ГОСТ Р 51698-2001 [5]. В соответствии с ГОСТ Р 51698-2001 газохроматографическое определение содержания токсичных микропримесей выполняется по абсолютной градуировке. Метод абсолютной градуировки обладает рядом недостатков.

Во-первых, необходимо приготавливать и в дальнейшем использовать несколько градуировочных смесей. Это влечет за собой приобретение химически особо чистых реактивов. ГОСТ Р 51698-2001 предусматривает приготовление градуировочных смесей этилового спирта с содержанием токсичных примесей на уровне единиц мг на литр безводного спирта методом последовательного разбавления первоначально приготовленных градуировочных смесей с большим, порядка 1000 мг на литр безводного спирта, содержанием исследуемых токсичных примесей. Но приобретение ректификованного этилового спирта с содержанием токсичных примесей менее 1 мг на литр безводного спирта в количестве нескольких литров в месяц представляется весьма проблематичным. Как следствие, все контрольные лаборатории центров сертификации (Госстандарт), центров гигиены и общественного здоровья (Минздрав), спиртзаводы (Минсельхозпрод) вынуждены производить закупки ГСО градуировочных растворов водки и спирта этилового.

* РУП «Минск Кристалл», Беларусь.

** ОАО «Невинномысский Азот», Россия.

Во-вторых, сходимость, воспроизводимость и погрешность результатов измерений сильно зависят от нестабильности работы хроматографа, объема вводимой пробы, нестабильности химического состава ГСО при хранении после первоначального вскрытия ампул.

В-третьих, построение градуировочных таблиц требует значительных трудозатрат. В соответствии с ГОСТ Р 51698 для построения одной градуировочной таблицы на спирт этиловый или водку требуется практически одна рабочая смена, а градуировку необходимо проводить не реже одного раза в две недели.

В соответствии с нормативными документами ЕС [4] газохроматографическое определение содержания токсичных микропримесей в алкогольных напитках (spirits drinks) выполняется с применением метода внутреннего стандарта (ВС). В качестве добавки ВС предлагается использовать pentan-3-ol. Для определения количественного содержания примесей в пересчете на безводный спирт требуется еще провести измерения процентного содержания этилового спирта в испытуемой пробе [4].

Ранее в работах [6–10] была высказана идея о возможности использования основного компонента (растворителя) для количественного определения примесей. На предложенный Институтом ядерных проблем метод получен патент Республики Беларусь № 6801. Для применения нового метода в испытательных и контрольных лабораториях на производстве необходимо провести работу по его практической апробации по возможности максимально широким кругом исследователей в разных лабораториях при работе на разных приборах. Для решения поставленной задачи выбран газохроматографический анализ содержания токсичных микропримесей в водке и спирте этиловом по ГОСТ Р 51698. Ниже в работе подробно описана процедура использования основного компонента этилового спирта в качестве внутреннего стандарта для определения количественного содержания токсичных микропримесей в водке и спирте этиловом, представлены разработанные шаблоны обработки измеренных данных. Шаблоны позволяют работать исследователям с различными аналитическими приборами в едином стиле: задавать методические режимы работы прибора, обеспечивать построение абсолютной по ГОСТ Р 51698 и относительной градуировки (относительно этанола), создавать сценарии обработки измеренных хроматограмм, выполнять оперативный контроль качества измерений непосредственно в рабочей программе, в ней же создавать итоговые отчеты в соответствии с руководством по качеству испытательной лаборатории. Предложенные шаблоны позволяют осуществить принцип, когда результаты работы 1-го оператора за 1 смену хранятся в 1 файле. Эти файлы могут переноситься с одного прибора на другой простым копированием, как это делается, например, с документами в формате Microsoft Word. После этого исследователи могут беспрепятственно сравнивать и анализировать как непосредственно измеренные экспериментальные данные, так и результаты обработки, выполненные на разных аналитических приборах в разных лабораториях.

1. Использование этанола в качестве внутреннего стандарта

Хорошо известно, что повышение метрологических характеристик получаемых результатов можно достичь путем использования метода внутреннего стандарта (ВС). Традиционный подход использования ВС в данном случае про-

блематичен. *Во-первых*, необходимо быть заранее уверенным, что вещество, вводимое в качестве ВС, не присутствует изначально в анализируемой смеси. *Во-вторых*, регламентирующие документы предусматривают, чтобы количество вводимой добавки ВС было по порядку величины сравнимо с содержанием искоемых примесей. Но во многих случаях концентрации определяемых примесей составляют тысячные и менее доли процента. Например, ГОСТ 5363-93 на водку и ГОСТ 5964-93 на спирт этиловый регламентирует содержание альдегидов и высших спиртов (сивушные масла) на уровне нескольких миллиграмм на литр безводного спирта, а это составляет порядка десятитысячных процента. Проблематичность выполнения выше указанных требований вынудило разработчиков действующего ГОСТ Р 51698 отказаться от метода ВС и применить метод абсолютной градуировки.

Использование этанола в качестве внутреннего стандарта при хроматографическом количественном определении содержания токсичных микропримесей в водке и этиловом спирте позволяет существенно упростить всю процедуру выполнения измерений, так как отпадает необходимость приготовления градуировочных смесей и устраняется зависимость получаемых результатов относительно нестабильности работы хроматографа и объема вводимой пробы. Отпадает необходимость частых закупок образцов ГСО и проведение частых градуировок прибора.

Необходимо обратить внимание на тот факт, что использование этанола в качестве ВС естественным образом вытекает из требований нормативной документации на контроль качества алкогольной продукции. В правилах приемки на водку по ГОСТ 5363-93 и на спирт этиловый по ГОСТ 5964-93, а также в нормативных документах ЕС [4] содержание токсичных микропримесей нормируется непосредственно в пересчете на безводный спирт. Заметим, что так как вода не регистрируется пламенно-ионизационным детектором, то на измеренной хроматограмме испытуемого образца сразу представлено количественное содержание зарегистрированных микропримесей относительно этанола. Дополнительных измерений, связанных с необходимостью определения процентного объемного содержания этилового спирта в исследуемом образце, как того требует п. 4.5.2. ГОСТ Р 51698, в данном случае уже не требуется.

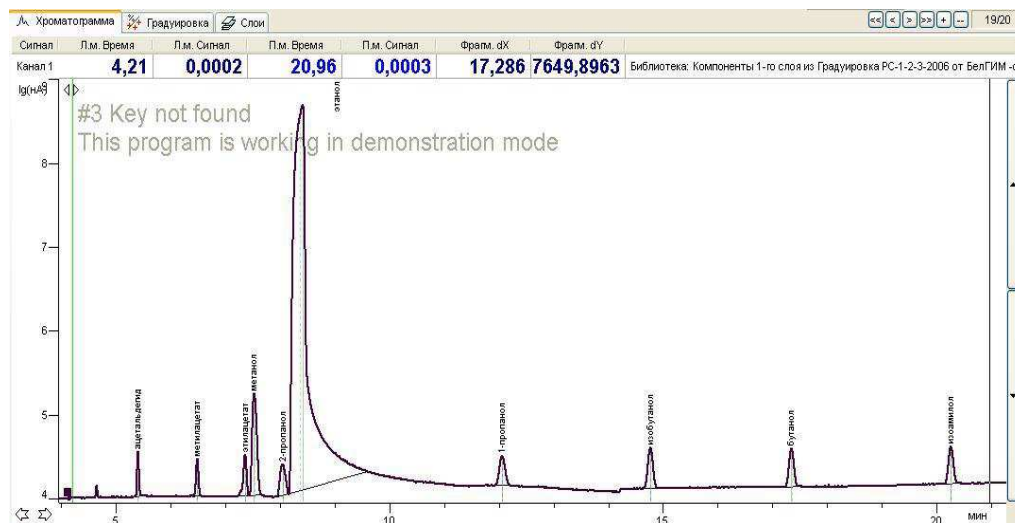
На рисунках 1, а и 1, б представлена экспериментально измеренная хроматограмма ГСО 8404-2003 стандартного образца состава раствора токсичных микропримесей в водно-спиртовой смеси (комплект РС, образец РС-1). Метрологические характеристики измеренного образца представлены на рис. 2.

Здесь важно обратить внимание производителей стандартных образцов ГСО 8405-2003 и ГСО 8404-2003, что в паспорте указанных ГСО наряду с концентрацией токсичных микропримесей в единицах мг на 1 дм³ водно-спиртового раствора стоит также приводить значения концентраций токсичных микропримесей в единицах мг на 1 дм³ безводного спирта.

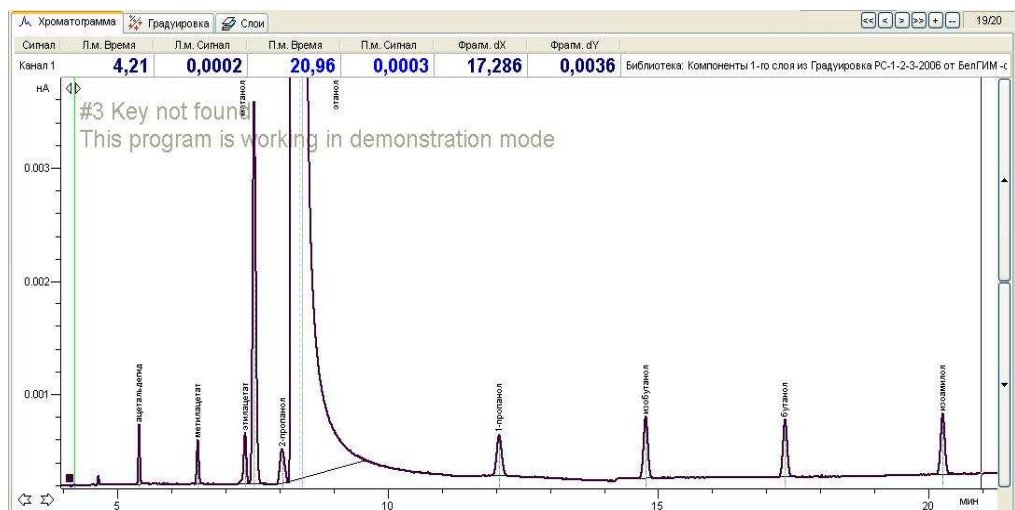
2. Градуировка прибора

Используемый в газовом хроматографе пламенно-ионизационный детектор (ПИД) имеет различающиеся коэффициенты чувствительности к разным компонентам исследуемых смесей. Градуировка хроматографа состоит в нахождении относительных коэффициентов чувствительности детектора к каждому из исследуемых компонентов токсичных микропримесей относительно компонента этилового спирта.

Градуировку хроматографа выполняют по аттестованным градуировочным смесям. В качестве градуировочных смесей можно использовать как ГСО состава растворов токсичных микропримесей в этиловом спирте (комплект РС) или ГСО состава растворов токсичных микропримесей в водно-спиртовой смеси (комплект РВ), так и самостоятельно приготовленные весовым/объемным методом аттестованные смеси.



a



б

Рис. 1. Хроматограмма образца РС-1 из комплекта ГСО 8404-2003: *a* – для представления всех зарегистрированных пиков исследуемых токсичных микропримесей и пика этанола масштаб представления по вертикальной оси выбран логарифмическим, *б* – хроматограмма та же, но представлена в линейном масштабе



1 ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ О ГСО

НАИМЕНОВАНИЕ ГСО: стандартные образцы состава растворов токсичных микропримесей в водно-спиртовой смеси (комплект РВ).

ВЫПУСКАЕТСЯ в соответствии с сертификатом об утверждении типа № 2755, действительным до 22 июля 2008г.

НАЗНАЧЕНИЕ ГСО: градуировка газовых хроматографов и фотоэлектроколориметров при определении содержания токсичных микропримесей в водке; поверка газовых хроматографов, контроль погрешности методики выполнения измерений содержания токсичных микропримесей в водке; аттестация методов выполнения измерений.

РАЗРАБОТЧИКИ ГСО: Государственное научное учреждение "Всероссийский научно-исследовательский институт пищевой биотехнологии" (ГНУ "ВНИИПБТ"), Федеральное государственное унитарное предприятие "Уральский научно-исследовательский институт метрологии" (ФГУП "УНИИМ").

ИЗГОТОВИТЕЛЬ ГСО: ГНУ "ВНИИПБТ".

2 МЕТРОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ГСО партии № 13

2.1 Аттестованные значения СО

Аттестованная характеристика СО	Обозначение единицы физической величины	РВ-1	РВ-2	РВ-3	Относительная погрешность аттестованного значения при $P=0,95$
Массовая концентрация уксусного альдегида (ацетальдегида)	мг/дм ³	8,58	4,28	1,15	$\pm 5,0 \%$
Массовая концентрация метилового эфира уксусной кислоты (метилацетата)	мг/дм ³	9,06	4,53	0,91	$\pm 5,0 \%$
Массовая концентрация этилового эфира уксусной кислоты (этилацетата)	мг/дм ³	8,83	4,41	0,88	$\pm 5,0 \%$
Объемная доля метилового спирта (метанола)	%	0,0102	0,0053	0,0014	$\pm 5,0 \%$
Массовая концентрация изопропилового спирта (2-пропанола)	мг/дм ³	8,25	4,27	1,15	$\pm 5,0 \%$
Массовая концентрация пропилового спирта (1-пропанола)	мг/дм ³	7,88	3,94	0,79	$\pm 5,0 \%$
Массовая концентрация изобутилового спирта (2-метил-1-пропанола)	мг/дм ³	7,86	3,93	0,79	$\pm 5,0 \%$
Массовая концентрация бутилового спирта (1-бутанола)	мг/дм ³	7,94	3,97	0,79	$\pm 5,0 \%$
Массовая концентрация изоамилового спирта (3-метил-1-бутанола)	мг/дм ³	7,94	3,97	0,79	$\pm 5,0 \%$

Срок годности экземпляра ГСО: 1 год. Экземпляр СО после вскрытия первоначальной упаковки хранят не более 6 месяцев.

3 ТЕХНИЧЕСКИЕ ДАННЫЕ. Материал ГСО комплекта РВ представляет собой водно-спиртовую смесь объемной долей этилового спирта 40 %, приготовленную из спирта этилового ректифицированного из пищевого сырья по ГОСТ Р 51652-2000 и дистиллированной воды с внесенными добавками токсичных микропримесей. Материал ГСО расфасован по $(15,0 \pm 0,5)$ см³ в пенициллиновые флаконы вместимостью 20 см³, закрытые полиэтиленовыми крышками, которые герметично покрыты слоем парафина.

4 ПОРЯДОК ПРИМЕНЕНИЯ. ГСО применяют в соответствии с ГОСТ Р 51698-2000, ГОСТ 5363-93, ГОСТ Р ИСО 5725-6-2002, МИ 2651-2001, МИ 2336-2002 и инструкцией по применению.

5 ТРЕБОВАНИЯ БЕЗОПАСНОСТИ. По степени воздействия на организм этиловый спирт относится к 4 классу опасности по ГОСТ 12.1.007-76. Помещение, в котором проводят работы с ГСО, должно быть оборудовано приточно-вытяжной вентиляцией по ГОСТ 12.4.021-75.

6 КОМПЛЕКТ ПОСТАВКИ: комплект ГСО, паспорт ГСО.

7 СВИДЕТЕЛЬСТВО О ПРИЕМКЕ

Дата выпуска ГСО партии № 13 01.09.2006

Контролер

Т.М. Шелехова Т.М. Шелехова

8 УСЛОВИЯ ТРАНСПОРТИРОВАНИЯ И ХРАНЕНИЯ. ГСО следует хранить в холодильнике при температуре от 4 °С до 10 °С. ГСО можно перевозить всеми видами транспорта. В качестве транспортной тары должны быть использованы коробки из картона или пенопласта. Упаковка с ГСО не должна подвергаться резким ударам, воздействию атмосферных осадков и агрессивных химических веществ.

9 ГАРАНТИЙНЫЕ ОБЯЗАТЕЛЬСТВА. Изготовитель гарантирует стабильность аттестованных значений в течение срока годности экземпляра ГСО при соблюдении условий хранения, транспортирования и порядка применения.

10 ПРИЛОЖЕНИЕ. Инструкция по применению ГСО.

Директор ГНУ "ВНИИПБТ"



В.А. Поляков

В.А. Поляков

Рис. 2. Типовой паспорт ГСО 8405-2003 на стандартные образцы состава растворов токсичных микропримесей в водно-спиртовой смеси (комплект РВ) от ГНУ «ВНИИПБТ», г. Москва. Курсивом представлены концентрации токсичных микропримесей в мг/дм³ в пересчете на безводный спирт в предположении, что объемная концентрация этанола в данных водно-спиртовых растворах составляет 40 %. Как того требуют приемочные ГОСТ 5363-93, ГОСТ 5964-93 и ГОСТ Р 51652-2000

Записывают хроматограммы анализа каждой градуировочной смеси. Регистрируют время удерживания и площади пиков определяемых веществ. Измерения выполняют не менее двух раз. Градуировочную характеристику получают, обрабатывая полученные экспериментальные данные методом наименьших квадратов.

Численные значения относительных коэффициентов отклика детектора K_i получают из хроматографических данных ГСО (аттестованных смесей) с известными концентрациями этанола и исследуемых примесей:

$$K_i = \frac{S_{Et}^{cert} \cdot X_i^{cert}}{S_i^{cert} \cdot X_{Et}^{cert}}, \quad (1)$$

где S_i^{cert} и S_{Et}^{cert} – площади пиков i -го компонента и этанола соответственно, X_i^{cert} и X_{Et}^{cert} – концентрации i -го компонента и этанола соответственно.

Концентрация C_i [мг/л], в пересчете на безводный спирт, i -го компонента в пробе описывается следующим выражением:

$$C_i = \frac{K_i \cdot S_i \cdot C_{Et}}{S_{Et}}, \quad (2)$$

где S_i и S_{Et} – площади пиков i -го компонента и этанола соответственно, K_i – коэффициент относительного отклика детектора для i -го компонента, C_{Et} – концентрация этанола в мг/л, в пересчете на безводный спирт. При нормальных условиях $C_{Et} = 789300$ мг/л.

Полученные в результате проведенных экспериментальных исследований относительные коэффициенты чувствительности представлены в табл. 1. Испытания данного ГСО РВ были выполнены 18-06-2007 в лаборатории РУП «БелГИМ», 21-06-2007 в лаборатории РУП «Витебский ЛВЗ» и 29-05-2007 в лаборатории РУП «Брестский ЛВЗ». Необходимо обратить внимание на то, что имена операторов неизвестны, также неизвестны режимы работы хроматографов и объемы вводимой пробы в инжектор. Размерность коэффициента чувствительности абсолютного в данном случае имеет следующий вид [(mg/L)/(pA×min)].

Метанол и этанол обладают относительно близкими физико-химическими свойствами. И в то же время экспериментально измеренные ОСКО K_i для метанола заметно больше, чем, например, ОСКО K_i ацетальдегидов и эфиров, не говоря уже о ОСКО K_i для всех остальных определяемых высших спиртов.

Анализ полученных экспериментальных данных указывает на то, что испытанные образцы имели различный количественный состав, хотя паспорта были выписаны одинаковые. Для выяснения причины выявленных расхождений необходимо провести серию межлабораторных сличительных испытаний МСИ аттестованной смеси, но разлитой из одной емкости.

Таблица 1

Результаты экспериментальных исследований по определению относительных коэффициентов чувствительности одной партии ГСО 8405-2003.

Дата выпуска партии 15 от 22-03-2007

Дата выпуска партии 13.01.22-03-2007

Компонент ГСО 8405- 2003	Коэффициенты чувствительности K_i и K_{abs}								ОСКО, %
	РУП «БелГИМ»		РУП «ВитЛВЗ»		РУП «БрестЛВЗ»		Средние значения		
	K_{abs}	K_i	K_{abs}	K_i	K_{abs}	K_i	$\langle K_{abs} \rangle$	$\langle K_i \rangle$	
Альдегид ук- сусный (аце- тальдегид)		1.628		1.734		1.730		1.698	3.6
Метилловый эфир уксусной кислоты (ме- тилацетат)		1.530		1.641		1.552		1.574	3.7
Этиловый эфир уксусной кислоты (этилацетат)		1.035		1.108		1.033		1.058	4.1
Спирт мети- ловый (мета- нол)		1.220		1.292		1.349		1.287	5.0
Спирт этило- вый (этанол)	703		761		773		746		5,0
Спирт изо- пропиловый (2-пропанол)		1.015		1.003		1.022		1.014	0.9
Спирт пропи- ловый (1-пропанол)		0.719		0.729		0.737		0.728	1.2
Спирт изобу- тиловый (2-метил-1- пропанол)		0.542		0.540		0.533		0.538	0.9
Спирт бутило- вый (1-бутанол)		0.604		0.599		0.613		0.605	1.2
Спирт изоами- ловый (3-метил- 1-бутанол)		0.578		0.574		0.591		0.581	1.6

3. Анализ образца

В испаритель (инжектор) микрошприцем вместимостью 10, 5 или 1 мм³ вводят 1 мм³ образца водки или спирта и выполняют хроматографическое разделение смеси. Регистрируют пики в области времени удерживания, соответствующего каждому веществу градуировочной смеси. Образец анализируют два

раза в условиях повторяемости в соответствии с требованиями ИСО5725-1. За результат измерений принимают среднеарифметическое значение двух параллельных определений массовой концентрации i -го вещества, полученных в условиях повторяемости, если выполняется условие приемлемости по формуле

$$\frac{2|C_{i1} - C_{i2}| \cdot 100}{(C_{i1} + C_{i2})} \leq r_i, \quad (3)$$

где C_{i1}, C_{i2} – результаты параллельных определений массовой концентрации i -го вещества в анализируемой пробе, мг/дм³, 100 – множитель для пересчета в процентах; r_i – предел повторяемости для i -го вещества.

Если условие приемлемости по формуле (3) не выполняется, выясняют причины превышения предела повторяемости, устраняют их и повторяют выполнение измерений.

Для перевода концентрации метилового спирта в единицы объемных процентов на литр безводного этилового спирта необходимо полученное значение концентрации метилового спирта, выраженное в мг/дм³, разделить на величину объемной плотности метилового спирта в соответствии со следующим выражением:

$$X_{Me} [\%] = C_{Me} [\text{мг/дм}^3] / \rho_{Me} [\text{мг/дм}^3] * 100 \%, \quad (4)$$

где величина объемной плотности метилового спирта ρ_{Me} равна 792800 мг/дм³.

Примеры представления выполненных измерений представлены на рис. 3, 4. В закладке **Калькулятор** ПО UniChrom в столбце **Е** отображаются полученные значения сходимости по двум измерениям в столбцах **В** и **С**. В столбце **Г** отображается значение критерия полученной сходимости. В столбцах **Ж**, **З** и **И** представлены результаты контроля погрешности выполненных измерений. Для малых концентраций исследуемых примесей спиртовых растворов РС-3 довольно часто имеют место неудовлетворительные критерии сходимости и погрешности измерений исследуемых примесей спиртовых растворов РС-3 довольно часто имеют место неудовлетворительные критерии сходимости и погрешности измерений.

4. Заключение

Предложенный метод может быть использован в контрольных лабораториях любых производителей, поставщиков и потребителей алкогольной продукции, в центрах стандартизации и метрологии, центрах гигиены, санитарии и общественного здоровья, в экспертно-криминалистических лабораториях по исследованию алкогольной продукции.

Важно отметить, что предложенный методический подход может быть использован в многочисленных газохроматографических анализах по определению количественного содержания микропримесей в основном веществе. Например, входной и выходной контроль количественного содержания примесей в метаноле, бутаноле, пропаноле, амилоле, гексане, гептане, декане, бензоле [11, 12], толуоле [13], ксилоле [14–17], акрилонитриле [18], винилацетате и т. д. Целое семейство стандартов на определение примесей в органических соединениях.

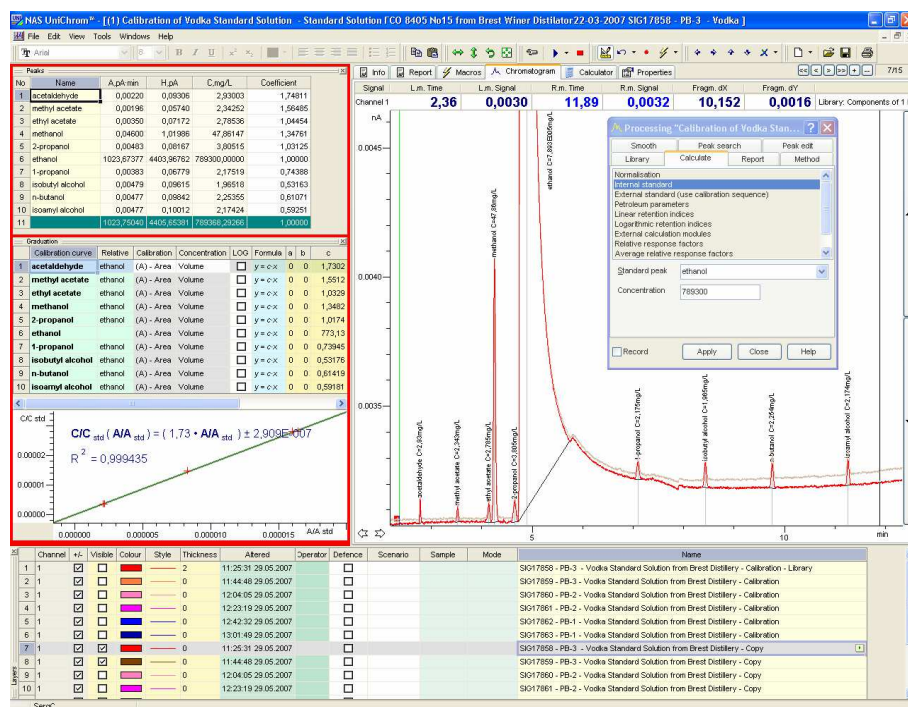


Рис. 3. Пример расчета массовых концентраций токсичных микропримесей в водке с использованием основного компонента (этанола) в качестве внутреннего стандарта

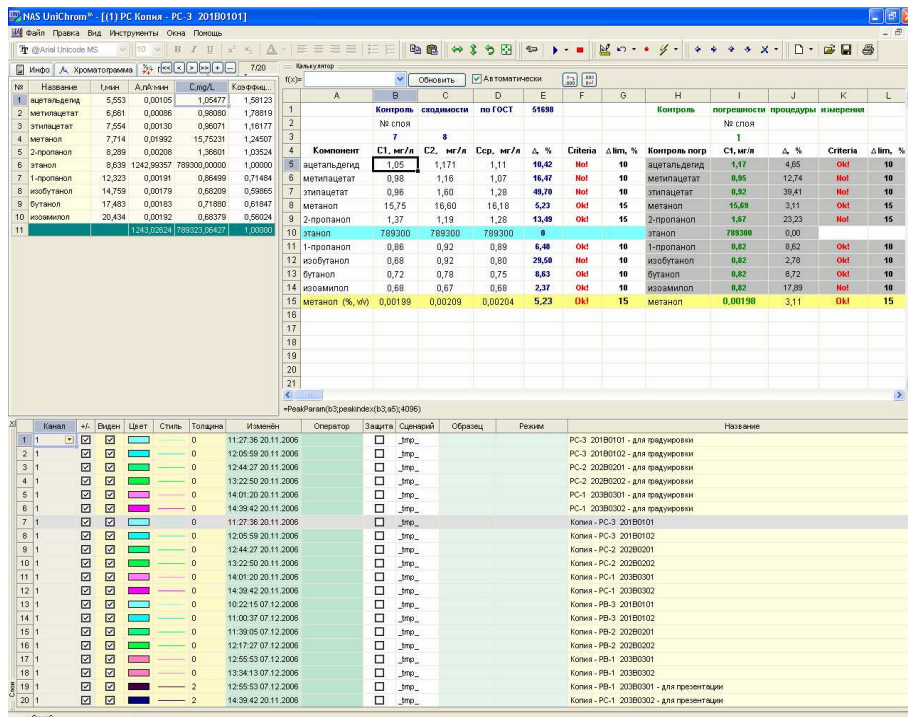


Рис. 4. Пример представления метрологических характеристик выполненных измерений

В связи с разработкой и внедрением широкодиапазонного детектора по теплопроводности (катарометр) появляется возможность реализовать газохроматографические измерения по определению количественного компонентного состава природного горючего газа не по абсолютной градуировке, как того требуют действующие ГОСТ 23781 [19] и ISO 6974 [20], а использовать основной компонент метан в качестве внутреннего стандарта.

Литература

1. ГОСТ 5363-93 Водка. Правила приемки и методы анализа.
2. ГОСТ 5964-93 Спирт этиловый. Правила приемки и методы анализа.
3. ГОСТ Р 51652-2000 Спирт этиловый ректификованный из пищевого сырья. Технические условия.
4. Commission Regulation EC 2870-2000. Determination of Volatile Substances and Methanol of Spirit Drinks. No 1576/89.
5. ГОСТ Р 51698-2001 Водка и спирт этиловый из пищевого сырья. Газохроматографический экспресс-метод определения содержания токсичных микропримесей.
6. Charapitsa S. V., Bychkov S. M. и др. // Abstracts of Pittsburgh Conference on Analytical Chemistry and Applied Spectroscopy. 2003. № 1480P. P. 526.
7. Черепица С. В., Бычков С. М. и др. // Журнал аналитической химии. 2003. Т. 58, № 4. С. 416.
8. Черепица С. В., Бычков С. М. и др. // Партнеры и конкуренты. 2004. № 8. С. 35.
9. Черепица С. В., Бычков С. М. и др. // Партнеры и конкуренты. 2006. № 2. С. 23.
10. Бычков С. М., Коваленко А. Н. и др. // Тезисы докладов XVIII Менделеевского съезда по общей и прикладной химии. Москва. 2007 г. С. 98.
11. ГОСТ 2706.2-95 Углеводороды ароматического ряда. Хроматографический метод определения основного вещества и примесей в бензоле, толуоле и ксилоле.
12. ASTM D 4492-03 Standard Test Method for Analysis of Benzene by Gas Chromatography.
13. ISO 5279-1980 Toluene for industrial use. Determination of impurities. Gaschromatographic method.
14. UOP 543-97 Trace Non-Aromatic Hydrocarbons in High-Purity Aromatics by Gas Chromatography.
15. UOP 720-93 Impurities in high purity p-xylene by GC.
16. UOP 798-96 Trace p-DEB or indan in C8 aromatics and trace C8 aromatics in p-DEB by GC.
17. ASTM D 3798-03 Standard Test Method for Analysis of p-Xylene by Gas Chromatography.
18. ASTM E 1863-97 Standard Test Method for Analysis of Acrylonitrile by Gas Chromatography.
19. ГОСТ 23781-87 Газы горючие природные. Хроматографический метод определения компонентного состава.
20. ISO 6974-6:2002 Natural gas. Determination of composition with defined uncertainty by gas chromatography. Determination of hydrogen, helium, oxygen, nitrogen, carbon dioxide and C1 to C8 hydrocarbons using three capillary columns.

THE BASIC COMPONENT (SOLVENT) AS THE INTERNAL STANDARD IN THE CHROMATOGRAPHIC QUANTITY DETERMINATION OF IMPURITIES

S. V. Charapitsa, S. M. Bychkov, A. N. Kovalenko, A. L. Mazanik,
N. M. Selezmina*, O. B. Seredinskaya**

The method of the chromatographic quantity determination of impurities using the basic component (solvent) as internal standard is proposed. The analysis of the experimental data measured in the accredited laboratories of the Minsk, the Gomel and the Brest winery and distillery "Krystal" (Belarus) show the high metrology characteristics of the proposed method.

* RUE "Minsk Krystal", Belarus.

** LLC "Nevinnomyssk Azot", Russia

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ И ФИЗИКИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ	
<i>Барышевский В. Г., Ровба А. А.</i> Двухлучепреломление и спиновый дихроизм дейтронов в нуклонной мишени в области энергий 5–20 МэВ.....	8
<i>Барышевский В. Г., Ширвель А. Р.</i> Осцилляции спина и спиновый дихроизм дейтронов, вращающихся в накопительном кольце.....	18
<i>Силенко А. Я.</i> Тензорная электрическая поляризуемость дейтрона в экспериментах в накопительных кольцах.....	25
<i>Силенко А. Я.</i> Динамика спина в экспериментах по поиску электрических дипольных моментов частиц, проводимых в накопительных кольцах	47
<i>Барышевский В. Г., Черкас С. Л.</i> Чувствительность нейтронного кристалл-дифракционного эксперимента к электрическому дипольному моменту нейтрона и Р-, Т-нечетным ядерным силам.....	71
<i>Барышевский В. Г., Черкас С. Л., Мацукевич Д. Н.</i> Использование лазера, помещенного в аксиальное электрическое поле, для поиска нарушения Р-, Т-инвариантности.....	79
<i>Тихомиров В. В., Малышиц В. В., Сягло С. Э., Целков Ю. А.</i> О возможностях исследования начальной стадии эволюции Вселенной.....	96
<i>Веренич К. А., Калашиников В. Л., Черкас С. Л.</i> Квантовая механика замкнутой коллапсирующей Вселенной.....	111
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ФИЗИКА ЧАСТИЦ И ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ	
<i>Коржик М. В., Качанов В. А., Анненков А. Н., Мисевич О. В., Федоров А. А.</i> Сцинтилляционные кристаллы вольфрамата свинца для точной электромагнитной калориметрии на ускорителях с высокой светимостью.....	118
<i>Дорменев В. И., Дробышев Г. Ю., Коржик М. В., Мисевич О. В.</i> Электромагнитный калориметр на основе кристаллов вольфрамата свинца для эксперимента PANDA (GSI, Германия)	127
<i>Дробышев Г. Ю., Борисевич А. Е., Войтик О. Л., Делендик К. И.</i> Источник позитрониев на основе анодного оксида алюминия для эксперимента по измерению массы антиводорода.....	132
<i>Дробышев Г. Ю., Борисевич А. Е., Дорменев В. И., Коржик М. В., Корнеев А. Е., Мечинский В. А.</i> Применение кристаллов PWO в компенсированных гибридных калориметрах для экспериментальной физики высоких энергий.....	140
<i>Гниненко С. Н., Дробышев Г. Ю., Кирсанов М. М., Корнеев А. Е., Красников Н. В., Матвеев В. А.</i> Поиск тяжелого нейтрино в эксперименте CMS на LHC.....	151
<i>Барышевский В. Г., Батраков К. Г., Грубич А. О., Гуринович А. А., Лобко А. С., Ровба А. А., Сафронов П. Ф., Столярский В. И., Тарнопольский Б. А., Ульяненок А. П., Феранчук И. Д.</i> Когерентное тормозное и параметрическое рентгеновское излучение нерелятивистских электронов (КТПРИ)	156
<i>Etiore G., Агафонов С. И., Грубич А. О., Лобко А. С., Лаптев А. И., Лопатик А. Р., Кутень С. А., Хрущинский А. А.</i> Подводный спектрометр для системы мониторинга нейтринного телескопа KM3NeT.....	175
ЭЛЕКТРОДИНАМИКА НАНОСТРУКТУР	
<i>Максименко С. А., Слепян Г. Я., Батраков К. Г., Кузир П. П., Мадьяров А. В., Немиленцев А. М., Хрущинский А. А., Шуба М. В.</i> Электромагнитные волны в наноструктурах.....	180

Бондарев И. В. Квантово-электродинамические явления в атомно-допированных углеродных нанотрубках	213
Хрущинский А. А., Пушкарьчук А. Л., Кутень С. А., Килин С. Я., Низовцев А. П. Исследование механических параметров уединенных углеродных нанотрубок методами молекулярной динамики.....	228
Мадьяров А. В. Процессы взаимодействия квантовой точки с электромагнитными полями.....	239
Немиленцев А. М. Плотность фотонных состояний вблизи однослойной углеродной нанотрубки конечной длины.....	247

ПРИКЛАДНАЯ ЭЛЕКТРОДИНАМИКА

Барышевский В. Г., Белоус Н. А., Гуринович А. А., Евдокимов В. А., Лобко А. С., Молчанов П. В., Оськин А. В., Столярский В. И. Экспериментальное исследование объемного лазера на свободных электронах с сеточным резонатором.....	251
Барышевский В. Г., Гуринович А. А. Электродинамические свойства объемного лазера на свободных электронах с сеточным резонатором с переменными параметрами	261
Сытова С. Н. Первые шаги в исследовании хаотической динамики объемных лазеров на свободных электронах.....	270
Карпович В. А., Слепян Г. Я., Родионова В. Н., Волюнец Г. И., Савук А. А., Танана О. В., Гринчук И. А. Электродинамика специальных высокочастотных резонансных систем и микроволновые технологии.....	290

МАГНИТНАЯ КУМУЛЯЦИЯ ЭНЕРГИИ

Барышевский В. Г., Гуринович А. А. Влияние радиационных потерь на процесс излучения в системе «взрывомагнитный генератор – емкостная нагрузка»	321
Сытова С. Н., Тихомиров В. В., Черкас С. Л. Одномерная и двумерная модели спирального магнитокумулятивного генератора: численный анализ и сравнение с экспериментом.....	327

МЕТОДЫ АНАЛИЗА СОСТАВА ВЕЩЕСТВА

Дойников А. А. Пространственно-временная динамика микропузырьковых контрастных агентов в ультразвуковых полях.....	336
Shekhtman A. Protein chemical ligation as an invaluable tool for structural NMR.....	353
Кутень С. А., Хрущинский А. А., Миненко В. Ф., Кухта Т. С. Использование Монте-Карло моделирования для оценки дозовых нагрузок на органы и ткани пациента во время рентгенологических исследований.....	359
Иванов В. И., Лазарчик А. Н. Концепция, задачи и результаты создаваемой сети компьютерного цитогенетического мониторинга населения Республики Беларусь в постчернобыльский период	379
Черепица С. В., Бычков С. М., Коваленко А. Н., Мазаник А. Л., Макоед Н. М., Гремяко Н. Н., Кузменков Д. Е., Лучинина Я. Л. Определение инспектируемых параметров дизельного топлива методом газовой хроматографии.....	392
Черепица С. В., Бычков С. М., Коваленко А. Н., Мазаник А. Л., Селемина Н. М., Серединская О. Б. Использование этанола в качестве внутреннего стандарта при газохроматографическом количественном определении содержания токсичных микропримесей в водке и спирте этиловом. От идеи до внедрения в повседневную практику.....	402

CONTENTS

INTRODUCTION.....	5
FUNDAMENTAL PROBLEMS OF NUCLEAR AND PARTICLE PHYSICS	
<i>Baryshevsky V. G., Rouba A. A.</i> Birefringence and spin dichroism for deuterons with energy 5 – 20 MeV in nucleon target.....	8
<i>Baryshevsky V. G., Shyrvel A. R.</i> Spin oscillations and spin dichroism (the birefringence effect) of deuterons rotating in a storage ring	18
<i>Silenko A. J.</i> Tensor electric polarizability of the deuteron in storage-ring experiments.....	25
<i>Silenko A. J.</i> Spin dynamics in experiments on a search for electric dipole moments of particales, performed in storage rings.....	47
<i>Baryshevsky V. G., Cherkas S. L.</i> Sensitivity of the neutron crystal diffraction experiment to the neutron EDM and to the nuclear P-T-violating forces	71
<i>Baryshevsky V. G., Cherkas S. L. , Matsukevich D. N.</i> Laser in axial electric field as a tool to search for P-, T- invariance violation.	79
<i>Tikhomirov V. V., Malyshchits V. V., Siahlo S. E., Tsalkou Yu. A.</i> On the possibility of investigation of the first stage of the Universe evolution	96
<i>Verenich K. A., Kalashnikov V. L., Cherkas S. L.</i> Quantum mechanics of a closed collapsing Universe.....	111
EXPERIMENTAL HIGH ENERGY AND PARTICLE PHYSICS	
<i>Korzhik M. V., Kachanov V. A., Annenkov A. N., Missevitch O. V., Fedorov A. A.</i> Lead tungstate scintillation crystals for precise electromagnetic calorimetry on high luminosity accelerators.....	118
<i>Dormenev V. I., Drobychev G. Yu., Korzhik M. V., Missevitch O. V.</i> Electromagnetic calorimeter based on the lead tungstate crystals for the PANDA experiment (GSI, Germany).....	127
<i>Drobychev G. Yu., Borisevich A. E., Voitik O. L., Delendik K. I.</i> Positronium source on a basis of anodic aluminum oxide for the experiment on a anti-hydrogen mass measurements.....	132
<i>Drobychev G. Yu., Borisevich A. E., Dormenev V. I., Korjik M. V., Karneyeu A. E., Mechinsky V. A.</i> Application of PWO crystals for construction of compensated hybrid calorimeters for experimental high energy physics.....	140
<i>Gninenko S. N., Drobychev G. Yu., M. Kirsanov M. M. , Korneev A. E., Krasnikov N. V., Matveev V. A.</i> Search for heavy neutrino on CMS experiment at LHC.....	151
<i>Baryshevsky V. G., Bartrakov K. G., Grubich A. O., Gurinovich A. A., Lobko A. S., Rouba A. A., Safronov P. F., Stolyarsky V. I., Tarnopolsky B. A., Ulyanenko A. P., Feranchuk I. D.</i> Coherent bremsstrahlung and parametric x-rays (CB&PXR) from non-relativistic electrons.....	156
<i>Etiopie G., Agafonov S. I., Grubich A. O., Lobko A. S., Laptev A. I., Lopatik A. R., Kuten S. A., Khruschinsky A. A.</i> Underwater spectrometer for monitoring system of KM3NeT neutrino telescope.....	175
ELECTRODYNAMICS OF NANOSTRUCTURES	
<i>Maksimenko S. A., Slepyan G. Ya., Batrakov K. G., Kuzhir P. P., Magyarov A. V., Nemilentsau A. M., Khrutchinski A. A., Shuba M. V.</i> Electromagnetic waves in nanostructures.....	180

Bondarev I. V. Quantum electrodynamic phenomena in atomically doped carbon nanotubes.....	213
Khrutchinsky A. A., Pushkarchuk A. L., Kuten S. A., Kilin S. Ja., Nizovtsev A. P. Research of mechanical parameters of individual carbon nanotubes by methods of the molecular dynamic.....	228
Magyarov A. V. The local field influence on signatures of excitonic Rabi oscillations in an isolated quantum dot driven by the coherent light field	239
Nemilentsau A. M. Photonic density of states in the vicinity of the single-wall finite-length CNT	247

APPLIED ELECTRODYNAMICS

Baryshevsky V. G. , Belous N. A., Gurinovich A. A., Evdokimov V. A., Lobko A. S., Molchanov P. V., Oskin A. V., Stolyarsky V. I. Experimental study of a Volume Free Electron Laser with a "grid" resonator.....	251
Baryshevsky V. G., Gurinovich A. A. Electrodynamical properties of a Volume Free Electron Laser with a "grid" resonator with variables parameters.....	261
Sytova S. N. First steps in investigation of chaotic dynamics in Volume Free Electron Laser.....	270
Karpovich V. A., Slepyan G. Ya., Rodionova V. N., Volinets G. I., Savuk A. A., Tanana O. V., Grinchuk I. A. Electrodynamics of special high-quality resonance systems and microwave technologies.....	290

MAGNETIC FIELDS CUMULATION

Baryshevsky V. G., Gurinovich A. A. Influence of radiative losses on the oscillation processes in the circuit "flux compression generator – capacitive load".....	321
Sytova S. N., Tikhomirov V. V., Cherkas S. L. One-dimensional and two-dimensional models of the helical flux compression generator: numerical analysis and comparison with experiment.....	327

METHODS OF MATTER ANALYSIS

Doinikov A. A. Spatio-temporal dynamics of microbubble contrast agents in ultrasound fields.....	336
Shekhtman A. Protein chemical ligation as an invaluable tool for structural NMR.....	353
Kutsen S. A., Khrutchinsky A. A., Minenko V. F., Kuhta T. S. Implementation of Monte carlo simulations for assessment of dose burdens on the tissues and organs of patients during diagnostic x-ray investigations	359
Ivanov V. I., Lazarchik A. N. Conception, tasks and results of constructing computer system of cytogenetic monitoring of population of Republic of Belarus in the postchernobyl period.....	379
Charapitsa S. V., Bychkow S. M., Kavalenka A. M., Mazanik A. L., Makajed M. M., Hremiaka N. N., Kuzmiankou D. E., Luchynina J. L. Determination of the basic inspected diesel fuels parameters by gas chromatograph method.....	392
Charapitsa S. V., Bychkov S. M., Kovalenko A. N., Mazanik A. L., Selezmina N. M., Seredinskaya O. B. The basic component (solvent) as the internal standard in the chromatographic quantity determination of impurities.....	402

Научное издание

**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ
И ПРИКЛАДНЫЕ ФИЗИЧЕСКИЕ
ИССЛЕДОВАНИЯ
2002–2009 гг.**

Сборник научных трудов

В авторской редакции

Технический редактор *Г. М. Романчук*

Корректор *Н. П. Ракицкая*

Компьютерная верстка *С. Н. Сытовой*

Ответственный за выпуск *А. Г. Купцова*

Подписано в печать 22.05.2009. Формат 70×100/16. Бумага офсетная.
Гарнитура Таймс. Печать офсетная. Усл. печ. л. 31,95.
Уч.-изд. л. 25,23. Тираж 200 экз. Зак.

Белорусский государственный университет.
ЛИ № 02330/0494425 от 08.04.2009.
220030, Минск, проспект Независимости, 4.

Отпечатано с оригинала-макета заказчика.
Производственное республиканское унитарное предприятие
«Минсктиппроект».
ЛП № 02330/0494102 от 11.03.2009.
220123, Минск, ул. В. Хоружей, 13/61.